UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

"MOBILIDADE ELETRÔNICA EM POÇOS QUÂNTICOS PARABÓLICOS DE ALGAAS"

RODRIGO MIGOTTO SERAIDE

Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências "Física Básica"

USP/IFSC/SBI
8-2-001386

Orientador:
Prof. Dr. Guo-Qiang Hai

Comissão Julgadora:
Prof. Dr. Guo-Qiang Hai (IFSC-USP)
Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes (IFSC-USP)
Prof. Dr. Salviano de Araújo Leão (USF)

São Carlos – São Paulo
2001

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

Caixa Postal 369
13560-970 São Carlos, SP
Av. Trabalhador São-carlense, 400,
13566-590 São Carlos, SP

Fone/Fax 16 273 9777
www.if.sc.usp.br
wladerez@if.sc.usp.br

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE RODRIGOMIGOTTO SERAIDE APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 20 DE ABRIL DE 2001

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Guo Qiang Hai/IFSC-FCM-USP

Prof. Dr. José Carlos Egues de Menezes/IFSC-FFI-USP

Prof. Dr. Salviano de Araújo Leão/USF

Dedico esta obra a meus pais,

Carmelito e Carolina Seraide.

Agradecimentos

Ninguém consegue muita coisa sem a contribuição dos outros, e esta dissertação não foi uma exceção. Tenho muito a agradecer meu orientador Prof. Dr. Guo-Qiang Hai, pela paciência e atenção ao me orientar. Nos momentos difíceis da dissertação podia contar com a sua presença, algo difícil de se obter por ser uma pessoa muito ocupada. Seu acompanhamento foi essencial para a finalização deste trabalho. Outra pessoa a quem devo muito é o amigo Dr. José Camilo Barbosa. Por estarmos na mesma sala ele me ajudava frequentemente na elaboração do projeto, muitas coisas não teria conseguido fazer sem seus conselhos. Ao Dr. Marcos Tavares agradeço pelas discussões sobre o projeto, as quais foram muito úteis. Agradeço também pela amizade de Rafael Scapin.

Aos amigos que iniciaram o mestrado junto comigo entre eles Newton Martins Barbosa, Milton Sonoda, Leandro da Silva Aguiar, Wânius Garcia, Tânia Patrícia Simões e Marcel Novaes, agradeço pela ajuda na conclusão das disciplinas e pelas discusões de temas diversos como filosofia e educação.

Conviver em uma cidade sem conhecer muitas pessoas torna-se uma tarefa difícil. A convivência com as pessoas certas torna esta tarefa mais amena e descontraída, agradeço pelos momentos agradáveis de convívio com Leandro da Silva Aguiar, Eliandro Resende, Rérison Vasquez e Alexandre Sechinato.

Sem o apoio dos familiares poucas pessoas conseguem sobreviver neste mundo. Posso me considerar um felizardo por ter minha família sempre ao meu lado. Agradeço aos meus pais Carmelito e Carolina e irmãos Pablo e Patrícia Seraide pelo apoio e incentivo. A presença de Ágata Giancoli foi essencial em muitos momentos de dificuldades, sou-lhe grato pelo carinho e atenção.

Durante o desenvolvimento desta dissertação conheci muitas pessoas que me ajudaram e incentivaram para a conclusão deste trabalho. Não irei escrever seus nomes, pois são tantas que eu precisaria de muitas páginas para que eu não cometesse a injustiça de esquecer alguém. Sou grato a todos estes novos amigos, mas gostaria de destacar alguns que vieram de Rio Claro e acompanharam bem de perto o desenvolvimento deste trabalho, são eles Fábio Aurélio Bonk, Leandro Vinícius, Alessandra Riposati, Sílvia Pinto, Antônio Joaquim e Antônio Seridônio.

Antes de encerrar os agradecimentos gostaria de destacar uma pessoa pela qual tenho muita consideração. O Prof. Dr. Makoto Yoshida me incentivou na continuidade dos estudos e me apresentou a professores do IFSC. Sem seu incentivo com certeza eu não teria iniciado o mestrado.

Agradeço a FAPESP pelo apoio financeiro.

Muita gratidão a todos vocês.

Abstract

In this work we study the electronic structure and electron mobilities in doped wide parabolic quantum wells of $Al_xGa_{1-x}As$. The subband energies, the wavefunctions, and the effective confining potential profile are obtained by studying self-consistently the coupled Schrödinger and Poisson equations. Based on the numerical results of the electronic structure, we calculate the quantum and transport mobilities of the system. Usually several subbands are occupied in such systems and they are strongly coupled to each other, the intersubband interaction shows the same importance as the intrasubband one to the electronic transport. We study and analyze the electron mobility of each subband due to the ionized donor scattering and the alloy scattering. We also show the effect of ionized background acceptor impurity scattering.

Resumo

Neste trabalho estudamos as estruturas e as mobilidades eletrônicas em um sistema quase-bidimensional de poços quânticos parabólicos de $Al_xGa_{1-x}As$ dopados. Obtemos as auto-energias, as funções de onda e os perfis dos potencias de confinamento efetivo no sistema, através das soluções numéricas das equações de Schrödinger e de Poisson de forma autoconsistente. Em particular, estudamos as mobilidades quântica e de transporte nestes sistemas. Devido a ocupação de várias sub-bandas nestes sistemas, as contribuições dos espalhamentos intersub-bandas para as mobilidades têm a mesma importância que os espalhamentos intra-sub-bandas. Obtemos as mobilidades de cada sub-banda devido aos espalhamentos por impurezas doadoras e aceitadoras ionizadas e por potencial de liga. Analisamos os efeitos das distribuições de doadores dopados, de aceitadores de fundo e do potencial de *gate* externo.

Conteúdo

Lista de Abreviaturas.....i

Lista de Figuras.....ii

1 Introdução.....1

2 Estrutura Eletrônica e Método Numérico.....5

2.1 Formação dos Poços Quânticos Parabólicos.....5

2.2 Estrutura Eletrônica.....8

2.3 Cálculo Autoconsistente.....12

3 Mecanismos de Espalhamento.....16

3.1 Espalhamento por Impurezas Ionizadas.....18

3.2 Espalhamento por Potencial de Liga.....24

4 Equação de Transporte.....29

4.1 Equação de Boltzmann.....30

4.1.1 Colisões.....34

4.1.2 RTA (Relaxation Time Approximation).....37

4.2 As Mobilidades.....40

4.3 Análise Experimental das Mobilidades.....42

4.3.1 Análise da Mobilidade de Transporte.....42

4.3.2 Análise da Mobilidade Quântica.....44

5 Resultados.....46

5.1 As Mobilidades no WPQW de Modelo A.....48

5.2 As Mobilidades no WPQW de Modelo B.....59

6 Conclusão.....63

7 Referências.....65

Lista de Abreviaturas

MOCVD – metal-organic chemical vapor deposition

MBE – molecular beam epitaxy

HEMT – high electron mobility transistor

PQW – parabolic quantum well

WPQW – wide parabolic quantum well

FIR – far-infrared

RTA – relaxation time approximation

Quase-2D – quasi-bidimensional

2DEG – bidimensional electron gas

Lista de Figuras

Figura 2-1: Potenciais de confinamento para os poços quânticos parabólicos de largura 760 Å, com diferentes variações de x.

Figura 2-2: Distribuição das impurezas nos modelos (A) e (B).

Figura 2-3: Densidade de estados em um sistema quase-2D, em função da energia.

Figura 2-4: Fluxograma de um cálculo autoconsistente.

Figura 2-5: Níveis de energia calculados autoconsistentemente para o poço quântico de modelo A. Para estes resultados, W_{QW} = 760 Å, $W_{D,E}$ = 20 Å, $Z_{D,E}$ = 290 Å, $W_{D,D}$ = 100 Å, $Z_{D,D}$ = 1510 Å e $n_A = 10^{15}$ cm^{-3}.

Figura 2-6: Potencial autoconsistente e as funções de onda dos três primeiros níveis, sendo que apenas um está ocupado. As circunstâncias em que fizemos os cálculos são: $N_{D,E} = 1.5\text{x}10^{11}$ cm^{-2}, $W_{D,E}$ = 20 Å, $Z_{D,E}$ = 290 Å, $N_{D,D} = 1.5\text{x}10^{11}$ cm^{-2}, $W_{D,D}$ = 100 Å e $Z_{D,D}$ = 1510 Å.

Figura 5-1: Estruturas usadas para os cálculos das mobilidades quântica e de transporte. Nesta figura mostramos as três camadas de impurezas doadoras, onde uma delas ($N_{D,B}$) varia sua posição entre 520 Å $\leq Z_{D,B} \leq$ 1240 Å.

Figura 5-2: Mobilidades (a) quântica e (b) de transporte, devido aos espalhamentos de impurezas doadoras ionizadas, ao potencial de liga e impurezas aceitadoras.

Figura 5-3: Mobilidades (a) quântica e (b) de transporte calculadas em função da densidade dos elétrons através da variação do *gate* externo aplicado na direção -*z*.

Figura 5-4: Mobilidades (a) quântica e (b) de transporte em função da posição da tercira camada de impurezas doadoras.

Figura 5-5a: Mobilidade de transporte devido aos espalhamentos por impurezas ionizadas, impurezas aceitadoras e por potencial de liga.

Figura 5-5b: Comparação dos resultados experimentais e dos resultados teóricos, baseados no trabalho de G. Salis *et al.*

Figura 5-6: Mobilidades (a) quântica e (b) de transporte calculadas para os espalhamentos por impurezas doadoras, impurezas aceitadoras e potencial de liga.

Figura 5-7: Mobilidades (a) quântica e (b) de transporte, devido aos espalhamentos por impurezas doadoras, impurezas aceitadoras e por potencial de liga.

Capítulo 1

Introdução

Os avanços nas técnicas de crescimento de materiais semicondutores, como MOCVD (*metal-organic chemical vapor deposition*) e MBE (*molecular beam epitaxy*) [**1,2**], têm oferecido a possibilidade de obtermos novas estruturas de baixa dimensionalidade. Nestes novos sistemas semicondutores, os materiais básicos são binários tais como GaAs e InP. Combinando mais elementos chegamos a sistemas ternários como $Al_xGa_{1-x}As$, $In_xGa_{1-x}As$ e quaternários como $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$. A maioria destes materiais têm uma alta mobilidade e banda de *gap* direto, que são características de importância essencial para as aplicações em dispositivos opto-eletrônicos [**3,5**]. Combinando diferentes materiais binários ou ternários, as bandas de condução e de valência podem ser controladas e manipuladas. Isto é chamado de engenharia de *gap* de banda (*band-gap engineering*), que em combinação com a técnica de dopagem exatamente controlada têm levado a uma riqueza de novos efeitos físicos e suas aplicações, tais como laser de poços quânticos e HEMT (*high-electron mobility transistor*).

Uma destas estruturas de baixa dimensionalidade é conhecida como poço quântico parabólico (PQW – *parabolic quantum well*). Os PQW's construídos a base de GaAs têm sido obtidos pela variação da concentração molar x do Al na liga

ternária $Al_xGa_{1-x}As$ [**6-8**]. PQW's largos (WPQW - *wide parabolic quantum well*) dopados remotamente têm sido propostos como estruturas onde uma camada larga de elétrons quase-uniforme pode ser realizada com uma largura na faixa de 1000 Å. Usando a técnica de dopagem remota (*remote doping*), tal estrutura possui uma alta densidade eletrônica e também uma alta mobilidade. Experimentos de magnetotransporte nestes sistemas confirmaram a existência de uma camada larga de gás de elétrons a alta mobilidade ($\sim 5\times10^5$ cm^2/Vs). Devido a grande largura desta camada de gás de elétrons, este sistema também é chamado de gás de elétrons quase-tri-dimensional. Tais estruturas estão proximamente relacionadas com a construção do modelo teórico de *jellium*, o qual consiste de um gás de elétrons altamente móvel em um potencial de fundo carregado positivamente. É interessante notar que nestes sistemas a frequência característica Ω do PQW, é determinada somente pela curvatura do potencial de confinamento e que ela é igual a frequência de plasma do gás de elétrons tri-dimensional, o que é uma consequência do teorema generalizado de Kohn [**9**].

Estudos de magneto-transporte e espectro de infra-vermelho (FIR-*far-infrared*) têm mostrado uma grande variadade de novos resultados que facilitam a compreensão de muitas propriedades fundamentais de sistemas de baixas dimensões [**6-13**]. A espectroscopia de FIR em tais sistemas forneceu informações do teorema de Kohn generalizado [**9**], isto é, um PQW perfeito absorve radiação infravermelha na frequência característica Ω independentemente da interação elétron-elétron e da densidade eletrônica no poço. Deste modo, isto tem um impacto sobre a compreensão da resposta do infravermelho em fios quânticos quase-uni-dimensionais ou pontos quânticos quase-zero-dimensionais onde os potenciais de confinamento, na maioria dos casos, podem ser considerados como parabólicos. Potenciais parabólicos

de confinamento são muito atrativos, visto que permitem os cálculos de muitas propriedades de uma forma analítica e rigorosa.

Um sistema quase-tri-dimensional é caracterizado por um sistema quase-bidimensinal largo e com várias sub-bandas ocupadas [**6**]. Neste trabalho, estudamos as estruturas e as mobilidades eletrônicas em um sistema de poço quântico parabólico de AlGaAs a baixa temperatura. Em geral, um PQW realizado experimentalmente não é um poço perfeitamente parabólico. As impurezas dopadas no sistema também alteram a estrutura eletrônica do sistema. Nossos resultados numéricos das soluções autoconsistentes das equações de Schrödinger e de Poisson mostram claramente os efeitos de dopagem, *gate* externo e de outros parâmetros sobre as estruturas eletrônicas.

A contribuição mais importante deste trabalho está concentrada no estudo detalhado das mobilidades de transporte (relacionada com a condutividade do sistema) e das mobilidades quânticas (definida pelo tempo de vida quântico dos elétrons) [**14**] neste sistema. Calculamos e analisamos as mobididades eletrônicas em cada sub-banda. Devemos lembrar que a mobilidade eletrônica não é apenas um parâmetro físico que mede a condutividade eletrônica, mas também um parâmetro importante que mede a qualidade da amostra. As mobilidades eletrônicas podem ter um efeito significativo nos espectros ópticos como absorção no infravermelho e espalhamento Raman em um gás de elétrons.

Nos últimos 20 anos as propriedades de transporte em sistemas semicondutores bidimensionais foram estudas intensivamente. Devido a separação dos elétrons livres e dos dopantes, as heteroestruturas semicondutoras de GaAs/AlGaAs dopadas remotamente resultam numa alta mobilidade eletrônica da ordem de 2×10^7 cm^2 /Vs. Neste sistema, o espalhamento de impurezas ionizadas

ainda é o principal mecanismo de espalhamento, limitando a mobilidade eletrônica a baixas temperaturas. Este efeito é devido ao fato de o potencial coulombiano das impurezas ionizadas ser de longo alcance. Por outro lado, o próprio gás de elétrons tem um papel importante na redução do espalhamento, ou seja, efeito de blindagem. Num sistema quase-bidimensional com várias sub-bandas ocupadas, os mecanismos de transporte e as interações eletrônicas ficam muito mais complicados que nos sistemas bidimensionais ou tri-dimensionais ideais. A presença de várias sub-bandas no sistema introduz interações entre os elétrons de diferentes sub-bandas, os quais podem afetar significativamente as propriedades eletrônicas do sistemas. Embora vários trabalhos teóricos e experimentais sobre o transporte eletrônico foram realizados em PQW's, os mecanismos de espalhamento e a mobilidade eletrônica ainda não são bem entendidos **[15,16]**.

Neste trabalho levamos em conta os mecanismos de espalhamento de impurezas doadores ionizadas, de fundo de aceitadores e de potencial de liga. Consideramos a blindagem do gás de elétrons usando o formalismo da matriz dielétrica de multisub-bandas.

Esta dissertação possui 6 capítulos. No capítulo 2 descrevemos a estrutura eletrônica de um WPQW; Também discutimos o método numérico para calcularmos as autofunções e as auto-energias dos elétrons no sistema. No capítulo 3 discutimos teoricamente os mecanismos de espalhamento. Apresentamos os elementos de matriz de espalhamento devido as impurezas ionizadas e ao potencial de liga. Já no capítulo 4 apresentamos e resolvemos a equação de transporte, definimos as mobilidades de transporte e quântica. No capítulo 5 apresentamos e discutimos os resultados obtidos para as mobilidades eletrônicas em WPQW e deixamos para o capítulo 6 nossas conclusões.

Capítulo 2

Estrutura Eletrônica e Método Numérico

Neste capítulo efetuamos os cálculos necessários para modelarmos teoricamente os WPQW's. Na primeira seção falamos sobre a estrutura eletrônica do sistema [17-19], onde mostramos a forma dos WPQW's estudados antes e depois dos cálculos autoconsistentes. Já na segunda seção, discutimos o método autoconsistente para os cálculos das funções de onda e das auto-energias dos sistemas abordados.

2.1. Formação dos Poços Quânticos Parabólicos

As estruturas de poços quânticos parabólicos que iremos estudar são diferenciadas pela concentração molar x do Al no composto ternário $Al_xGa_{1-x}As$. Estudamos dois modelos de poços quânticos parabólicos com $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ ($x = 0.3$) como o material de barreira. Dentro dos poços, variamos o valor de x de duas maneiras para formar os poços quânticos parabólicos: **(A)** x varia entre os valores $0 \leq x \leq 0.1$ e **(B)** x varia entre os valores $0 \leq x \leq 0.3$. O potencial de confinamento é diferente para os dois modelos, por isso é necessário que saibamos como o potencial

varia com a concentração do Al. Desta forma, utilizamos a relação *V(x)* entre a energia e a concentração do Al, que é a *off-set* de banda de condução entre GaAs e $Al_xGa_{1-x}As$ dada pela seguinte forma [**20**]

$$V(x) = 0.6 \times \left(1.155x + 0.37x^2\right) \text{ eV}. \tag{1}$$

Os nossos modelos são descritos pelo potencial parabólico unidimensional

$$V_C(z) = \begin{cases} 4V_b(z - z_C)^2 / W_{QW}^2, & |z - z_C| \leq W_{QW} \\ V_B, & |z - z_C| > W_{QW} \end{cases}, \tag{2a}$$

onde W_{QW} e z_C são, respectivamente, a lagura e o centro do poço parabólico e V_B = V(x=0.3) = 228 meV é altura da barreira do poço. No centro do poço temos x = 0. Desta forma, encontramos

$$V_b = \begin{cases} V(0.1) = 72\, meV, & \text{modelo A} \\ V(0.3) = 228 meV, & \text{modelo B} \end{cases}. \tag{2b}$$

Uma vez que a parábola (2a) não é infinita, ou seja ela é cortada definimos as posições $z_1 = z_C - W_{QW}/2$ e $z_2 = z_C + W_{QW}/2$ como o início e o fim do poço, respectivamente.

Igualando as equações (1) e (2a), encontramos uma relação entre a concentração de Al e a variável z. Desta igualdade chegamos a forma genérica do potencial de confinamento. Substituindo os valores de x que utilizamos para

construir nossos potenciais de confinamento, chegamos aos resultados mostrados na figura 2-1.

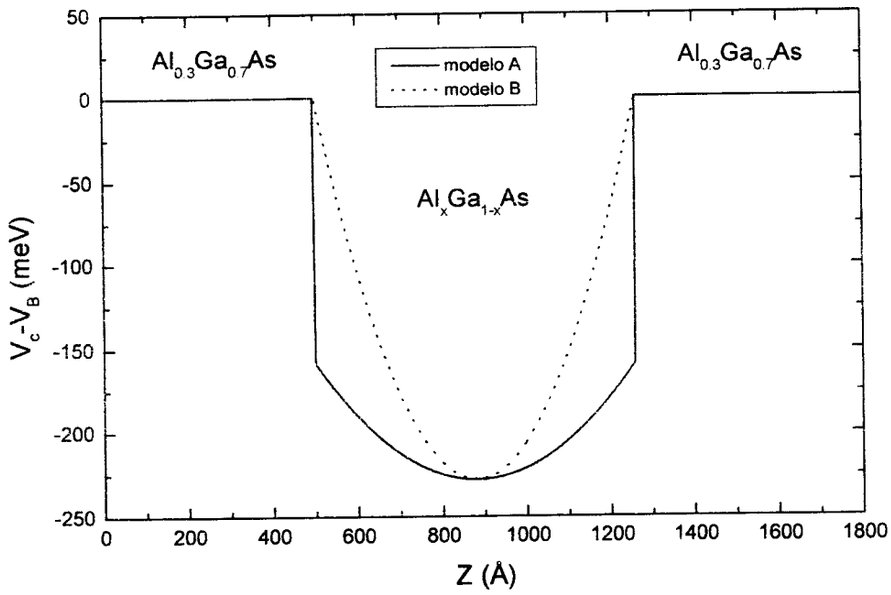


Figura 2-1: Potenciais de confinamento para os poços quânticos parabólicos de largura 760 Å, com diferentes variações de x.

A partir dos modelos A e B da figura 2-1, consideraremos duas camadas de impurezas doadoras dopadas com as seguintes distribuições

$$n_D(z) = \begin{cases} N_{D,E}/W_{D,E}, & |z - z_{D,E}| < W_{D,E}/2 \\ N_{D,D}/W_{D,D}, & |z - z_{D,D}| < W_{D,D}/2 \\ 0, & |z - z_{D,E/D}| > W_{D,E/D}/2 \end{cases}, \qquad (3)$$

onde $N_{D,E}$ e $N_{D,D}$ são respectivamente as densidades. $W_{D,E}$ e $W_{D,D}$ as larguras das camadas e $z_{D,E}$ e $z_{D,D}$ as posições camadas de impurezas doadoras a esquerda e a direita dos WPQW's, respectivamente. Em uma amostra real de GaAs, sempre

IFSC USP BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

existe fundo de impurezas aceitatoras. Consideramos esses aceitadores distribuidos uniformamente no nosso sistema com uma densidade n_A na ordem de $10^{14} \sim 10^{15} cm^{-3}$. A distribuição das impurezas pode ser vista na figura 2-2

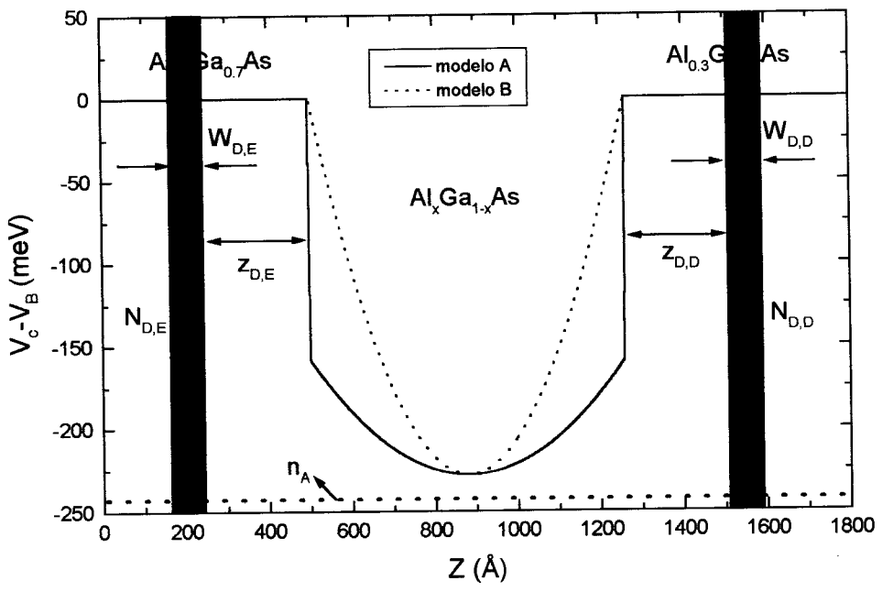


Figura 2-2: Distribuição das impurezas nos modelos (A) e (B).

2.2. Estrutura Eletrônica

Na teoria de massa efetiva, a energia e a função de onda de um elétron em sistemas quase-bidimensionais podem ser escritas como [**14**]

$$\varepsilon_n(\vec{k}_{\parallel}) = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_{\parallel}^2 \tag{4}$$

e

$$\psi_{n,\vec{k}_{\parallel}}(x,y,z)=\psi_n(z)\frac{1}{\sqrt{A}}e^{i\vec{k}_{\parallel}\cdot\vec{r}_{\parallel}} \tag{5}$$

onde $n=1,2,...$ é o índice das sub-bandas, $\vec{r}_{\parallel}$ e $\vec{k}_{\parallel}$ são respectivamente, a posição e o vetor de onda do elétron no plano xy, E_n é a energia da sub-banda, $\psi_n(z)$ é a função de onda do elétron na direção z, $\varepsilon(\vec{k}_{\parallel})=\hbar^2k_{\parallel}^2/2m^*$ é a energia cinética do elétron, m^* é a massa efetiva eletrônica e A é a área da amostra.

A densidade de estados eletrônicos de cada sub-banda é uma constante e a densidade de estados total da banda de condução é dada por [**19**]

$$\rho(E)=\sum_n \frac{m^*}{\pi\hbar^2}\Theta(E-E_n), \tag{6}$$

onde $\Theta(E)$ é a função passo definida por

$$\Theta(E)=\begin{cases}1 & E>0\\ 0 & E<0\end{cases}. \tag{7}$$

A densidade de estados (6) pode ser vista na figura 2-3.

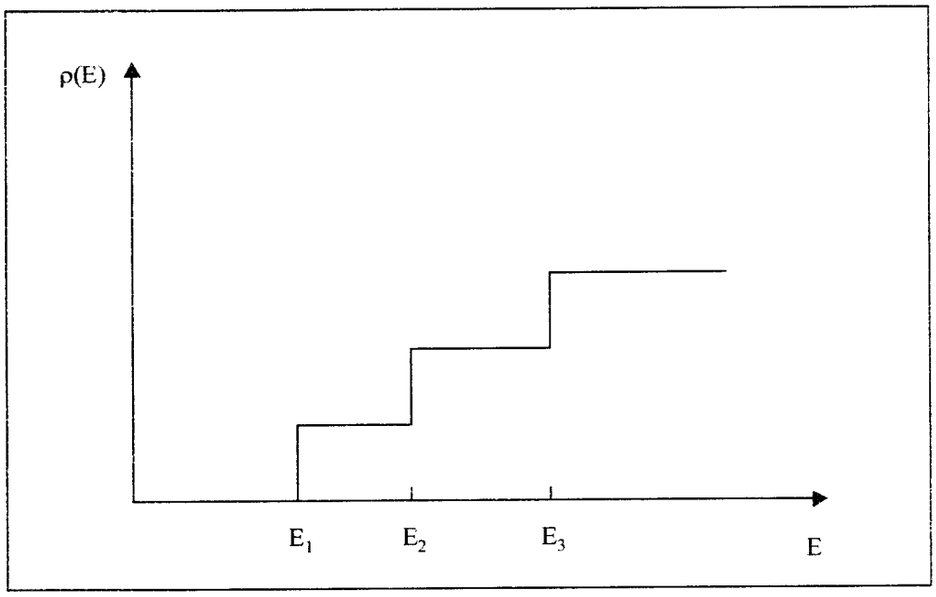


Figura 2-3: Densidade de estados em um sistema quase-2D, em função da energia.

As energias E_n e as funções de onda $\psi_n(z)$ de cada sub-banda são obtidas através das soluções do acoplamento das equações unidimensionais de Schrödinger e de Poisson.

A equação de Schrödinger unidimensional na direção z é dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi_n(z)}{dz^2}+V_{sc}(z)\psi_n(z)=E_n\psi_n(z) \qquad (8)$$

onde $V_{sc}(z)=V_c(z)+V_H(z)$ é o potencial de confinamento efetivo, que é composto pela soma do potencial de confinamento $V_c(z)$ (figura 2-1) e pelo potencial de Hartree $V_H(z)$. O potencial de Hartree manifesta-se devido a interação eletrostática dos elétrons com eles mesmos e com as impurezas ionizadas e, é calculado pela equação de Poisson

$$\frac{d^2V_H}{dz^2} = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0}\left[n_e(z) - n_D(z) + n_A(z)\right], \tag{9}$$

onde n_e é a distribuição da concentração eletrônica, n_A é a concentração de fundo de aceitadores ionizados e n_D é a distribuição das impurezas doadoras (3). Em (9) estamos assumindo que todos os doadores estão ionizados. A temperatura zero, a distribuição eletrônica é obtida por

$$n_e(z) = \sum_{n=1}^{N} |\psi_n(z)|^2 \int_{E_n}^{E_F} \rho(E)dE\,, \tag{10}$$

onde N é o número de sub-bandas ocupadas, $\rho(E)$ é a densidade de estados eletrônicos do sistema e E_F é a energia de Fermi.

A densidade total de elétrons

$$N_e = \int_{-\infty}^{\infty} n_e(z)dz\,, \tag{11}$$

é determinada pela diferença entre $N_D = N_{D,E} + N_{D,D}$, que é a soma das densidades das impurezas por unidade de área e N_A, que é a densidade de aceitadores ionizados por unidade de área, ou seja

$$N_e = N_D - N_A\,. \tag{12}$$

2.3. Cálculo Autoconsistente

O princípio básico do cálculo autoconsistente é simples e pode ser acompanhado pelo fluxograma mostrado na figura 2-4.

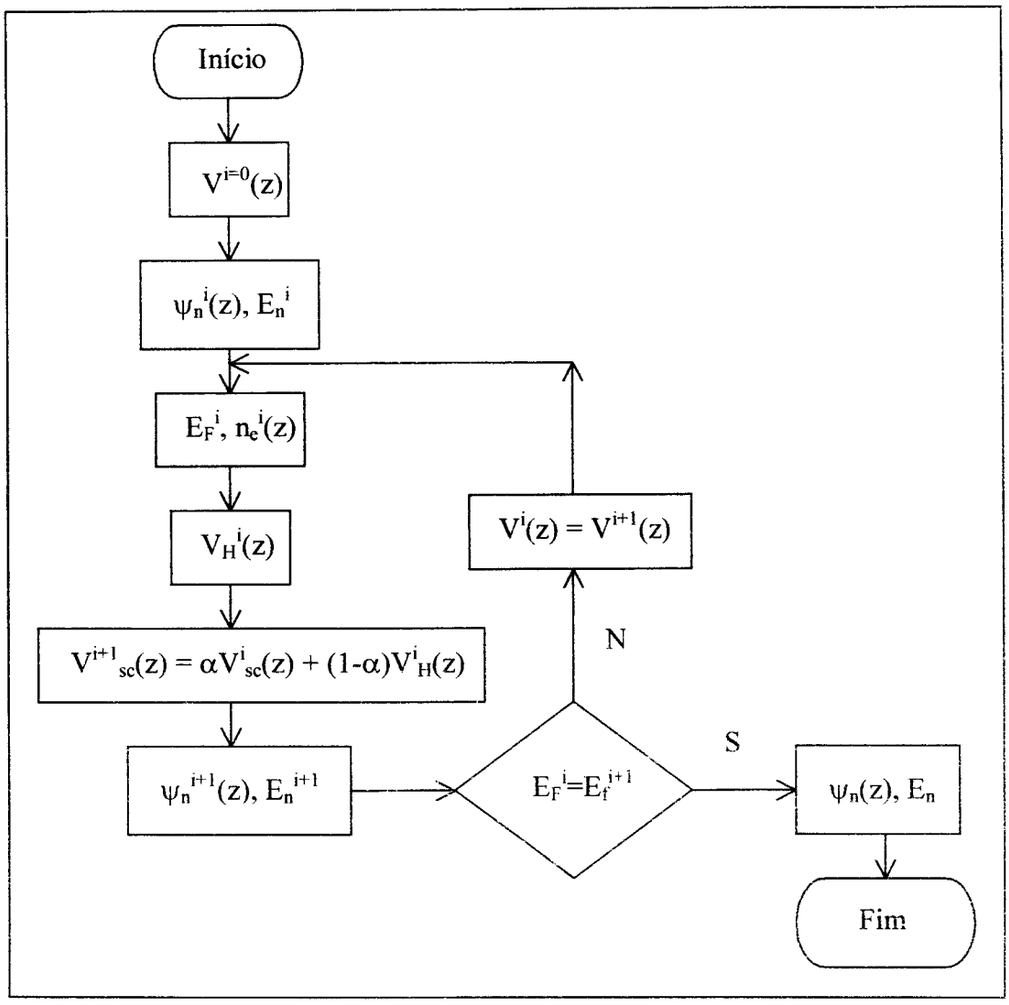


Figura 2-4: Fluxograma de um cálculo autoconsistente.

A figura 2-4 ilustra o algorítimo do cálculo autoconsistente [**21**], neste exemplo o estamos aplicando para a resolução dos WPQW's da figura 2-2.

Como ilustração do cálculo autoconsistente vamos mostrar as auto-energias e logo em seguida o potencial autoconsistente $V_{sc}(z)$. Na figura 2-5 mostramos a diferença entre as auto-energias e a energia de Fermi para o poço parabólico, em que a concentração do Al varia entre os valores $0 \leq x \leq 0.1$. Consideramos uma densidade de fundo de aceitadores $n_A=10^{15}$ cm^{-3}. Para este resultado, plotamos as diferença das energias em função da variação das densidades de doadores das dopagens.Incialmente cada camada contém N = 1.5x10^{11} cm^{-2}, no decorrer dos cáculos o valor i da densidade inicial em cada camada sofre um acréscimo em cada iteração do processo de convergência até atingir o valor máximo de N = 4.0x10^{11} cm^{-2}, totalizando uma densidade de doadores igual a N_D = 8.0x10^{11} cm^{-2}.

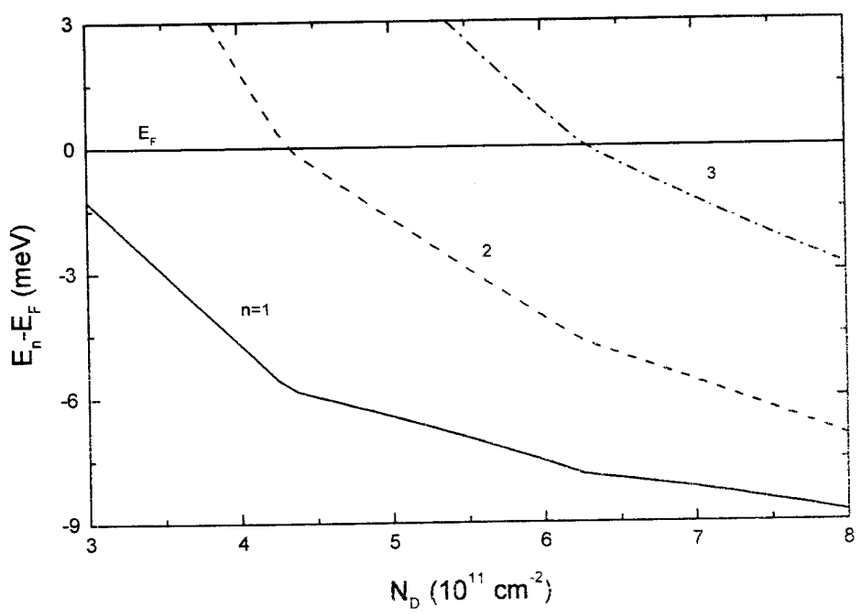


Figura 2-5: Níveis de energia calculados autoconsistentemente para o poço quântico do modelo A. Para estes resultados, W_{QW} = 760 Å, $W_{D,E}$ = 20 Å, $Z_{D,E}$ = 290 Å, $W_{D,D}$ = 100 Å, $Z_{D,D}$ = 1510 Å e n_A = 10^{15} cm^{-3}.

Notamos que os níveis de energia vão sendo ocupados a medida que aumentamos o valor da densidade de doadores. Na figura 2-6 ilustramos o potencial autoconsistente para o modelo A e, também aproveitamos para mostrar as três primeiras autofunções. Neste resultado o valor de cada uma das camadas doadoras é de $N_D = 1.5\text{x}10^{11}$ cm^{-2}.

Na figura 2-6 o campo elétrico na posição z = 0 é de $F = -1{,}9\text{x}10^4$ V/cm, que corresponde a uma estrutura infinita de poço quântico com uma densidade de aceitadores de fundo $n_A = 10^{15}$ cm^{-2}.

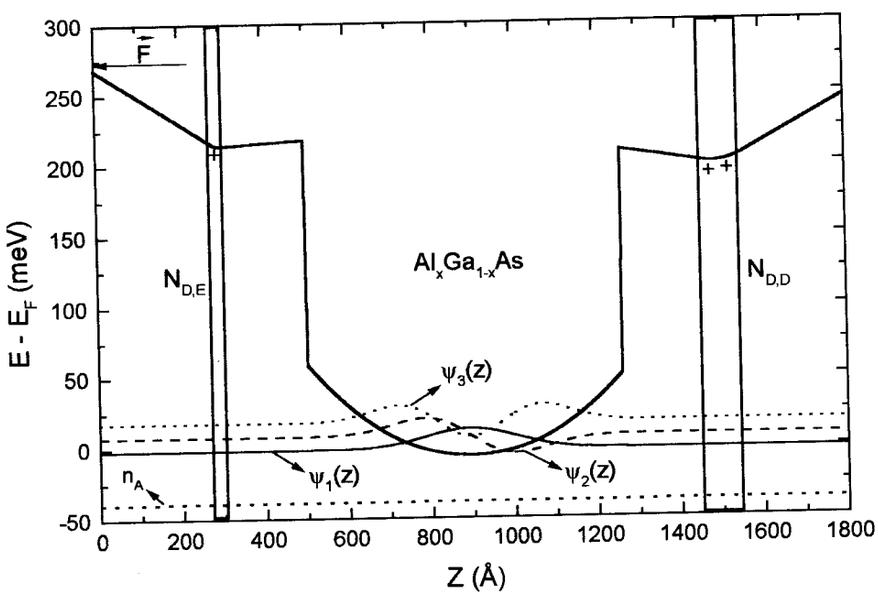


Figura 2-6: Potencial autoconsistente e as funções de onda dos três primeiros níveis, sendo que apenas um está ocupado. As circunstâncias em que fizemos os cálculos são: $N_{D,E}$ = $1.5\text{x}10^{11}$ cm^{-2}, $W_{D,E}$ = 20 Å, $Z_{D,E}$ = 290 Å, $N_{D,D}$ = $1.5\text{x}10^{11}$ cm^{-2}, $W_{D,D}$ = 100 Å e $Z_{D,D}$ = 1510 Å.

Capítulo 3

Mecanismos de Espalhamento

As propriedades de transporte eletrônico em semicondutores são primeiramente determinadas pela (i) estrutura eletrônica do sistema e pela (ii) interação dos elétrons com os mecanismos de espalhamento. O estudo das propriedades de transporte eletrônico forneceram importantes informações sobre os processos de espalhamento e é de interesse fundamental na física de semicondutores.

Em estruturas semicondutoras bidimensionais como por exemplo heteroestruturas de GaAs/AlGaAs, a dopagem de doadores e aceitadores é importante para ase obter um gás de elétrons ou buracos bidimensional. Por outro lado, os dopantes ionizados espalham elétrons reduzindo a mobilidade. A interação entre a impureza ionizada e o elétron é o principal processo de espalhamento elástico limitando a mobilidade eletrônica em um sistema quase-2D a baixas temperaturas.

Também existem outros mecanismos de espalhamento em semicondutores quase-2D [17]: espalhamento por fônons acústicos e ópticos e impurezas neutras (não ionizadas); espalhamento devido a rugosidade de interface, o qual torna-se importante em poços quânticos estreitos e o espalhameto devido ao potencial de liga, que aparece em semicondutores ternários e quaternários.

O espalhamento por fônons é uma fonte de espalhamento inevitável nos semicondutores. Ele é dominante a temperaturas ambientes e, no limite de baixas temperaturas pode ser desprezado. Já o espalhamento por impurezas neutras tem uma contribuição muito pequena em qualquer temperatura, pois com o avanço das técnicas de crescimento a densidade de impurezas neutras nas estruturas foram reduzidas a ponto de sua influência nos espalhamentos ser desprezada. Também podemos atribuir ao avanço das técnicas de crescimento a baixa contribuição do espalhamento devido a rugosidade, tornando-o desprezível em comparação a outros mecanismos de espalhamento, como por exemplo o por impurezas ionizadas. A baixas temperaturas, o espalhamento de maior importância é o devido a impurezas ionizadas [**19**]. Mas em estruturas ternárias do tipo $Al_xGa_{1-x}As$ existe a contribuição do espalhamento devido a liga [**22-24**].

O objetivo deste capítulo é discutir os mecanismos de espalhamento mais importantes em PQW, por impurezas ionizadas (doadoras e aceitadoras) e por potencial de liga. Nesta discussão iremos abordar as suas causas, bem como o elemento de matriz necessário para o espalhamento do elétron de um estado para outro. Por estarmos estudando um poço largo, o espalhamento por rugosidade de interface não tem contribuição significativa e iremos desprezá-los.

3.1. Espalhamento por Impurezas Ionizadas

Na tentativa de aumentarmos a condutividade dos dispositivos eletrônicos introduzimos átomos que aumentem sua densidade eletrônica, mas este acréscimo proposital, conhecido como dopagem, tem a desvantagem de aumentar o número de impurezas. As impurezas também podem ser inerentes do dispositivo, pois mesmo com o avanço das técnicas de crescimento epitaxial, não podemos ignorar sua presença na amostra crescida ou mesmo durante seu crescimento. Sua presença no cristal modifica o potencial eletrostático na sua vizinhança, desviando o movimento eletrônico. Estas impurezas dão origem a um potencial flutuante $V(\vec{r})$, o qual induz transições eletrônicas entre os estados diferentes. A taxa de transição de um estado $\left|n\vec{k}_{\parallel}\right\rangle$ para outro $\left|n'\vec{k}_{\parallel}'\right\rangle$ em um sistem quase-2D é descrita pela regra de ouro de Fermi

$$W_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel}'\right)=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle n'\vec{k}_{\parallel}'\middle|V\middle|n\vec{k}_{\parallel}\right\rangle\right|^{2}\delta\left\{\varepsilon_{n'}\left(\vec{k}_{\parallel}'\right)-\varepsilon_{n}\left(\vec{k}_{\parallel}\right)\right\}. \tag{14}$$

onde n é o índice da sub-banda, $\vec{k}_{\parallel}$ é o vetor de onda no plano xy, $\varepsilon_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)$ é a energia eletrônica total mostrada na eq. (4). Já podemos notar a importância do método autoconsistence mostrado no capítulo anterior, pois é dele que obtemos as funções de onda necessárias para o cálculo de (14). No capítulo 4, veremos que a taxa de transição (14) é um elemento importante na teoria de transporte. Esta taxa depende do módulo ao quadrado do elemento de matriz de espalhamento

$$M_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}'_{\parallel}\right)=\left|\left\langle n'\vec{k}'_{\parallel}\middle|V\middle|n\vec{k}_{\parallel}\right\rangle\right|^2 \tag{15}$$

e, esta por sua vez depende do potencial $V(\vec{r})$.

O potencial de espalhamento $V(\vec{r})$ é uma função do potencial eletrostático devido as impurezas ionizadas no sistema, assim

$$V(\vec{r})=-e\phi(\vec{r}), \tag{16}$$

em que $\phi(\vec{r})$ é o potencial eletrostático.

A *priori* vamos considerar o potencial eletrostático devido as impurezas ionizadas. Estamos admitindo que as impurezas estão localizadas em uma posição $\vec{R}_i$ e possuem um potencial eletrostático, o qual chamaremos de potencial externo, dado por

$$\phi^{ext}(\vec{r})=\sum_i \frac{e}{\varepsilon_0\left|\vec{r}-\vec{R}_i\right|} \tag{17}$$

e, sua transformada de Fourier em duas dimensões é

$$\phi^{ext}\left(z,\vec{q}_{\parallel}\right)=\sum_i e^{q_{\parallel}z_i}e^{-i\vec{q}_{\parallel}\cdot\vec{R}_{\parallel i}}\frac{2\pi e^2}{\varepsilon_0 q_{\parallel}}e^{-q_{\parallel}z}, \tag{18}$$

onde ε_0 é a constante dielétrica do meio e

$$\vec{q}_{\parallel} = \vec{k}_{\parallel}' - \vec{k}_{\parallel}. \tag{19}$$

A presença de impurezas ionizadas em um gás de elétrons, provoca um acúmulo de cargas ao seu redor [**18,24,25**]. Este acúmulo altera seu potencial eletrostático funcionando como uma blindagem, por isso o potencial (18) não é unicamente responsável pelo espalhamento dos elétrons. Necessariamente teremos que levar em conta o fenômeno da blindagem e, uma maneira de fazermos isso é relacionando os potenciais eletrostáticos (16) e (18).

Começaremos calculando o elemento de matriz de espalhamento devido ao potencial (16)

$$\begin{aligned} \left\langle n'\vec{k}_{\parallel}' \middle| V(\vec{r}) \middle| n\vec{k}_{\parallel} \right\rangle &= -\frac{e}{A}\int dz\, f_{\alpha}(z)\phi(z,\vec{q}_{\parallel}) \\ &= -\frac{e}{A}\phi_{\alpha}(\vec{q}_{\parallel}) \end{aligned} \tag{20}$$

onde

$$f_{\alpha}(z) = \psi_{n}(z)\psi_{n'}^{*}(z), \tag{21}$$

sendo α o par de índices (nn').

De modo análogo para o potencial (18), chegamos ao seguinte elemento de matriz

$$\phi_{\alpha}^{ext}(\vec{q}_{\parallel}) = \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_0 q_{\parallel}} \sum_i e^{q_{\parallel} z_i} e^{-i\vec{q}_{\parallel}\cdot\vec{R}_i} A_{\alpha}(\vec{q}_{\parallel}), \tag{22}$$

onde

$$A_{\alpha}(\vec{q}_{\parallel}) = \int dz\, f_{\alpha}(z) e^{-q_{\parallel} z}. \tag{23}$$

Para relacionarmos os potenciais (16) e (18), vamos levar em conta que os elétrons respondem linearmente ao campo produzido pelas impurezas. Com esta suposição podemos relacionar linearmente os elementos de matriz (20) e (22) **[25,26]**, ou seja

$$\phi_{\alpha}(\vec{q}_{\parallel}) = \sum_{\beta} (\varepsilon_{\alpha\beta})^{-1} \phi_{\beta}^{ext}(\vec{q}_{\parallel}) \tag{24}$$

onde β denota o par de índices (mm') e $\varepsilon_{\alpha\beta}$ é a função dielétrica descrita em termos da aproximação RPA (randon phase approximation) **[26-28]** dada por

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{q}_{\parallel}) = \delta_{\alpha,\beta} - v_{\alpha\beta}(\vec{q}_{\parallel}) \Pi_{\beta}^{0}(\vec{q}_{\parallel}), \tag{25}$$

sendo $v_{\alpha\beta}(\vec{q}_{\parallel})$ o potencial de Coulomb e $\Pi_{\beta}^{0}(\vec{q}_{\parallel})$ a polarizabilidade, escritas respectivamente como

$$v_{\alpha\beta}(\vec{q}_{\parallel}) = \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_0 q_{\parallel}} F_{\alpha\beta}(q_{\parallel}), \tag{26}$$

$$F_{\alpha\beta}(\vec{q}_{\parallel}) = \int dz \int dz' \, f_{\alpha}(z) e^{-q_{\parallel}|z-z'|} f_{\beta}(z') \tag{27}$$

e

$$\Pi^0_{\beta}(\vec{q}_{\parallel}) = \frac{2}{A} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} \frac{f(E_m(\vec{k}_{\parallel})) - f(E_{m'}(\vec{k}_{\parallel} + \vec{q}_{\parallel}))}{E_{m'}(\vec{k}_{\parallel} + \vec{q}_{\parallel}) - E_m(\vec{k}_{\parallel})}, \tag{28}$$

onde *f(E)* é a distribuição de Fermi-Dirac no equilíbrio.

O elemento de matriz (24) é responsável pelo espalhamento de elétrons de um estado para outro, assim se o substituirmos na eq. (20) teremos

$$\langle n', \vec{k}'_{\parallel} | V(\vec{r}) | n, \vec{k}_{\parallel} \rangle = -\frac{2\pi e^2}{A \varepsilon_0 q_{\parallel}} \sum_i \sum_{\beta} \frac{e^{-i\vec{q}_{\parallel} \cdot \vec{R}_{\parallel_i}}}{\varepsilon_{\alpha\beta}(\vec{q}_{\parallel})} G_{\beta}(\vec{q}_{\parallel}, z_i), \tag{29}$$

onde $\vec{R}_i = (\vec{R}_{\parallel_i}, z_i)$ e

$$G_{\beta}(\vec{q}_{\parallel}, z_i) = \int dz e^{-q_{\parallel}|z-z_i|} f_{\beta}(z). \tag{30}$$

Até aqui admitimos que as impurezas estavam localizadas em posições $\vec{R}_i$ da amostra. Levando em conta as distribuições das impurezas ionizadas e ignorando a correlação entre elas, obtemos o elemento de matriz (29) na seguinte forma

$$\left|M_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}'_{\parallel}\right)\right|^2 = \left(\frac{2\pi e^2}{\varepsilon_0 q_{\parallel}}\right)^2 \int dz_i\, n_D(z_i)\left[\sum_{\beta}\frac{G_{\beta}\left(\vec{q}_{\parallel},z_i\right)}{\varepsilon_{0\alpha\beta}\left(\vec{q}_{\parallel}\right)}\right]^2 . \tag{31}$$

Considerando a distribuição das duas camadas de impurezas doadoras na eq. (3), o elemento de matriz que simboliza o espalhamento dos elétrons devido a todas as impurezas doadoras, é escrito como a soma dos elementos de matriz devido a cada camada de impurezas existente no sistema. Numerando as camadas, podemos reescrever (31) como

$$\left|M_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}'_{\parallel}\right)\right|^2 = \left(\frac{2\pi e^2}{\varepsilon_0 q_{\parallel}}\right)^2 \sum_{j=1}^{M}\frac{N_j}{W_j}\int_{-W_j/2}^{W_j/2} dz_j\left[\sum_{\beta}\frac{G_{\beta}\left(\vec{q}_{\parallel},z_j\right)}{\varepsilon_{\alpha\beta}\left(\vec{q}_{\parallel}\right)}\right]^2 \tag{32}$$

onde $j = 1,2, \ldots,M$ simboliza o número de camadas existentes no sistema, com largura e densidade W_j e N_j, respectivamente.

Para o espalhamento por impurezas aceitadoras de fundo, os cálculos para o elemento de matriz de espalhamento (32) são análogos aos feitos para o espalhamento devido a impurezas doadoras. Desta forma, a integral na eq. (31) tem que ser calculada levando em conta a concentração de impurezas aceitadoras n_A, existentes no sistema.

3.2. Espalhamento por Potencial de Liga

Em compostos ternários de semicondutores do tipo $A_xB_{1-x}C$, os elementos A e B são distribuídos aleatoriamente entre os átomos C. Esta distribuição forma um potencial aleatório para o potencial da rede cristalina, conduzindo para um processo de espalhamento eletrônico adicional conhecido como espalhamento de liga [**22,23,29**].

Para melhor enterdermos a origem do espalhamento de liga, é importante que tenhamos uma idéia de como é a estrutura dos compostos que estamos estudando. Os compostos binários do grupo III-V da tabela periódica, como por exemplo o GaAs, o AlAs, para simplificar a notação AC ou BC, têm uma estrutura cristalina chamada de zincblende. Esta estrutura é formada por duas redes *fcc* interpenetrantes, uma delas contém apenas átomos do tipo A e a outra átomos do tipo C. Já para os compostos ternários $A_xB_{1-x}C$, ainda continuamos a ter uma estrutura zincblende, mas com a diferença de que uma das redes *fcc* é formada apenas pelos átomos C e a outra possui uma distribuição aleatória dos átomos A com uma concentração de x moles e, dos átomos B com $(1-x)$ moles. Este último modelo trás um efeito conhecido como "liga pseudobinária" [**22**], pois tem-se a impressão de possuir duas estruturas *fcc* uma AC e a outra BC.

Uma consequência dos compostos ternários é a quebra da periodicidade do potencial da rede. Para contornarmos este problema iremos discutir o conceito do cristal virtual. Nordhein [**30**] dividiu o potencial cristalino em dois. O primeiro forma um conjunto de potencias perfeitamente periódicos (cristal virtual). O segundo é formado pela diferença entre o potencial cristalino original com o potencial do cristal

virtual, dando origem ao potencial aleatório. Esta parte aleatória foi usada como um potencial perturbativo conduzindo a um elemento de matriz para a transição entre dois estados eletrônicos.

No composto ternário, o potencial cristalino tem a seguinte forma

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{a}} \left[V_A(\vec{r}-\vec{a}) + V_B(\vec{r}-\vec{a})\right] + \sum_{\vec{R}_C} V_C\left(\vec{r}-\vec{R}_C\right), \tag{33}$$

onde $\vec{a}$ é a localização dos átomos A e B. V_A, V_B e V_C são os potenciais devidos aos átomos A, B e C, respctivamente. $\vec{R}_C$ é a localização dos átomos C. Seguindo o trabalho de Nordheim, o potencial virtual é escrito como

$$V_1(\vec{r}) = \sum_{\vec{a}} \left[(x)V_A(\vec{r}-\vec{a}) + (1-x)V_B(\vec{r}-\vec{a})\right] + \sum_{\vec{R}_C} V_C\left(\vec{r}-\vec{R}_C\right), \tag{34}$$

onde x é a concentração molar de átomos A e $(1-x)$ de átomos B no composto ternário $A_xB_{1-x}C$. Por meio da definição do potencial aleatório, encontramos

$$V'(\vec{r}) = V(\vec{r}) - V_1(\vec{r}) = \sum_{\vec{a}} c_{\vec{a}} \left[V_A(\vec{r}-\vec{a}) - V_B(\vec{r}-\vec{a})\right], \tag{35}$$

onde $c_{\vec{a}}$ é uma função aleatória definida somente no sítio da rede $\vec{a}$,

$$c_{\vec{a}} = \begin{cases} (1-x) & \text{p/ um átomo A em } \vec{a} \\ x & \text{p/ um átomo B em } \vec{a} \end{cases} . \tag{36}$$

Esta função foi introduzida por Flinn [**31**] na discussão de uma teoria eletrônica da ordenação local em ligas binárias.

O estado eletrônico bidimensional determinado pela equação de Schrödinger com o potencial do cristal virtual é descrito pela seguinte função de onda

$$\psi_{n,\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} u_c(\vec{r}) e^{i\vec{k}_{\parallel}\cdot\vec{r}_{\parallel}} \psi_n(z), \tag{37}$$

onde $u_c(\vec{r})$ é a função de Bloch da banda de condução, $\vec{k}_{\parallel}$ e $\vec{r}_{\parallel}$ são respectivamente os vetores de onda e o de posição no plano xy, $\psi_n(z)$ é a função de onda da sub-banda n ao longo da direção z, $\vec{r} = (\vec{r}_{\parallel}, z)$ e Ω é o volume da célula unitária.

O quadrado do elemento de matriz para uma transição de um estado $\left|n,\vec{k}_{\parallel}\right\rangle$ para outro estado $\left|n',\vec{k}'_{\parallel}\right\rangle$ devido ao potencial aleatório $V'(\vec{r})$ é expresso por

$$M_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}'_{\parallel}\right) = \left|\left\langle n'\vec{k}'_{\parallel}\left|V'(\vec{r})\right|n\vec{k}_{\parallel}\right\rangle\right|^2 \tag{38}$$

ou

$$M_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}'_{\parallel}\right) = \left|\left\langle n'\vec{k}'_{\parallel}\left|\sum_{\vec{a}} c_{\vec{a}}\left[V_A(\vec{r}-\vec{a}) - V_B(\vec{r}-\vec{a})\right]\right|n\vec{k}_{\parallel}\right\rangle\right|^2 . \tag{39}$$

A diferença de potencial $V_A(\vec{r}-\vec{a})-V_B(\vec{r}-\vec{a})=\delta V$ é a variação de potencial que o elétron sente devido a diferença de potenciais dos átomos A e B. Esta variação é constante e a estamos considerando como $\delta V = 0.6$ eV para $AlGaAs$ [32] Portanto

$$M_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}'_{\parallel}\right)=\frac{\delta V^2}{\Omega^2}\left|\sum_{\vec{a}}\left\langle u_c(\vec{r})e^{i\vec{k}'_{\parallel}\cdot\vec{r}_{\parallel}}\psi_{n'}(z)\left|c_{\vec{a}}\right|u_c(\vec{r})e^{i\vec{k}_{\parallel}\cdot\vec{r}_{\parallel}}\psi_n(z)\right\rangle\right|^2$$
$$=\frac{\delta V^2}{\Omega^2}\left|\sum_{\vec{a}}c_{\vec{a}}\int_{\vec{a}}\psi^*_{n'}(z)\psi_n(z)e^{-i\left(\vec{k}'_{\parallel}-\vec{k}_{\parallel}\right)\vec{r}_{\parallel}}\left|u_c(\vec{r})\right|^2 d\vec{r}\right|^2 \tag{40}$$

Dentro de cada célula unitária, $\psi^*_{n'}(z)\psi_n(z)e^{-i\left(\vec{k}'_{\parallel}-\vec{k}_{\parallel}\right)\cdot\vec{r}_{\parallel}}$ é considerado constante, então

$$M_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}'_{\parallel}\right)=\frac{\delta V^2}{\Omega^2}\left|\sum_{\vec{a}}c_{\vec{a}}\psi^*_{n'}(z)\psi_n(z)e^{-i\left(\vec{k}'_{\parallel}-\vec{k}_{\parallel}\right)\vec{r}_{\parallel}}\right|^2, \tag{41}$$

pois a função de Bloch é normalizada e periódica em cada célula. Se levarmos em conta que os átomos não são correlacionados e lembrarmos que $\vec{a}=\left(\vec{r}_{\parallel a},z_a\right)$, ao desenvolvermos o módulo quadrado da equação (41), chegaremos ao seguinte resultado

$$M_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}'_{\parallel}\right)=\frac{\delta V^2}{\Omega}\sum_{\vec{a}}c^2_{\vec{a}}\left|\psi^*_{n'}(z_a)\psi_n(z_a)\right|^2, \tag{42}$$

pois $c_{\vec{a}}c_{\vec{a}'} = c_{\vec{a}}^2\delta_{\vec{a},\vec{a}'}$. Separando a coordenada z do plano xy, o elemento de matriz é reescrito como

$$M_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel}'\right) = \frac{\delta V^2}{\Omega}\sum_{z_a}\left[\left(1-x(z_a)\right)^2\sum_{A,xy}\left|\psi_{n'}^*(z_a)\psi_n(z_a)\right|^2 + x(z_a)^2\sum_{B,xy}\left|\psi_{n'}^*(z_a)\psi_n(z_a)\right|^2\right] \tag{43}$$

onde A e B são, respectivamente, os átomos no plano xy de $z = z_a$. Desde que os sítios A e B são distribuídos aleatóriamente no plano xy na razão $x(z_a):1-x(z_a)$, obtemos

$$M_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel}'\right) = \delta V^2\int dz\left(1-x(z)\right)x(z)\left|\psi_{n'}^*(z)\psi_n(z)\right|^2 . \tag{44}$$

Capítulo 4

Equação de Transporte

O problema central da teoria de transporte eletrônico é o cálculo da distribuição eletrônica perturbada. Quando um cristal está em equilíbrio térmico uniforme as densidades de correntes elétricas e térmicas desaparecem em qualquer lugar do cristal. O não desaparecimento destas grandezas macroscopicamente, surge quando não há um equilíbrio uniforme ou do potencial químico, ou da temperatura ou ainda de ambos em ponto a ponto no cristal [**33**]. Esta variação causa uma perturbação na distribuição eletrônica, pois os elétrons movem-se de estados cheios para os vazios adjacentes.

A equação que governa a distribuição dos elétrons sobre seus auto-estados é conhecida como a equação de transporte de Boltzmann [**18,19,33**]. Esta equação é de difícil resolução, para que possamos resolvê-la analiticamente é necessário fazermos aproximações. Em particular, iremos utilizar a aproximação RTA (relaxation time approximation) [**19,27,34**]. Começaremos este capítulo com a determinação da equação de transporte de Boltzmann [**18,19,24,25**], deduziremos a forma geral para o termo de colisão responsável pela transição dos elétrons de um estado para outro [**18,24**], onde usaremos os resultados dos elementos de matriz $M_{n,n'}\left(\vec{k},\vec{k}'\right)$ obtidos

no capítulo anterior. Por fim iremos abordar a mobilidade quântica e de transporte [**14**], fazendo uma breve discussão sobre os métodos experimentais utilizados para se calcular seus valores.

4.1. Equação de Boltzmann

Dada a natureza das colisões podemos formular um potencial de espalhamento. Entretanto, esta informação por si só não nos diz como um gás de elétrons se move dentro de um cristal. A fim de descrevermos as propriedades de transporte de um gás de elétrons nós precisamos conhecer sua função distribuição $f_n\left(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel},t\right)$, a qual nos dirá como os elétrons estão distribuídos na sub-banda *n*. O gás de elétrons está localizado no plano *xy*, perpendicular a direção de crescimento da amostra, por isso estamos usando a notação paralela para o vetor de onda $\vec{k}_{\parallel}$.

Para um caso particular, ou seja no equilíbrio, a função distribuição $f_n\left(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel},t\right)$ é simplesmente a função Fermi-Dirac

$$f_n^0(\varepsilon)=\frac{1}{e^{\left(\varepsilon_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)-\mu\right)/k_B T}+1}, \tag{45}$$

onde μ é o potencial químico, k_B é a constante de Boltzmann e $\varepsilon_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)$ é a energia do elétron na sub-banda *n* definida na eq. (4).

Na presença de forças externas, a função distribuição $f_n\left(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel},t\right)$ é deslocada de seu equilíbrio (45) e a equação de Boltzmann descreve o caminho desta mudança.

Vamos considerar que em um intervalo de tempo entre $t-dt$ e t não existam colisões, corrigiremos esta omissão mais tarde. Não havendo colisões, os elétrons se comportam segundo as equações de movimento semiclássicas

$$\frac{d\vec{r}_{\parallel}}{dt} = \vec{v}(\vec{k}_{\parallel}) \tag{46}$$

e

$$\hbar\frac{d\vec{k}_{\parallel}}{dt} = -e\left(\vec{E}_{\parallel} + \frac{1}{c}\left(\vec{v}\times\vec{H}\right)_{\parallel}\right) = \vec{F}(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel}), \tag{47}$$

em que $\vec{E}_{\parallel}$ e $\vec{H}$ são respectivamente os campos elétrico no plano xy e magnético, c é a velociadade da luz e e é a carga do elétron.

Supondo que não há colisões entre $t-dt$ e t, um elétron que estava em $\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel}$ no instante t, deve ter estado em $\vec{r}_{\parallel}-d\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel}-d\vec{k}_{\parallel}$ no instante $t-dt$. Nestas circunstâncias a função distribuição eletrônica $f_n\left(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel},t\right)$ não sofre alterações entre $t-dt$ e t, com isto podemos escrever a seguinte igualdade

$$f_n\left(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel},t\right) = f_n\left(\vec{r}_{\parallel}-\vec{v}(\vec{k}_{\parallel})dt,\vec{k}_{\parallel}-\frac{\vec{F}}{\hbar}dt,t-dt\right). \tag{48}$$

As colisões dos elétrons devido as imperfeições do cristal têm um papel importante na teoria de transporte eletrônico, por isto não podemos deixar de levá-las

em conta. Estas colisões serão representadas pela variação da função distribuição $f_n(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel},t)$ no tempo e entrarão na equação (48) como

$$f_n(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel},t)=f_n\left(\vec{r}_{\parallel}-\vec{v}(\vec{k}_{\parallel})dt,\vec{k}_{\parallel}-\frac{\vec{F}}{\hbar}dt,t-dt\right)+\left(\frac{df_n(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel},t)}{dt}\right)_{col}. \tag{49}$$

A equação anterior ainda pode ser simplificada se desenvolvermos o seu lado esquerdo em série de Taylor e fizermos $dt \to 0$

$$\frac{\partial f_n(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel},t)}{\partial t}+\vec{v}(\vec{k}_{\parallel})\cdot\frac{\partial f_n(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel},t)}{\partial \vec{r}_{\parallel}}+\vec{F}(\vec{k}_{\parallel})\cdot\frac{1}{\hbar}\frac{\partial f_n(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel},t)}{\partial \vec{k}_{\parallel}}=\left(\frac{\partial f_n(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel},t)}{\partial t}\right)_{col}, \tag{50}$$

deste modo chegamos na forma geral da equação de transporte de Boltzmann.

Para nossos propósitos assumiremos somente campos estáticos e consideraremos que não há campo magnético em nosso sistema, com isto podemos reescrever a equação (50) como

$$\vec{v}(\vec{k}_{\parallel})\cdot\frac{\partial f_n(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel})}{\partial \vec{r}_{\parallel}}-\frac{e}{\hbar}\vec{E}_{\parallel}\cdot\frac{\partial f_n(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel})}{\partial \vec{k}_{\parallel}}=\left(\frac{\partial f_n(\vec{r}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel})}{\partial t}\right)_{col}. \tag{51}$$

Mesmo com as aproximações anteriores, a equação (51) ainda é de difícil resolução. Com a intenção de simplificar (51), assumiremos que os elétrons na região em torno de $\vec{r}_{\parallel}$ têm uma distribuição de equilíbrio local igual a função de Fermi-

Dirac (45) com $\mu = \mu(\vec{r}_{\parallel})$ e $T = T(\vec{r}_{\parallel})$, onde μ é o potencial químico local. Desta forma podemos escrever

$$f_n(\vec{r}_{\parallel}, \vec{k}_{\parallel}) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_n(\vec{k}_{\parallel}) - \mu(\vec{r}_{\parallel}))/k_B T(\vec{r}_{\parallel})} + 1}. \tag{52}$$

Conhecendo a forma da função distribuição f_n, podemos calcular suas derivadas em relação a $\vec{r}_{\parallel}$ e $\vec{k}_{\parallel}$ encontradas na eq. (51). Lembrando que

$$\vec{v}(\vec{k}_{\parallel}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(\vec{k}_{\parallel})}{\partial \vec{k}_{\parallel}}, \tag{53}$$

as derivadas de f_n encontradas na eq. (51) resumem-se a

$$\frac{\partial f_n}{\partial \vec{r}_{\parallel}} = \frac{\partial f_n}{\partial \varepsilon(\vec{k}_{\parallel})} \left[-\frac{\partial \mu}{\partial \vec{r}_{\parallel}} - \frac{(\varepsilon_n(\vec{k}_{\parallel}) - \mu)}{T} \frac{\partial T}{\partial \vec{r}_{\parallel}} \right] \tag{54}$$

e

$$\frac{\partial f_n}{\partial \vec{k}_{\parallel}} = \hbar \vec{v}(\vec{k}_{\parallel}) \frac{\partial f_n}{\partial \varepsilon(\vec{k}_{\parallel})}. \tag{55}$$

Substituindo (54) e (55) em (51), encontramos a seguinte equação

$$-\frac{\partial f_n}{\partial \varepsilon(\vec{k}_{\parallel})}\vec{v}(\vec{k}_{\parallel})\cdot\left[-\frac{(\varepsilon_n(\vec{k}_{\parallel})-\mu)}{T}\frac{\partial T}{\partial \vec{r}_{\parallel}}-\frac{\partial \mu}{\partial \vec{r}_{\parallel}}\right]-\frac{e\hbar}{m^*}\vec{E}_{\parallel}\cdot\vec{k}_{\parallel}\frac{\partial f_n}{\partial \varepsilon(\vec{k}_{\parallel})}=\left(\frac{\partial f_n}{\partial t}\right)_{col}. \qquad (56)$$

Para nossos propósitos consideraremos o caso em que temos um campo elétrico uniforme em um sistema mantido a temperatura uniforme. Nestas circunstâncias a equação (56) é escrita como

$$-\frac{e\hbar}{m^*}\vec{E}_{\parallel}\cdot\vec{k}_{\parallel}\frac{\partial f_n}{\partial \varepsilon(\vec{k}_{\parallel})}=\left(\frac{\partial f_n}{\partial t}\right)_{col}. \qquad (57)$$

A equação (57) simboliza a forma mais simples para a equação de Boltzmann (50). Mas ela ainda é de difícil resolução, pois o termo referente as colisões $(\partial f_n/\partial t)_{col}$ não é trivial.

4.1.1. Colisões

As colisões têm um papel importante para a resolução da eq. (57), por isso é necessário uma descrição mais detalhada do termo $(\partial f_n/\partial t)_{col}$ [**18**].

Supondo uma distribuição eletrônica no estado $|n,\vec{k}_{\parallel}\rangle$, os elétrons têm a probabilidade de serem espalhados para um estado $|n',\vec{k}'_{\parallel}\rangle$ desocupado, devido a colisões. Este espalhamento pode ser expresso por uma taxa, onde sua probabilidade é descrita pela regra de ouro de Fermi (14). Nestas circunstâncias, a taxa de espalhamento é escrita como o produto da função distribuição $f_n(\vec{k}_{\parallel})$ no estado

$\left|n,\vec{k}_{\parallel}\right\rangle$ pela probabilidade de espalhamento para um estado $\left|n',\vec{k}'_{\parallel}\right\rangle$ não ocupado. Com isso,

$$\left(\frac{\partial f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)}{\partial t}\right)_{fora} = -f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)W_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}'_{\parallel}\right)\left[1-f_{n'}\left(\vec{k}'_{\parallel}\right)\right] \tag{58}$$

onde $W_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}'_{\parallel}\right)$ é definida pela eq. (14) e $\left(\partial f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)/\partial t\right)_{fora}$ é a taxa de espalhamento de elétrons para fora do elemento de volume $d\vec{k}_{\parallel}$ na sub-banda n. O sinal negativo na eq. (58) indica a saída dos elétrons de um elemento de volume $d\vec{k}_{\parallel}$ na sub-banda n e o termo $\left[1-f_{n'}\left(\vec{k}'_{\parallel}\right)\right]$ indica a probabilidade do estado $\left|n',\vec{k}'_{\parallel}\right\rangle$ estar desocupado. Como não sabemos para qual nível os elétrons serão espalhados, então devemos fazer a soma de todos os estados finais $\left|n',\vec{k}'_{\parallel}\right\rangle$ possíveis. Desta forma,

$$\left(\frac{\partial f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)}{\partial t}\right)_{fora} = -f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)\sum_{n',\vec{k}'_{\parallel}} W_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}'_{\parallel}\right)\left[1-f_{n'}\left(\vec{k}'_{\parallel}\right)\right]. \tag{59}$$

Por outro lado, existe também a probabilidade de um elétron estando em um estado $\left|n',\vec{k}'_{\parallel}\right\rangle$ ser espalhado para o nível $\left|n,\vec{k}_{\parallel}\right\rangle$. Esta quantidade pode ser expressa como a taxa de espalhamento dos elétrons chegando em um elemento de volume $d\vec{k}_{\parallel}$ na sub-banda n, ou seja

$$\left(\frac{\partial f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)}{\partial t}\right)_{dentro} = f_{n'}\left(\vec{k}_{\parallel}^{'}\right)W_{n',n}\left(\vec{k}_{\parallel}^{'},\vec{k}_{\parallel}\right)\left[1-f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)\right], \tag{60}$$

em que $\left(\partial f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)/\partial t\right)_{dentro}$ é a taxa de espalhamento de elétrons para dentro do elemento de volume $d\vec{k}_{\parallel}$ na sub-banda n. novamente não sabemos de qual nível os elétrons estão sendo espalhados, por isso somamos sobre todos os estados iniciais $\left|n^{'},\vec{k}_{\parallel}^{'}\right\rangle$

$$\left(\frac{\partial f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)}{\partial t}\right)_{dentro} = \left[1-f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)\right]\sum_{n^{'},\vec{k}_{\parallel}^{'}} W_{n',n}\left(\vec{k}_{\parallel}^{'},\vec{k}_{\parallel}\right)f_{n'}\left(\vec{k}_{\parallel}^{'}\right). \tag{61}$$

Desde que elétrons podem ser espalhados tanto para dentro como para fora do elemento de volume $d\vec{k}_{\parallel}$, a taxa de espalhamento total devido a colisões é simplesmente escrita como a soma das taxas de entrada (61) e saída (59) de um nível, ou seja

$$\left(\frac{\partial f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)}{\partial t}\right)_{col} = -\sum_{n^{'},\vec{k}_{\parallel}^{'}} W_{n,n}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel}^{'}\right)f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)\left[1-f_{n'}\left(\vec{k}_{\parallel}^{'}\right)\right]-W_{n',n}\left(\vec{k}_{\parallel}^{'},\vec{k}_{\parallel}\right)f_{n'}\left(\vec{k}_{\parallel}^{'}\right)\left[1-f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)\right] \tag{62}$$

A equação (62) pode ser simplificada se utilizarmos o princípio da reversibilidade microscópica [**24**],

$$W_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel}^{'}\right)=W_{n',n}\left(\vec{k}_{\parallel}^{'},\vec{k}_{\parallel}\right) \tag{63}$$

com isto,

$$\left(\frac{\partial f_n(\vec{k}_\parallel)}{\partial t}\right)_{col} = \sum_{n',\vec{k}_\parallel} W_{n,n'}(\vec{k}_\parallel,\vec{k}_\parallel')\left[f_{n'}(\vec{k}_\parallel') - f_n(\vec{k}_\parallel)\right]. \tag{64}$$

O resultado anterior mostra que o termo de colisão também depende do mecanismo de espalhamento, de modo que para cada tipo de mecanismo teremos uma solução diferente para a equação de Boltzmann (57). Se substituirmos (64) em (57), encotraremos a seguinte equação e veremos que ainda é de difícil resolução

$$-\frac{e\hbar}{m^*}\vec{E}_\parallel \cdot \vec{k}_\parallel \frac{\partial f_n}{\partial \varepsilon(\vec{k}_\parallel)} = \sum_{n',\vec{k}_\parallel} W_{n,n'}(\vec{k}_\parallel,\vec{k}_\parallel')\left[f_{n'}(\vec{k}_\parallel') - f_n(\vec{k}_\parallel)\right]. \tag{65}$$

Para contornarmos esta dificuldade, precisamos utilizar mais uma aproximação, a qual é chamada de RTA (relaxation time approximation). Na na seção seguinte iremos utilizá-la para simplificar a eq. (65).

4.1.2. RTA (Relaxation Time Approximation)

A RTA supõe que a probabilidade de um elétron sofrer uma colisão no intervalo de tempo dt é dt/τ, onde τ é o tempo em que um elétron viaja entre duas colisões. Uma forma precisa para τ é difícil de se estimar e depende do processo de espalhamento. Como um exemplo, no modelo de Drude τ é considerado uma constante independente da posição e da velocidade, mas em modelos mais precisos

τ é geralmente escrito como função da energia. Usando esta aproximação, o termo de colisão (64) pode ser escrito como [**14,34**]

$$\left(\frac{\partial f_n\left(\vec{k}_{\parallel},t\right)}{\partial t}\right)_{col} = -\frac{f_n\left(\vec{k}_{\parallel},t\right)-f_n^0\left(\vec{k}_{\parallel}\right)}{\tau_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)} \tag{66}$$

Utilizando a aproximação (66) na equação (57), obtemos uma forma para a função distribuição f_n

$$f_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)=f_n^0\left(\vec{k}_{\parallel}\right)+\frac{e\hbar}{m^*}\vec{k}_{\parallel}\cdot\vec{E}_{\parallel}\frac{\partial f_n^0\left(\vec{k}_{\parallel}\right)}{\partial\varepsilon\left(\vec{k}_{\parallel}\right)}\tau_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right) \tag{67}$$

Substituindo a função distribuição (67) novamente em (57) e considerando $T\rightarrow 0$ (isto é, $\varepsilon_n\left(\vec{k}_{\parallel}\right)=E_F$, onde E_F é a energia de Fermi), vamos encontrar a seguinte equação matricial

$$\sum_{n'=1}^{N} K_{n,n'}\tau_n^l = 1, \tag{68}$$

para $n=1,2,\ldots,N$, pois estamos considerando um sistema de N sub-bandas populadas. Em (68) τ_n^l é o tempo de relaxação do movimento, relacionado com a mobilidade de transporte ou condutividade. Assim para $n=n'$ temos

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA INFORMAÇÃO

$$K_{n,n} = \frac{m^*}{\pi\hbar^3}\left\{\int_0^{\pi} d\theta \left|M_{n,n}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel}^{'}\right)\right|^2 (1-\cos\theta) + \sum_{n'\neq n}^{N}\int_0^{\pi} d\theta \left|M_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel}^{'}\right)\right|^2\right\} \tag{69}$$

e para $n \neq n'$

$$K_{n,n'} = \frac{m^*}{\pi\hbar^3}\sqrt{\frac{E_{Fn'}}{E_{Fn}}}\int_0^{\pi} d\theta \left|M_{n,n'}\left(\vec{k}_{\parallel},\vec{k}_{\parallel}^{'}\right)\right|^2 \cos\theta\,, \tag{70}$$

em que θ é o ângulo entre os vetores de onda $\vec{k}_{\parallel}$ e $\vec{k}_{\parallel}^{'}$ ou ângulo de espalhamento. Devemos lembrar que para cada mecanismo de espalhamento existe um elemento de matriz característico, por isso teremos soluções diferentes para a equação de Boltzmann.

O tempo de transporte obtido em (68) é um termo importante para podermos calcular a mobilidade eletrônica. Na próxima seção iremos discutir um pouco sobre a mobilidade eletrônica [**24,25**].

4.2. Mobilidades

Por meio da aproximação RTA obtivemos a eq. (70), de onde tiramos o tempo de relaxação τ_n^l para cada sub-banda. A condutividade do sistema é definida por

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_n^l}{m^*}. \tag{71}$$

A condutividade de um semicondutor não é uma boa medida para a taxa de colisão, como ela é em um metal. Frequentemente é mais vantajoso separar da condutividade um termo cuja dependência da temperatura reflete somente da taxa de colisão. Este termo é conhecido como **mobilidade de transporte** e é definido como **[14,21]**

$$\mu_n^l = \frac{e}{m^*}\tau_n^l \tag{72}$$

Vemos claramente de (72) a dependência da mobilidade com o tempo de relaxação τ_n^l, que por sua vez está ligado com o mecanismo de espalhamento.

No entanto, também é definida a **mobilidade quântica**, a qual é relacionada com a probabilidade por unidade de tempo de um elétron ir de um estado para outro. Esta mobilidade tem a mesma forma que (72), entretanto o tempo de vida quântico está relacionado diretamente com a regra de outro de Fermi (14) e é definido como **[14,35]**

$$\frac{1}{\tau_n^q} = \frac{m^*}{\pi\hbar^3} \sum_{n'=1}^{N} \int_0^{\pi} d\theta \left| M_{n,n'} \left(\vec{k}_{\parallel}, \vec{k}'_{\parallel} \right) \right|^2 . \tag{73}$$

Com isto a mobilidade quântica tem a seguinte forma

$$\mu_n^q = \frac{e}{m^*} \tau_n^q . \tag{74}$$

As mobilidades de transporte (72) e quântica (74), foram calculadas separadamente para cada mecanismo de espalhamento. Um resultado interessante seria a mobilidade total, ou seja, a mobilidade referente aos mecanismos de espalhamento. Este resultado pode ser obtido se lembrarmos que o tempo total de espalhamento é a soma dos tempos de espalhamento de cada mecanismo, assim como a mobilidade é proporcional ao tempo de espalhamento, encontramos [**22**]

$$\frac{1}{\mu} = \sum_i \frac{1}{\mu_i} , \tag{75}$$

em que o índice i indica o tipo de espalhamento.

4.3. Análise Experimental das Mobilidades

Nesta seção iremos fazer uma breve discussão do procedimento para se obter as medidas das mobilidades de transporte e quântica em um sistema quase-2D.

4.3.1. Análise da Mobilidade de Transporte

O valor experimental da mobilidade de transporte é feito através dos valores medidos da condutividade ou da resistividade da amostra. A condutividade total de um 2DEG em um campo magnético é [**36**]

$$\sigma_{xx} = \frac{en\mu'}{\left(1+\left(\mu' B\right)^2\right)} = \sigma_{yy} \quad \text{e} \quad \sigma_{xy} = \frac{en\mu' \cdot \mu' B}{\left(1+\left(\mu' B\right)^2\right)} = -\sigma_{yx}, \tag{76}$$

onde n é a densidade eletrônica em 2D, B é o campo magnético e μ' é a mobilidade de transporte. Os elementos tensoriais da resistividade são obtidos pelo inverso dos tensores da condutividade (76)

$$\rho_{xx} = \frac{1}{en\mu'} = \rho_{yy} \quad \text{e} \quad \rho_{xy} = -\frac{B}{en} = -\rho_{yx}. \tag{77}$$

Caso mais do que uma sub-banda seja ocupada, a condutividade total é dada pela soma das condutividades de cada sub-banda, ou seja

$$\sigma_{xx} = \sum_i \sigma_{xx_i} \quad \text{e} \quad \sigma_{xy} = \sum_i \sigma_{xy_i} \,. \tag{78}$$

Os elementos tensoriais da resistividade no caso de um sistema com múltiplas sub-bandas são escritos como

$$\begin{aligned} \rho_{xx}(B) &= \frac{\sum_i \sigma_{xx_i}(B)}{\left(\left(\sum_i \sigma_{xx_i}(B)\right)^2 + \left(\sum_i \sigma_{xy_i}(B)\right)^2\right)} \\ \rho_{xy}(B) &= -\frac{\sum_i \sigma_{xy_i}(B)}{\left(\left(\sum_i \sigma_{xx_i}(B)\right)^2 + \left(\sum_i \sigma_{xy_i}(B)\right)^2\right)} \,. \end{aligned} \tag{79}$$

A análise da dependência do campo magnético de qualquer um dos elementos tensoriais $\rho_{xx}(B)$ e $\rho_{xy}(B)$ ou $\sigma_{xx}(B)$ e $\sigma_{xy}(B)$, é capaz de determinar a densidade eletrônica e a mobilidade de transporte em cada sub-banda.

Os resultados escritos nas equações (79) foram utilizados por Zrenner [**37**] para determinar a mobilidade de transporte em cada sub-banda. Mas ao analisar os dados ele encontrou problema pois para estas equações somente poucas sub-bandas podem ser populadas e, é difícil obter parâmetros exatos quando tem-se que relacionar as medidas das condutitividades e resistividades das três sub-bandas. Além deste problema, existem outras discrepâncias devido ao uso de um modelo de duas sub-bandas para estruturas onde mais do que duas estão populadas. Isto ocorreu no trabalho de Skuras *et al* [**38**], onde foi utilizado o modelo para o cálculo da

mobilidade de transporte de duas sub-bandas, para um sistema que no mínimo cinco sub-bandas estavam populadas.

Outra maneira de se determinar a mobilidade de transporte experimentalmente, é analizando as curvas traçadas em termos das resistividades $\rho_{xx}(B)$ e $\rho_{xy}(B)$ em função do campo magnético B e, utilizá-las para obter um espectro da mobilidade. Este espectro é um gráfico entre a densidade eletrônica e a mobilidade, seus resultados são picos que indicam quantas sub-bandas estão ocupadas.

Devido a todas estas dificuldades para obter os resultados da mobilidade de transporte, vemos uma barreira para sua interpretação e confiabilidade.

4.3.2. Análise da Mobilidade Quântica

Em altos campos magnéticos, podemos observar a oscilação de Schubnikov-de Haas na resistividade longitudinal

$$\Delta\rho_{xx}(B) = 4\rho_{xx}(B=0)\sum_{s=1}^{\infty} D(sX)\cdot e^{\left(-\frac{\pi s}{\mu^q B}\right)}\cdot\cos\left(\frac{2\pi^2\hbar sn}{eB} - \pi s\right) \tag{80}$$

onde

$$D(sX) = \frac{sX}{\sinh(sX)}, \tag{81}$$

com

$$X = \frac{2\pi m^* k_B T}{\hbar e B}. \tag{82}$$

O primeiro harmônico, $s = 1$, é o mais forte e as oscilações de Schubnikov-de Haas são normalmente analisadas somente considerando este primeiro harmônico. As dependências das amplitudes das oscilações de Schubnikov-de Haas de cada subbanda com o campo magnético, oferecem as informações do tempo de vida quântico dos elétrons nas sub-bandas. Com isto, podemos determinar a mobilidade quântica.

A maneira mais adequada de se obter a mobilidade quântica (ou tempo de vida quântico), é fazendo a transformada de Fourier das curvas devido as medidas dos elementos tensoriais ρ_{xx} mostrados em (80). Geralmente estas curvas tem um caráter oscilatório e a região onde há maior oscilação corresponde a sub-banda mais populada.

Para um sistema com mais de uma sub-banda ocupada para obter a mobilidade quântica em cada uma é necessário usar a técnica de filtragem de Fourier. Esta técnica filtra o pico na frequência (ou densidade) dominante o que corresponde a uma sub-banda. Subsequentemente, uma transformada inversa de Fourier do pico filtrado é executada, com isto obtemos as oscilações de Schubnikov-de Haas para cada sub-banda. A análise destas oscilações juntamente com a equação (80) resulta nos valores da mobilidade quântica, uma vez que (80) já é escrita em função de μ^q.

Capítulo 5

Resultados e Discussões

Neste capítulo apresentamos os resultados dos cálculos para as mobilidades quântica e de transporte. Basicamente adotamos uma estrutura de WPQW, com duas camadas de impurezas doadoras localizadas longe do poço. Nestes cálculos variamos alguns parâmetros, tais como a densidade de dopantes doadores, acrescentamos uma terceira camada de impurezas doadoras a qual variará sua posição dentro do WPQW para estudar o efeito de espalhamento e também aplicamos um potencial *gate* na estrutura de poços quânticos. Os modelos usados podem ser vistos na figura 5-1.

Apresentamos os resultados para os dois modelos de WPQW propostos na figura 5-1. Estes modelos diferenciam-se pela concentração x do Al no composto ternário $Al_xGa_{1-x}As$. Começamos este capítulo com o modelo **A** em que x varia entre o valores $0 \leq x \leq 0.1$ e o finalizamos com o modelo **B** onde $0 \leq x \leq 0.3$. Na primeira seção discutimos um resultado experimental para o tempo de espalhamento obtido por G. Salis *et al.* [**15,16**].

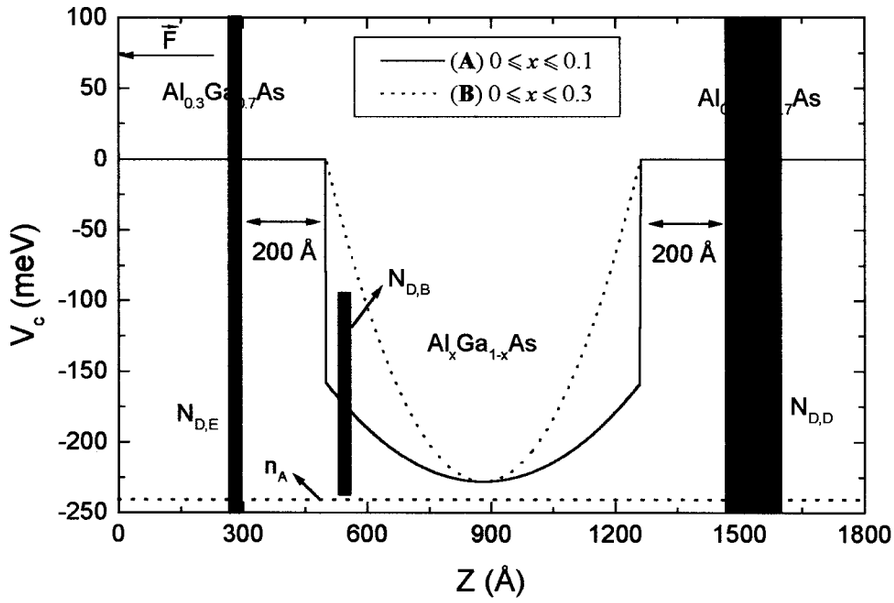


Figura 5-1: Estruturas usadas para os cálculos das mobilidades quântica e de transporte. Nesta figura mostramos as três camadas de impurezas doadoras, onde uma delas ($N_{D,B}$) varia sua posição entre 520 Å $\leq Z_{D,B} \leq$ 1240 Å.

5.1. As Mobilidades no WPQW de Modelo A

A forma e as dimensões desta estrutura podem ser vistas na figura 5-1. O poço tem uma largura de W_{QW} =760 Å e duas camadas de impurezas doadoras Para a camada doadora localizada a esquerda do WPQW, fixamos a posição de seu centro em $Z_{D,E}$ = 290 Å e sua largura em $W_{D,E}$ = 20 Å. Já para a camada a direita do WPQW, sua posição é $Z_{D,D}$ = 1510 Å e sua largura é de $W_{D,D}$ = 100 Å. A distância de cada camada para o poço é de 200 Å. Nesta seção o único parâmetro alterado referente as camadas doadoras, foi a densidade eletrônica de cada uma delas, cujos valores serão discutidos a medida que apresentamos os resultados. A concentração de impurezas aceitadoras é de $n_A = 1\text{x}10^{15}$ cm^{-3}.

O primeiro resultado, figura 5-2, mostra as mobilidades (a) quântica e (b) de transporte, onde variamos igual e simultaneamente as densidades das duas camadas de impurezas doadoras. Ambas possuem um valor de densidade inicial igual a $N_{D,E}$ = $N_{D,D}$ = $1.5\text{x}10^{11}$ cm^{-2}. Para destacarmos o efeito de cada mecanismo de espalhamento, mostramos na figura 5-2 as mobilidades referentes ao espalhamento devido a impurezas ionizadas (linha fina), depois acrescentamos o espalhamento devido ao potencial de liga (linha média) e por último, mas não menos importante, acrescentamos o efeito do espalhamento devido a impurezas aceitadoras (linha grossa).

Os resultados numéricos mostram que para a mobilidade quântica, o espalhamento devido ao potencial de liga pode ser desprezado, mas o devido a impurezas aceitadoras trás uma contribuição maior para a primeira sub-banda. Para a mobilidade de transporte, há uma mudança significativa quanto a contribuição do espalhamento devido a liga para todas as sub-bandas e, ainda há uma forte

contribuição do espalhamento devido a impurezas aceitadoras. Neste sistema a segunda sub-banda começa a ser populada quando $N_e > 1{,}67\text{x}10^{11}$ cm^{-2} e a terceira quando $N_e > 3{,}56\text{x}10^{11}$ cm^{-2}.

Intuitivamente, quando aumentamos a densidade de impurezas doadoras as mobilidades eletrônicas deveriam sofrer um decréscimo. Isto porque o acréscimo de doadores está ligado com o aumento de centros espalhadores. Olhando para as figuras 5-2 (a) e (b), quando temos uma sub-banda ocupada ($N_e < 1{,}67\text{x}10^{11}$ cm^{-2}), notamos que as mobilidades se comportam de forma contrária ao esperado, vemos nitidamente o acréscimo das mobilidades quando aumentamos a densidade de doadores, principalmente na mobilidade de transporte μ^t_1. A explicação deste comportamento se deve a dois motivos 1) existe uma ligação entre os doadores e a densidade eletrônica no WPQW, ou seja, ao mesmo tempo que aumentamos a densidade de doadores também aumentamos os elétrons no WPQW causando a blindagem do potencial de espalhamento; 2) considerando que apenas os elétrons que estão no nível de Fermi contribuem para a condutividade, ao aumentarmos a densidade eletrônica no WPQW, aumentamos o nível de Fermi e consequentemente a velocidade dos elétrons de condução v_F (v_F = velocidade de Fermi). Quando a velocidade dos elétrons é grande, o efeito do espalhamento torna-se pequeno.

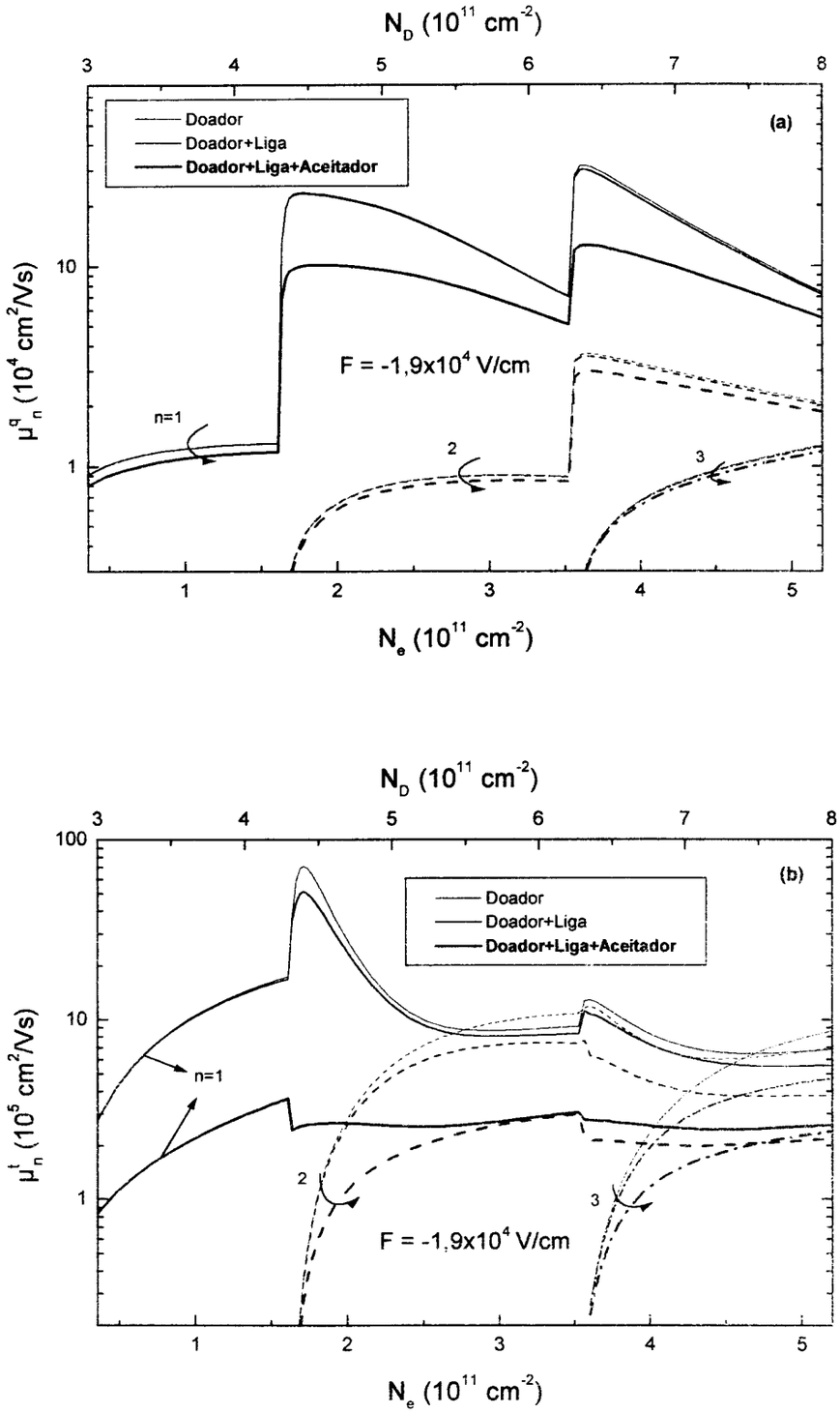


Figura 5-2: Mobilidades (a) quântica e (b) de transporte, devido aos espalhamentos de impurezas doadoras ionizadas, ao potencial de liga e impurezas aceitadoras.

A mobilidade quântica μ^q é definida diretamente da taxa de espalhamento e está ligada com o tempo de vida quântico dos elétrons. Já a mobilidade de transporte μ^t, é definida por meio da equação de transporte de Boltzmann e está relacionada com a condutância do sistema. Nos cálculos a mobilidade de transporte difere da mobilidade quântica por um fator de (1-cosθ) no espalhamento quando uma sub-banda é ocupada. Neste caso, as mobilidades de transporte e quântica são dadas segundo as equações (68-70) e (72-74)

$$\frac{1}{\mu_1^t} = \frac{(m^*)^2}{e\pi\hbar^3}\int_0^\pi d\theta \left|M_{1,1}(\vec{q}_\parallel)\right|^2 (1-\cos\theta)$$

$$\frac{1}{\mu_1^q} = \frac{(m^*)^2}{e\pi\hbar^3}\int_0^\pi d\theta \left|M_{1,1}(\vec{q}_\parallel)\right|^2 , \qquad (83)$$

onde $\vec{q}_\parallel = \vec{k}_\parallel' - \vec{k}_\parallel$ e θ é o ângulo de espalhamento. A eq. (83) nos mostra que o espalhamento com grandes ângulos θ (ou $q_\parallel$) tem maior contribuição para a mobilidade de transporte. Por outro lado, o espalhamento com pequenos ângulos é decisivo para a mobilidade quântica. Devido ao elemento de matriz de espalhamento $M_{n,n}(\vec{q}_\parallel)$, ser uma função decrescente em relação a $q_\parallel$ então, a mobilidade de transporte geralmente é maior que a mobilidade quântica. Nossos resultados na figura 5-2 mostram claramente esta diferença.

Quando a segunda sub-banda começa a ser populada (N_e > 1,67x10^{11} cm^{-2}) notamos na figura 5-2 (a) e (b), um aumento abrupto no valor da mobilidade na primeira sub-banda. A ocupação da segunda sub-banda introduz 1) o espalhamento intersub-bandas (*intersubband scattering*), o qual reduz a mobilidade e 2) o efeito da

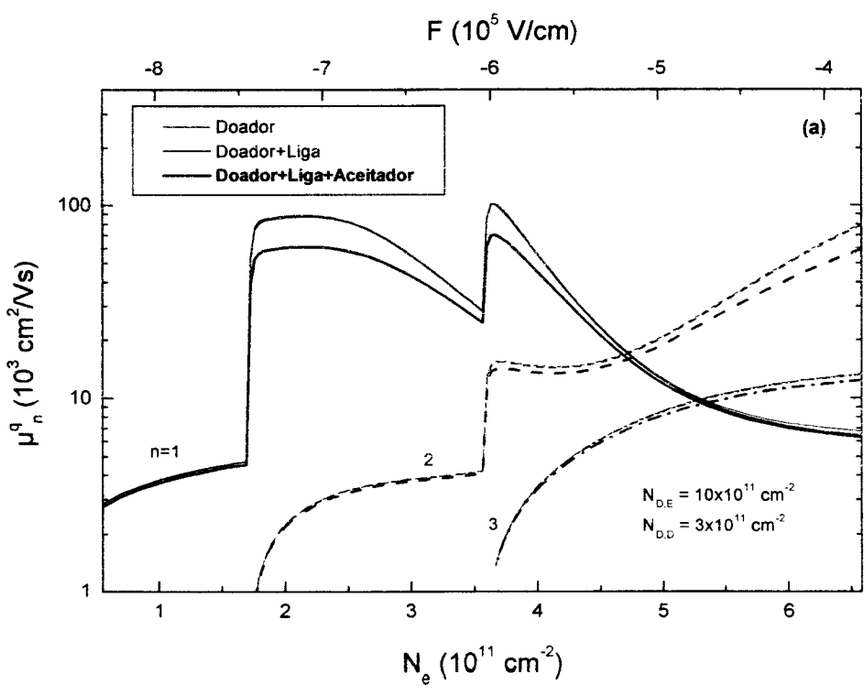
blindagem devido ao acoplamento intersub-banda do gás de elétrons no sistema, o qual aumenta a mobilidade. Para um poço simétrico, a paridade das funções de onda da primeira e da segunda sub-bandas são opostas, resultando na anulação do espalhamento entre elas (quando a distribuição das impurezas também é simétrica). No caso da figura 5-2, as larguras das camadas de impurezas são diferentes (ver figura 5-1), causando um pequeno espalhamento intersub-bandas. Por outro lado, a ocupação da segunda sub-banda resulta em um aumento significativo na função dielétrica para pequenos θ e, consequentemente, um aumento na mobilidade. Também quando θ é pequeno, há uma maior contribuição para a mobilidade quântica do que para a de transporte.

Ainda na figura 5-2 (b), podemos notar que ao acrescentarmos o espalhamento devido a impurezas aceitadoras, há uma redução na mobilidade de transporte quando mais do que uma sub-banda começa a ser populada. Isto é decorrente da superioridade do espalhamento intersub-banda sobre a blindagem eletrônica.

O segundo resultado, figura 5-3, mostra as mobilidades (a) quântica e (b) de transporte para um sistema onde aplicamos um *gate* externo na posição $z = 0$. O *gate* externo aplicado nos permite variar a densidade e a distribuição dos elétrons no poço, mantendo a densidades das impurezas fixas. Para uma estrutura de poço quântico sem gate a barreira de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ extende para $z \rightarrow \pm\infty$, o campo elétrico na posição z = 0 é $F = -1{,}9\text{x}10^4$ V/cm (ver figura 5-1). Para estes resultados mantemos os valores das densidades das camadas doadoras em $N_{D,E} = 10\text{x}10^{11}$ cm^{-2} e $N_{D,D} = 3\text{x}10^{11}$ cm^{-2}. A concentração de impurezas aceitadores foi mantida a $n_A = 1\text{x}10^{15}$cm^{-3}. As mobilidades (a) e (b) foram calculadas em função do campo externo F na posição z = 0, primeiramente devido ao espalhamento por impurezas ionizadas (linha fina),

depois acrescentamos o espalhamento por potencial de liga (linha média) e por último, o devido a impurezas aceitadoras (linha grossa). A segunda e a terceira sub-bandas começam a ser populadas em N_e = 1,76x10^{11} cm^{-2} e N_e = 3,67x10^{11} cm^{-2}, respectivamente. Nestes resultados também notamos uma pequena contribuição do espalhamento de liga para a mobilidade quântica. Para a mobilidade de transporte, ambos os espalhamentos mostram contribuições significativas.

A figura 5-3 mostra que a mobilidade de cada sub-banda tem uma uma forma parecida com as mobilidades obtidas na figura 5-2, mesmo fixando a densidade de impurezas. Uma das diferenças ocorre quando a terceira sub-banda está populada (N_e > 3,67x10^{11} cm^{-2}), a mobilidade da primeira sub-banda é menor que as outras duas. Isto ocorre porque o campo externo força os elétrons da primeira sub-banda a se localizarem a esquerda do poço, causando o aumento do espalhamento.



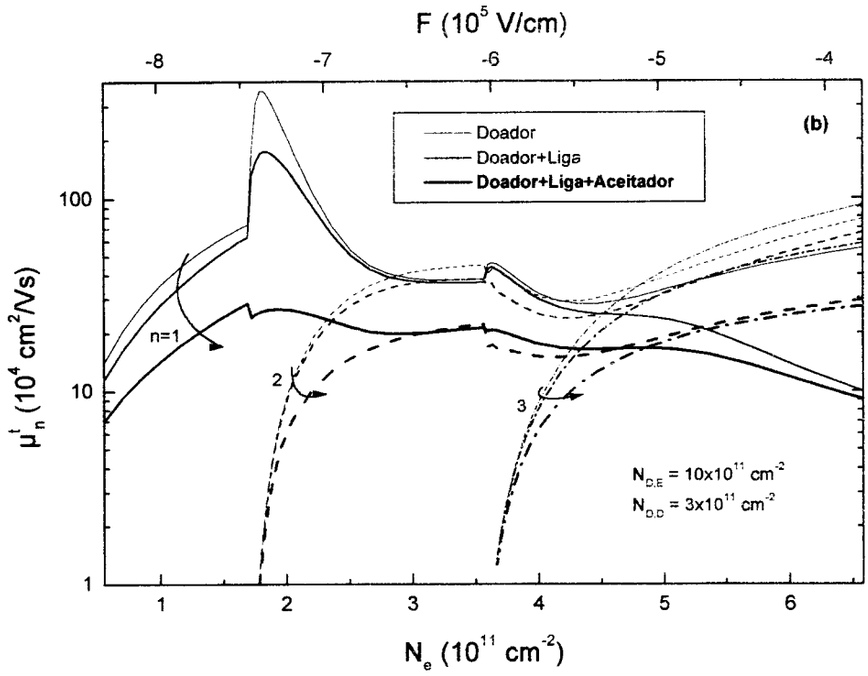


Figura 5-3: Mobilidades (a) quântica e (b) de transporte calculadas em função da densidade dos elétrons através da variação do *gate* externo aplicado na direção *-z*.

Para os próximos resultados, acrescentamos uma camada de impurezas doadoras no interior do WPQW, esta camada pode ser vista na figura 5-1. Ela possui uma densidade eletrônica baixa de $N_{D,B}$ = 1x10^{11} cm^{-2}, a qual não altera muito a estrutura eletrônica do sistema mas afeta significamente as mobilidades. A largura desta camada de impurezas (terceira camada) é de $W_{D,B}$ = 20 Å e sua posição varia entre os seguintes valores 520 Å $\leq Z_{D,B} \leq$ 1240 Å (dentro do poço). Esta nova camada foi inserida para observarmos efeitos de espalhamento em função da posição da impureza. Estes resultados foram obtidos com a fixação das densidades das dopagens externas ao poço em $N_{D,E}$ = 10x10^{11} cm^{-2} e $N_{D,D}$ = 3x10^{11} cm^{-2}. Além de fixarmos estas dopagens, também fixamos o campo externo F = -2,1x10^4 V/cm aplicado na posição z = 0. Nestas condições a figura 5-4, mostra os resultados das mobilidades (a) quântica e (b) de transporte, devido aos espalhamentos das

impurezas doadoras, do potencial de liga e das impurezas aceitadoras. Novamente vemos que para a mobilidade quântica o espalhamento de liga trás uma pequena contribuição, enquanto que para o espalhamento de impurezas aceitadoras a contribuição é maior. Para a mobilidade de transporte, temos uma forte contribuição quando acrescentamos o espalhamento devido a liga para a primeira sub-banda. Enquanto que as impurezas aceitadoras, reduzem uma pequena quantidade do valor da mobilidade.

Observamos na figura 5-4 (a) que conforme a terceira camada de impurezas doadoras inicia a variação em sua posição ($Z_{D,B}$ = 520 Å) dentro do poço, encontramos um valor muito baixo da mobilidade quântica para a primeira sub-banda (linha sólida), enquanto que as outras possuem valores maiores. Isto ocorre pelo fato de que sua função de onda está localizada perto da camada de impurezas doadoras, aumentando os espalhamentos dos elétrons pelos doadores. A segunda sub-banda (linha tracejada) possui a mais alta mobilidade quântica, isto porque o espalhamento intersub-bandas é mais forte para as sub-bandas um (n=1) e três (n=3). Com a variação da posição da camada de impureza doadora dentro do poço, notamos uma queda significativa da mobilidade na segunda sub-banda, devido ao aumento do *overlap* entre a função de onda desta sub-banda e a terceira camada de impureza. A variação deste *overlap* leva a uma oscilação da mobilidade.

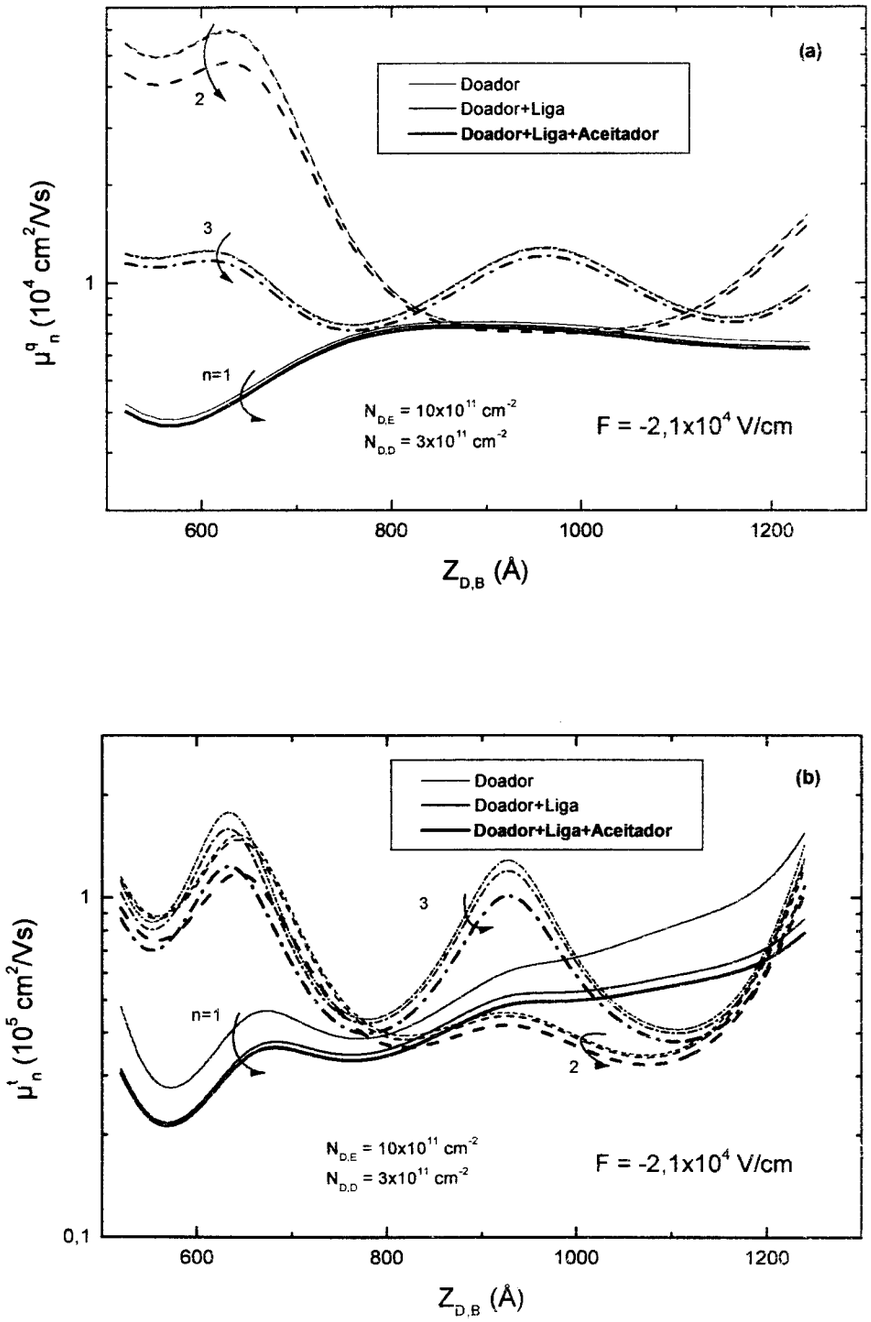


Figura 5-4: Mobilidades (a) quântica e (b) de transporte em função da posição da terceira camada de impurezas doadoras.

Na figura 5-4 (b), notamos a semelhança com as oscilações da mobilidade quântica. A explicação é parecida, mas temos que considerar que a maior contribuição para a mobilidade de transporte vem de espalhamentos com grandes ângulos. Por isso a terceira camada dentro do poço, causa uma maior modificação na mobilidade de transporte.

Para finalizarmos esta seção, os próximos resultados são baseados em medidas experimentais e também cálculos teóricos, feitos por G. Salis *et al.* [**15,16**]. Neste artigo, eles calculam e medem o tempo de espalhamento em função da densidade eletrônica dentro de um WPQW de $Al_xGa_{1-x}As$, considerando apenas como mecanismo de epalhamento predominante o devido a impurezas ionizadas. Não há uma concordância entre os resultados experimentais e teóricos obtidos por eles. A estrutura que utilizamos para nossos cálculos é similar a usada por Salis, diferenciando apenas pela densidade das dopagens, pois em seu artigo, Salis, não deixa claro em que condições são feitas as medidas experimentais. Continuamos a usar duas camadas de impurezas, mas agora com as seguintes densidades eletrônicas $N_{D,E} = 2\text{x}10^{11}$ cm^{-2} e $N_{D,D} = 4\text{x}10^{11}$ cm^{-2} e mantivemos a densidade de aceitadores em $n_A = 1\text{x}10^{15}$ cm^{-3}. O parâmetro que estamos variando é o potencial *gate* aplicado. Na figura 5-5, mostramos a mobilidade de transporte, primeiramente calculada para o espalhamento devido a impurezas doadoras (linha fina), depois acrescentamos o devido ao potencial de liga (linha média) e por último acrescentamos o potencial de espalhamento devido a impurezas aceitadoras (linha grossa). Notamos como é grande a influência do potencial de liga e também do potencial por impurezas ionizadas.

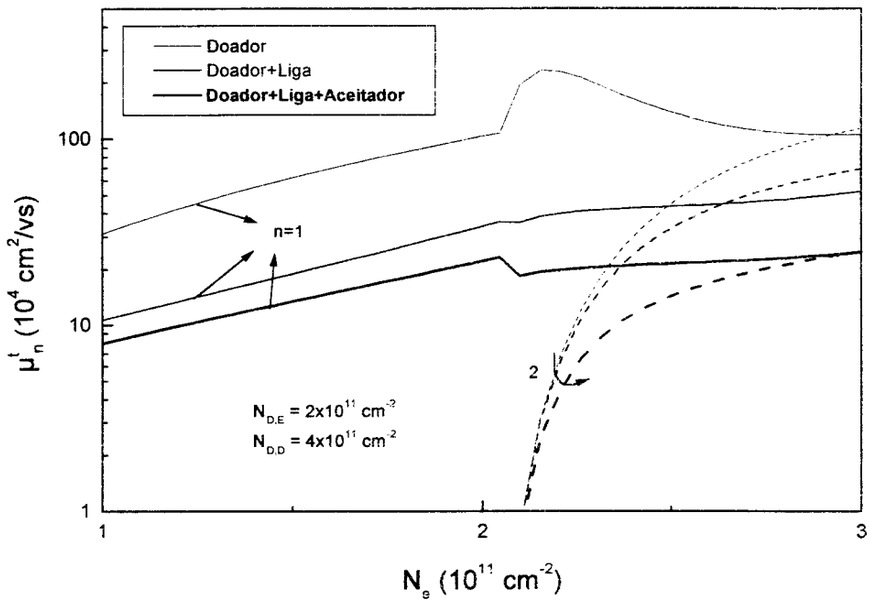


Figura 5-5a: Mobilidade de transporte devido aos espalhamentos por impurezas ionizadas, impurezas aceitadoras e por potencial de liga.

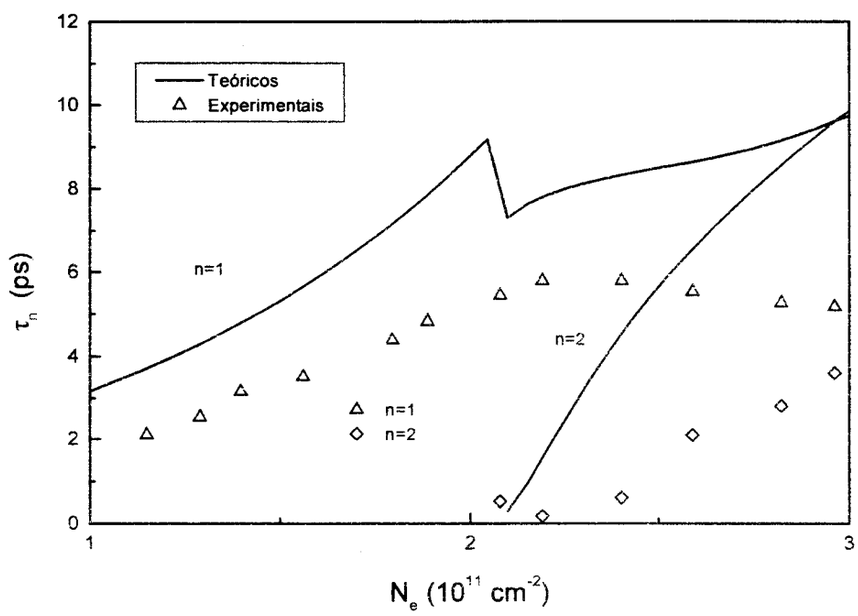


Figura 5-5b: Comparação dos resultados experimentais e dos resultados teóricos, baseados no trabalho de G. Salis *et al.*

Para podermos ter uma visão melhor das importâncias dos mecanismos de espalhamentos, vamos comparar na figura 5-5b o tempo de espalhamento calculado pelos nossos métodos e, os resultados experimentais obtidos por G. Salis *et al.* Os nossos resultados têm um acordo qualitativo com os resultados experimentais.

5.2. As Mobilidades no WPQW de Modelo B

A forma e as dimensões desta estrutura podem ser vistas na figura 5-1. O poço tem uma largura de W_{QW} =760 Å e possui duas camadas de impurezas doadoras Para a camada doadora localizada a esquerda do WPQW, fixamos a posição de seu centro em $Z_{D,E}$ = 290 Å e sua largura em $W_{D,E}$ = 20 Å. Já para a camada a direita do WPQW, sua posição é $Z_{D,D}$ = 1510 Å e sua largura é de $W_{D,D}$ = 100 Å. A distância de cada para o poço é de 200 Å. A concentração de impurezas aceitadoras é de n_A = $1x10^{15}$ cm^{-3}.

O primeiro resultado, figura 5-6, mostra as mobilidades (a) quântica e (b) de transporte para um WPQW, onde variamos o potencial *gate* aplicado. Neste caso usamos como densidades das camadas de doadores os seguintes valores $N_{D,E}$ = $10x10^{11}$ cm^{-2} e $N_{D,D}$ = $3x10^{11}$ cm^{-2}. As mobilidades (a) e (b) foram calculadas as mobilidades em função dos espalhamentos devido a impurezas ionizadas (linha fina), ao potencial de liga (linha média) e a impurezas aceitadoras (linha grossa).

Neste modelo, observamos que o espalhamento devido ao potencial de liga tem uma pequena contribuição para a mobilidade quântica. Para a mobilidade de transporte, figura 5-6 (b), o espalhamento devido a liga tem uma contribuição significativa, assim como o espalhamento devido as impurezas ionizadas. Apenas

duas sub-bandas são ocupadas, diferentemente do modelo na seção anterior, pois para este modelo os níveis de energia estão mais espaçados. A segunda sub-banda começa a ser populada em $N_e > 3{,}4\text{x}10^{11}$ cm^{-2}.

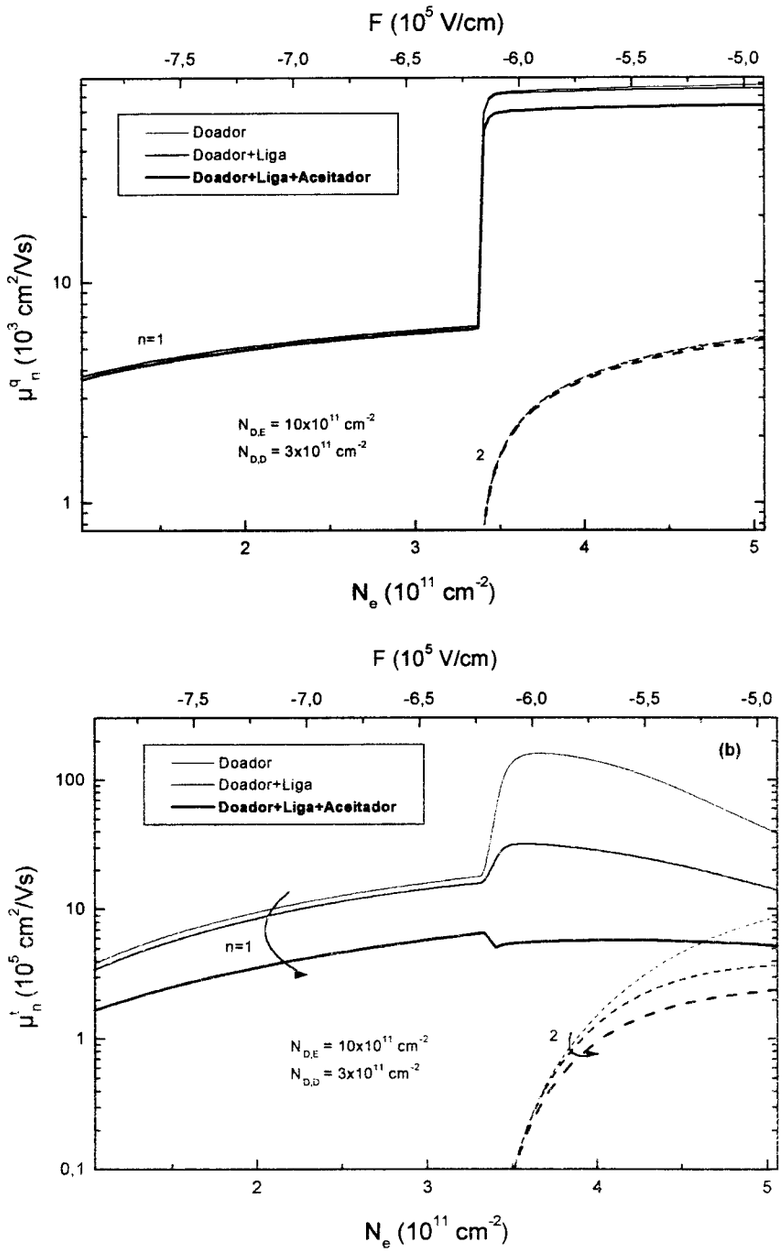


Figura 5-6: Mobilidades (a) quântica e (b) de transporte calculadas para os espalhamentos por impurezas doadoras, impurezas aceitadoras e potencial de liga.

Finalizaremos este capítulo com o resultado da figura 5-7. Nesta figura, mostramos as mobilidades (a) quântica e (b) de transporte devido aos mecanismos de espalhamento. Para estes cálculos, acrescentamos uma camada de impurezas doadora, a qual terá sua posição alterada entre os valores 520 Å $\leq Z_{D,B} \leq$ 1240 Å. Esta nova camada possui uma densidade eletrônica de $N_{D,B}$ = 1x10^{11} cm^{-2} e uma largura de $W_{D,B}$ = 20 Å. Para obtermos estes resultados fixamos as densidades das dopagens externas ao poço em $N_{D,E}$ = 10x10^{11} cm^{-2} e $N_{D,D}$ = 3x10^{11} cm^{-2}. Além de fixarmos estas dopagens, mantivemos o campo externo aplicado em F = -2,6x10^{4} V/cm e mantivemos a concentração de aceitadores em n_A = 1x10^{15} cm^{-3}. Nestes resultados, calculamos as mobilidades devido ao espalhamento por impurezas ionizadas (linha fina), depois acrescentamos o espalhamento devido ao potencial de liga (linha média) e por fim, acrescentamos o devido a impurezas ionizadas (linha grossa).

A figura 5-7 mostra que as contribribuições dos espalhamentos de liga e de aceitadores ionizados aumentam quando a terceira camada afasta-se do centro do poço, onde os elétrons estão localizados. Este efeito ocorre principalmente para a mobilidade de transporte. Tanto a mobilidade de transporte quanto a mobilidade quântica da segunda sub-banda tem um máximo local, onde se localiza o nó da função de onda.

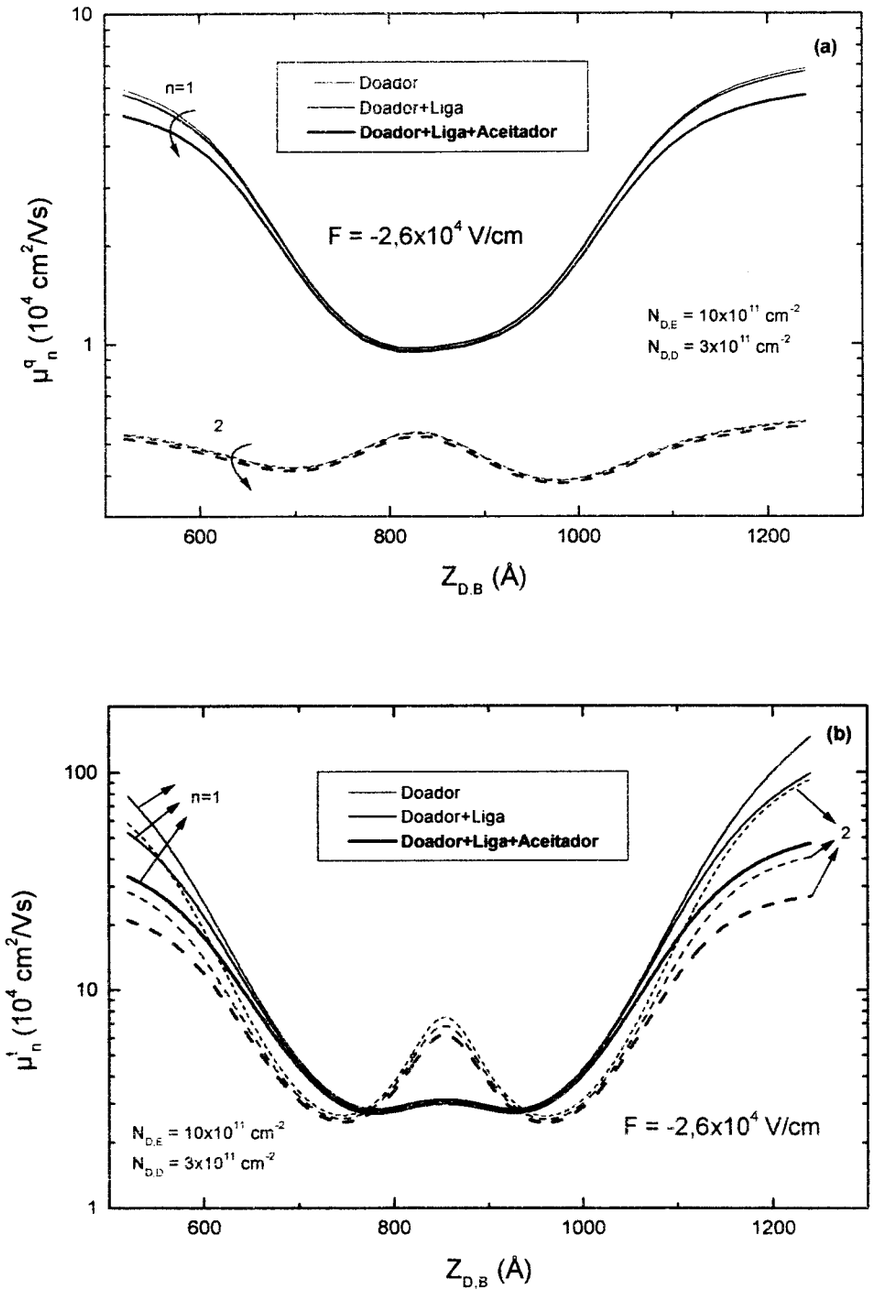


Figura 5-7: Mobilidades (a) quântica e (b) de transporte, devido aos espalhamentos por impurezas doadoras, impurezas aceitadoras e por potencial de liga.

Capítulo 6

Conclusão

Neste trabalho, estudamos a estrutura eletrônica de poços quânticos parabólicos dopados formados pelo composto ternário $Al_xGa_{1-x}As$ e, as propriedades de transporte a baixas temperaturas. Analisamos as mobilidades eletrônicas neste sistema com várias sub-bandas ocupadas. Consideramos dois mecanismos de espalhamento: impurezas ionizadas e o potencial de liga, que são responsáveis para a condutividade eletrônica da estrutura a baixas temperaturas.

Resolvemos numericamente as equações de Schrödinger e de Poisson do sistema de uma maneira autoconsistente. Obtemos as auto-energias, as autofunções, o potencial efetivo de confinamento e o nível de Fermi em função dos parâmetros da estrutura, como a densidade de elétrons, as distribuições de impurezas e o potencial de *gate* externo.

Utilizando os resultados numéricos da estrutura eletrônica calculamos as mobilidades eletrônicas em WPQW's de $Al_xGa_{1-x}As$. Devido as características dos sistemas quase-2D com várias sub-bandas ocupadas, resolvemos as equações de transporte que são um conjunto de equações acopladas, refletindo a interação entre as sub-bandas. Obtemos a mobilidade eletrônica de transporte e a mobilidade quântica

de cada sub-banda, devido aos espalhamentos de impurezas ionizadas e o de liga. Consideramos ainda o efeito de aceitadores de fundo para as estruturas eletrônicas e as mobilidades. Descobrimos que o espalhamento de aceitadores ionizados pode levar a uma modificação nas mobilidades eletrônicas. Mostramos também a importância do espalhamento de liga nestas estruturas e as de acoplamento e espalhamento entre as sub-bandas.

Nossos cálculos numéricos mostram um acordo qualitativo com os resultados experimentais recentes.

Referências

[1] M. Sundaram, A. C. Gossard, J. H. English and R. M. Westervelt, Superlatt. Microstruct. **4**, 683 (1988);

[2] M. Shayegan, T. Sajoto, M. Santos and C. Silvestre, Appl. Phys Lett. **53**, 791 (1988);

[3] J. Dreybrodt, A. Forchel and J. P. Reithmaier, Phys. Rev. B **48**, 14741 (1993). S. M. Wang, J. V. Thordson, T. G. Andersson, S. Jiang, L. X. Yang and S. C. Shen, Appl. Phys Lett. **65**, 336 (1994). Z. S. Piao, H. I. Jeon, S. S. Cha, K. Y. Lim, E. K. Such and H. J. Lee Appl. Phys. Lett. **65**, 333 (1994);

[4] C. K. Inoki, E. Ribeiro, V. Lemos e F. Cerdeira, Phys. Rev. B **49**, 2246 (1994). G. Arnaud, J. Allegre, P. Lefevbre, H. Matieu, L. K. Howard and D. J. Dunstan, Phys. Rev. B **46**, 15290 (1992);

[5] J. Menendez, A. Pinczuk, D. J. Werder, S. K. Sputz, R. C. Miller, D. L Sivco and A. Y. Cho, Phys. Rev. B **36**, 8165 (1987);

[6] E. G. Gwinn, R. M. Westervelt, P. F. Hopkins, A. J. Rimberg, M. Sundaram, and A. C. Gossard, Phys. Rev. B **39**, 6260 (1989);

[7] T. Sajoto, J. Jo, M. Santos, and M. Shayegen, Appl. Phys. Lett. **55**, 1430 (1989);

[8] K. Karrai, H. D. Drew, H. W. Lee, and Shayegan, Phys. Rev. B **39**, 1426 (1989);

[9] L. Brey, N. F. Johnson, and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **40**, 10647 (1989); F. M. Peeters, Phys. Rev. B **42**, 1486 (1990);

[10] P. F. Hopkins, A. J. Rimberg, E. G. Gwinn, R. M. Westervelt, M. Sundaram, and A. C. Gossard, Appl. Phys. Lett. **57**, 2823 (1990);

[11] M. Kaloudis, K. Ensslin, A. Wixforth, M. Sundaram, J. H. English, and A. C. Gossard, Phys. Rev. B **46**, 12469 (1992);

[12] V. Halonen, Phys. Rev. B **47**, 10001 (1993);

[13] M. Zaluzny, Semicond. Sci. Technol. **6**, 112 (1991);

[14] Guo-Qiang Hai, Nelson Studart and François M. Peeters, Phys. Rev. B **52** 8363 (1995);

[15] G. Salis, P. Wirth, T. Heinzel, T. Ihn, K. Ensslin, K. Maranowski, and A. C. Goss ard, Phys. Rev. B59 R5304 (1999), and references therein;

[16] G. R. Facer, B. E. kane, R. G. Clark, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, Phys. Rev. B56, R10036 (1997);

[17] Claude Weisbuch and Borge Vinter, Quantum Semiconductor Structures, Fundamentals and Applications , Academic Press, Inc. 1991;

[18] N. W. Aschroft, and N. D. Mermin, Solid Satate Physics, Holt, Rinehart, and Winston, Florida, 1976;

[19] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Ed. Les Éditions de Physique, France;

[20] S. Adachi, J. Appl. Phys. **58**, R1 (1985). G. Q. Hai, F. M. Peeters and J. T. Devreese, Phys. Rev. B **42**, 11063 (1990);

[21] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, Rev. Mod. Phys,. **54**,437 (1982);

[22] J. W. Harrison and J. R. Hauser, **13**, 5347 (1976);

[23] G. Bastard, Surf. Sci. **142**, 284 (1984);

[24] J. Singh, *Physics of Semiconductors and Their Heterostructures*, McGraw-Hill, Inc., 1993;

[25] J. M. Ziman, *The Theory of Transport Phenomena in Solids*, Oxford and Claredon Press, 1963;

[26] S. Raimes, *Many-Electron Theory*,North-Holland Publishing Company, 1972;

[27] D. Pines and P. Nozieres, *Theory of Quantum Liquids: Superfluid Bose Liquids*, New York,W A Benjamin, 1996;

[28] H. Haug and Stephan W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, World Scientific, Third Edition, 1994;

[29] Y. Fu and M. Willander, Journal of Applied Phys. **88**, 288 (2000);

[30] L. Nordheim, Ann. Phys. (Leipz.) **9**, 607 (1931);

[31] P. A. Flinn, Phys. Rev. **104**, 350 (1956);

[32] S. B. Ogale and A. Madhukar, J. Appl. Phys. **56** (2), 368 (1984);

[33] P. Butcher, Norman H. March and Mario P. Tosi, *Physics of Low-Dimensional Semiconductor Structures*,Plenum Press, 1993;

[34] Siggia e Kwok Phys Rev. B **2**, 1024 (1970);

[35] R. Fletcher, E. Zaremba, M. D'Iorio, C. T. Foxon and J. J. Harris, Phys Rev. B **41**, 10649 (1990);

[36] E. F. Schubert, *Delta–doping of Semiconductors*, Cambridge, 1996;

[37] A. Zrenner, thesis Munich University (1987);

[38] E.Skuras, R.Kumar, R.L.Willians, R.A. Stradiling, J.E.Demochowski, E.A. Johnson, A. Mackinnon, J.J. Harris R.B. Beall, C. Skierbeszeswki, J.Singleton, P.J. van der Wel, and P. Wisniewski, Semi. Sci. Tech. **6**, 535 (1991). R.A. Stradiling, E.A.

Johnson, A. Mackinnon, R. Kumar, E. Skuras, and J.J Harris, Semi. Sci. Tech. **6**, B137 (1991).