

# Campo Magnético em Super-Redes Semicondutoras de Cristais

## Magnetic Field in Superlattices Semiconductors of Crystals

Luciano Nascimento<sup>1</sup>; Lourdes Cristina Lucena Agostinho Jamshidi<sup>2</sup>; Celmy Maria B. de Menezes Barbosa<sup>3</sup>

### Resumo

Neste trabalho apresentamos um estudo sobre as super-redes semicondutoras, utilizando o modelo de Kronig-Penney para a aproximação de massa efetiva e em seguida os cálculos para a aplicação de campo magnético perpendicular e paralelamente às camadas da super-rede em cristais. O campo magnético, aplicado paralelo às camadas, foi utilizado para ajustar a ressonância de uma subbanda de energia mais alta de um poço por excitação térmica com uma subbanda de menor energia do poço adjacente, aumentando os níveis de energia na sua taxa de tunelamento. Utilizamos o formalismo da Equação de Schrödinger da Mecânica Quântica. Apresentando os cálculos numa forma sistemática em super-redes semicondutoras para cada poço quântico para avaliar o seu espectro de energia estudado sistematicamente.

**Paravras chave:** Modelo de Kronig-Penney. Super-Redes Semicondutoras. Campo Magnético.

### Abstract

In this work we present a study on the super-semiconductor networks, using the Kronig-Penney model for the effective mass approximation, and then the calculations for the application of the magnetic field perpendicular and parallel to the layers of super lattices crystals. The magnetic field applied parallel to the layers, was used to adjust the resonance of a higher energy subband of a well by thermal excitation with a lower energy subband of the adjacent well, increasing energy levels in its tunneling rate. We use the formalism of Schrödinger equation of quantum mechanics. Introducing the calculations in a systematic way in superlattices for each semiconductor quantum well to assess their energy spectrum systematically studied.

**Keywords:** Kronig-Penney Model. Superlattices Semiconductors. Magnetic Field.

<sup>1</sup> Doutor em Engenharia Química, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Centro de Tecnologia e Geociências-CTG/UFPE. luciano.ufpe@gmail.com

<sup>2</sup> Doutora em Engenharia Química, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Centro de Tecnologia e Geociências-CTG/UFPE. cristina.ufcg@gmail.com

<sup>3</sup> Professora Titular, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Centro de Tecnologia e Geociências-CTG/UFPE. celmy.ufpe@gmail.com

## Introdução

As Heteroestruturas semicondutoras obtidas pela junção de diferentes materiais têm sido intensamente investigadas devido às suas propriedades únicas que não são observadas em meios homogêneos (SITT; HADAR; BANIN, 2013). Foi possível criar artificialmente estruturas como os poços quânticos, fios quânticos, pontos quânticos e as super-redes, tendo um grande impacto tecnológico, com aplicações no desenvolvimento de novos dispositivos ópticos e eletrônicos.

Nesses sistemas a interação de troca entre os íons magnéticos localizados e os portadores das bandas de condução e valência produz um efeito Zeeman extremamente grande quando comparado com os semicondutores convencionais. Nas super-redes semicondutoras semimagnéticas, estes efeitos são evidenciados pela degenerescência do spin em sua célula unitária.

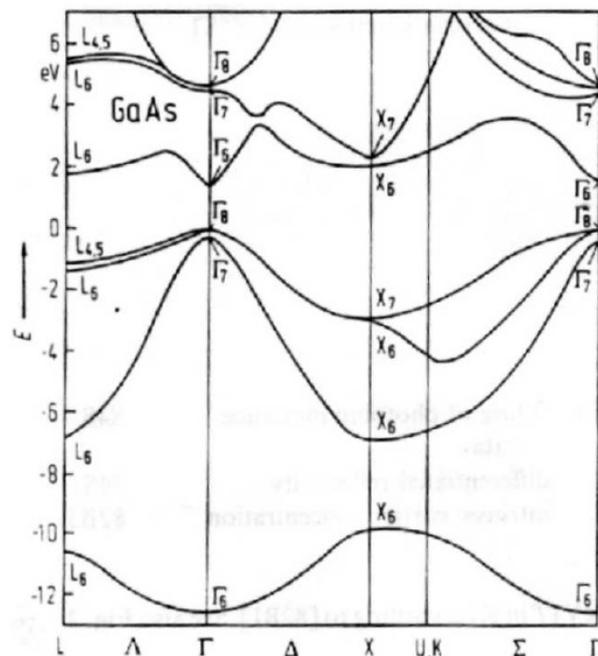
Tais sistemas, também conhecidos como heteroestruturas, representam, na prática, um potencial de confinamento unidimensional. Na maioria dos casos, as propriedades especiais das heteroestruturas semicondutoras se devem ao comportamento dos portadores de carga (elétrons e buracos) em potenciais de confinamento previamente concebidos, visando alguma aplicação prática (VAN HUNG et al., 2014).

Os semicondutores são a essência da eletrônica moderna, os transistores, os diodos, as células fotovoltaicas, os detectores e os termistores são dispositivos construídos a partir de materiais semicondutores e podem ser empregados como elementos isolados de um circuito ou compondo os denominados circuitos integrados. No estudo das super-redes semicondutoras, os cálculos são feitos em relação de dispersão, aplicando o modelo de Kronig-Penney para o potencial periódico unidimensional (aproximação por poços retangulares).

Na Figura 1 mostramos a estrutura de bandas do semicondutor GaAs, que é representativa de grande parte das ligas semicondutoras formadas por materiais

semicondutores que apresentam estrutura cristalina do tipo “zinc-blend”, como é o caso do InGaAs.

**Figura 1.** Estrutura de bandas do GaAs, característica dos semicondutores de estrutura cristalina do tipo “zinc-blend”.



Fonte: Chelikowsky e Cohen, 1974.

As bandas de valência são degeneradas no ponto  $\Gamma$ . Efeitos de confinamento, como, por exemplo, em poços quânticos, levantam esta degenerescência. Próximo  $\vec{k} = 0$  os estados de buracos apresentam curvaturas diferentes como se pode visualizar na Figura 1. A diferença na curvatura destes estados (de acordo com a definição de massa efetiva:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{d^2 E_{(k)}}{dk^2} \right) \quad (1)$$

onde  $m^*$  é a massa efetiva dos portadores de carga na rede cristalina) faz com que as massas efetivas dos buracos que ocupam tais estados sejam diferentes.

Entre InGaAs e GaAs os substratos geram deslocamentos de segmentação de alta densidade

que podem se estender para regiões de sua superfície ativas. As propriedades e o desempenho dos dispositivos baseados são muito influenciados por suas estruturas que estão ligadas a defeito de stress no sistema epitaxial de seus níveis de energia (ZHOU et.al. 2013).

As super-redes podem ser divididas em fortemente e fracamente acopladas, sendo que a diferença entre elas vem do fato de que no caso da primeira estrutura as barreiras de potencial são tão finas ( $\leq 3$  nm) que as funções de onda dos níveis de energia de poços vizinhos se acoplam formando uma mini-banda de estados permitidos. No caso das fracamente acopladas às barreiras são mais grossas, com isso só os primeiros vizinhos estão fracamente acoplados e os estados quânticos dos poços são bem localizados. A definição de multi-poços quânticos também é usada para qualquer estrutura que contenha poços quânticos, sendo essa uma estrutura periódica ou não. Neste artigo, abordamos um modelo físico com fortes concepções na Mecânica Quântica, possibilitando a discussão sobre algumas flutuações de energia que são as causas de fontes para o surgimento das bandas de valência são degeneradas seguido de sua degenerescência de desordem nas heteroestruturas semicondutoras, causada pela influência do campo magnético nas subbandas de energias e a partir deste modelo desenvolvido em função massa efetiva dos portadores de carga na rede cristalina dos semicondutores.

## Teoria Aplicada

### Níveis de Energia

O confinamento gerado pelas barreiras de potencial leva a uma discretização das energias possíveis para os elétrons dentro dos poços de potencial. Para encontrar esses níveis de energia será utilizado o modelo de Kronig-Penney para uma estrutura de potencial de multi-poços quânticos infinita, como mostrada na Figura 2. Segundo o teorema de Bloch as autofunções de uma equação

de onda para um potencial periódico podem ser escritas como o produto de uma onda plana por uma função  $u_k(\vec{r})$  com a periodicidade da rede cristalina, conforme a equação (2) (NUSSENZVEIG, 1998):

$$\psi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (2)$$

O potencial periódico da estrutura na qual serão baseados os cálculos é descrito por:

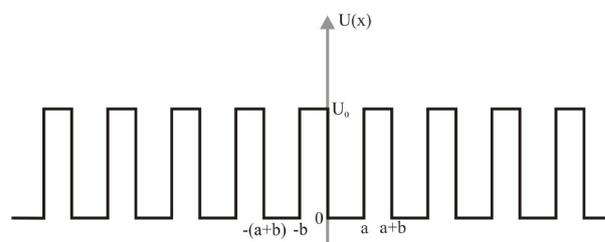
$$U_o(z) = U_o(z - nd) \quad (3)$$

com

$$U_o(z - nd) = \begin{cases} 0, & \text{para } |z - nd| \text{ dentro do poço} \\ U_o, & \text{para } |z - nd| \text{ fora do poço} \end{cases} \quad (4)$$

onde a altura das barreiras é dada por  $U_0$ , as larguras dos poços e barreiras são  $a$  e  $b$ , respectivamente,  $d$  é a periodicidade do potencial, dado por  $d = a + b$ , e  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

**Figura 2.** Potencial periódico de uma super-rede infinita com poços de largura, barreiras de largura  $b$  e altura  $U_0$ .



Fonte: Bastard, 1992.

A solução do problema de multi-poços quânticos se reduz a um problema unidimensional, pois os movimentos dos elétrons na direção de crescimento ( $z$ ) e no plano perpendicular a essa direção são desacoplados e as auto-energias podem ser escritas como:

$$E_n(z, \vec{k}_\perp) = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m^*} + E_n(z) \quad (5)$$

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

Na aproximação de massa efetiva, as soluções do problema na fronteira entre poços e barreiras de potencial requerem que tanto as funções quanto suas derivadas primeiras sejam contínuas. Indexando a fronteira entre um poço e uma barreira qualquer como  $(f)$ , temos as expressões das condições de contorno (GRIFFITHS, 1994):

$$\psi_w(z) \Big|_f = \psi_B(z) \Big|_f \quad (6)$$

$$\frac{1}{m_w^*} \frac{\partial \psi_w(z)}{\partial z} \Big|_f = \frac{1}{m_B^*} \frac{\partial \psi_B(z)}{\partial z} \Big|_f \quad (7)$$

Depois de algumas manipulações algébricas, chega-se à função transcendental abaixo cujas soluções são os níveis de energia de uma estrutura de potencial para uma super-rede.

$$\cos(kd) = \cos(k_w a) \cosh(k_b b) + \frac{1}{2} \left( \frac{m_w^* k_B}{m_B^* k_w} - \frac{m_B^* k_w}{m_w^* k_B} \right) \text{sen}(k_w a) \text{senh}(k_b b) \quad (8)$$

onde  $k$  é o vetor de onda usado para indexar as soluções,

$$k_w = \sqrt{\frac{2m_w^* E}{\hbar^2}} \quad (9)$$

é o vetor de onda dos elétrons dentro do poço,

$$k_B = \sqrt{\frac{2m_w^* (U_o - E)}{\hbar^2}} \quad (10)$$

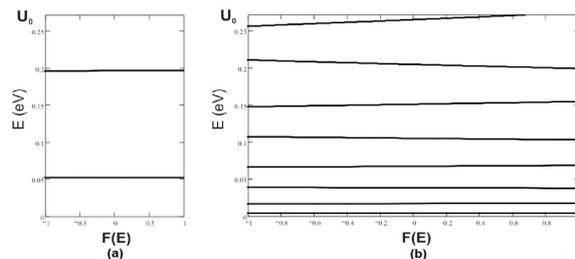
é o vetor de onda dos elétrons na região das barreiras e  $E$  a energia dos elétrons. A equação (8) fornece uma relação implícita entre os níveis de energia dos estados permitidos no poço e os parâmetros da amostra, sendo possível solucioná-la apenas numérica ou graficamente. No intervalo  $[-1,1]$ , onde é válido  $\cos(kd)$ , o lado direito dessa equação,

$$F(E) = \cos(k_w a) \cosh(k_b b) + \frac{1}{2} \left( \frac{m_w^* k_B}{m_B^* k_w} - \frac{m_B^* k_w}{m_w^* k_B} \right) \text{sen}(k_w a) \text{sen}(k_b b) \quad (11)$$

mostra os estados permitidos para a estrutura de multi-poços quânticos

A Figura 3 mostra dois gráficos de  $F(E)$  para os seguintes parâmetros: largura dos poços  $a = 7$  nm e largura das barreiras  $b = 13$  nm, apresentado em (a), e  $a = 33$  nm,  $b = 4$  nm em (b). Para facilitar a visualização os gráficos estão posicionados de tal forma que a energia,  $E$ , está representada na ordenada, enquanto que  $F(E)$  está na abscissa. Os eixos verticais dos gráficos também representam a altura da barreira, pois os cálculos foram feitos para valores de energia até  $U_o$ . Os pontos onde  $F(E) = 0$  indicam a posição dos níveis de energia, enquanto que a inclinação da função  $F(E)$  entre  $\pm 1$  fornece a largura de cada nível (YI et al., 2010).

**Figura 3.** Gráfico da função das auto-energias, lado direito da igualdade da equação (8), para uma seqüência de multi-poços quânticos, para poços de 7 nm e barreira de 13 nm (a) e para poços de 33 nm e barreira de 4 nm (b). A altura das barreiras é de 270 meV.



Fonte: Chambers, 1964 .

*Efeitos da Aplicação de Campo*

A aplicação de um campo magnético em uma estrutura do tipo super-rede ou multipoços quânticos quantiza o movimento dos elétrons no plano perpendicular à direção do campo em órbitas de Landau. Do ponto de vista semiclássico, uma carga  $e$  numa região onde existe um campo magnético  $B$  e com energia descrita pela equação dos níveis de Landau, descreve órbitas circulares cujo raio depende do campo magnético da seguinte forma:

$$\xi = \frac{(2n+1)\hbar^2}{eB} \quad (12)$$

onde  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Para um campo magnético de 12 T e  $n = 0$ , esse raio vale 13 nm, sendo da ordem do tamanho da periodicidade de uma heteroestrutura do tipo multi-poços quânticos. Para tamanhos de rede da ordem da rede cristalina (0,5 nm) o campo magnético necessário para se observar qualquer efeito deste sobre os elétrons de condução do material deveria ser em torno de 2000 T, o que mostra a grande vantagem do uso das heterocamadas semicondutoras nos estudos de magneto tunelamento. Nas próximas seções serão mostradas as deduções de algumas das equações básicas que descrevem o comportamento do elétron em um potencial confinante de um poço de potencial e sob a ação de um campo magnético aplicado em duas direções principais: perpendicular e paralela aos planos das camadas semicondutoras.

*Campo Magnético Perpendicular às Camadas Semicondutoras*

Vamos, primeiramente, considerar o campo magnético aplicado na direção  $z$  de um cristal volumétrico como, por exemplo, GaAs:  $\vec{B} = (0, 0, B)$ . O potencial vetor,  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ , usando o calibre de Landau, pode ser escrito da forma:  $\vec{A} = (-yB, 0, 0)$ . Na aproximação de massa efetiva, o Hamiltoniano em tal situação fica:

$$H = \frac{(\vec{P} - e\vec{A})^2}{2m^*} = \frac{[(P_x + yeB)^2 + P_y^2 + p_z^2]}{2m^*} \quad (13)$$

ou

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{(yeB)^2}{2m^*} - \frac{(ie\hbar yB)}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} \quad (14)$$

que é o Hamiltoniano do elétron livre sob influência de um campo magnético. Partindo da expressão (13) podemos ver que  $P_x$  e  $P_z$  comutam com  $H$ . Dessa forma, podemos construir um conjunto completo de autovetores comuns a  $H$ ,  $P_x$  e  $P_z$ . Assim, podemos escrever a equação de autovalor  $H\psi = E\psi$ , onde a autofunção  $\psi(x, y, z)$  é também autofunção de  $P_x$  e  $P_z$  e é da forma:

$$\psi(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_z z)} \varphi(y) \quad (15)$$

Substituindo a equação (15) na equação de autovalor, obtemos uma equação diferencial para  $\varphi(y)$  (CHAMBERS, 1964):

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi(y)}{dy^2} + \frac{\hbar e B k_x}{m^*} y \varphi(y) \left[ \frac{e^2 B^2}{2m^*} y^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_z^2) \right] \varphi(y) = 0 \quad (16)$$

Fazendo uma translação em  $y' = y + y_0$ , onde

$$y_0 = \frac{-\hbar k_x}{eB}, \text{ chegamos a:}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi(y')}{dy'^2} + \frac{m^* \omega_c^2}{2} y'^2 \varphi(y') = E' \varphi(y) \quad (17)$$

onde chamamos  $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ , a frequência de ciclotron,  $E' = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$ . A equação (17) é a equação para o oscilador harmônico, cujas auto-energias são dadas por:

$$E' = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad (18)$$

Dessa forma, as energias permitidas para o elétron sob a ação de um campo magnético são:

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} + \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad (19)$$

Podemos ver através de (19) que o campo magnético quantiza o movimento do elétron no plano perpendicular à direção em que está sendo aplicado, enquanto que nesta direção o elétron se comporta como um elétron livre. Estendendo esse resultado para o caso em que o elétron está sob a ação de um potencial confinante  $U_0(z)$ , do tipo de multi-poços quânticos, dado pela equação 3 e mostrado na Figura 2, o Hamiltoniano do sistema passa a ser:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{(eyB)^2}{2m^*} - \frac{ie\hbar y B}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} + U_0(z) \quad (20)$$

Como o potencial  $U_0(z)$  confina a energia dos elétrons na direção  $z$ , a energia total do sistema pode ser escrita como a parte quantizada na direção  $z$  adicionada à parte quantizada no plano  $xy$ . Dessa forma as auto-energias passam a ser dadas por:

$$E_{i,N} = \varepsilon_i + \left( N + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad (21)$$

com ,onde são os níveis quase-ligados dados pela solução de (11). Nesse caso, o movimento

do elétron é totalmente quantizado. Na direção  $z$ , pelo potencial  $U_0(z)$ , e no plano  $xy$ , pelo campo magnético aplicado.

### *Campo Magnético Paralelo às Camadas Semicondutoras*

Para o caso de uma estrutura de multi-poços quânticos descrita pelo potencial  $U_0(z)$  da equação (3), sob a ação de um campo magnético aplicado perpendicular à direção de crescimento da amostra, ou seja, a direção do campo magnético é paralela ao plano dos poços de potencial, direção  $x$ , por exemplo, a equação de Schrödinger não pode ser resolvida analiticamente. Podemos usar uma aproximação de campo magnético pequeno e resolver o problema tratando o campo magnético como uma perturbação em cada poço isoladamente. Essa aproximação é válida quando a energia de confinamento do elétron é muito maior que a energia de ciclotron. Usando esse formalismo, encontramos os valores para as autoenergias, em primeira ordem. Considerando o campo magnético ao longo da direção  $x$ ,  $\vec{B} = (B, 0, 0)$ , com o potencial vetor no calibre de Landau,  $\vec{A} = (0, -zB, 0)$  e chamando o potencial dos poços quânticos  $U(z)$ , as auto-energias do Hamiltoniano, são, em primeira aproximação (CHOEN-TANNOUDJI; DIU; LALOË, 2005),,

$$H = \frac{(\vec{P} - e\vec{A})^2}{2m^*} + U(z) \quad (22)$$

$$H = \varepsilon_i(0) + \frac{e^2 B^2}{2m^*} \left( \langle z^2 \rangle_i - \langle z \rangle_i^2 \right) + \frac{1}{2m^*} \left( \hbar k_y + eB \langle z \rangle_i \right)^2 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \quad (23)$$

onde  $\langle z^2 \rangle_i$  é o valor médio de  $z^2$  e  $\langle z \rangle_i$  o valor médio de  $z$  para a função de onda não perturbada da  $i$ -ésima subbanda dos poços. Dessa forma, o campo magnético, que está na direção  $x$ , afeta os níveis de energia gerados pelo potencial confinante  $U(z)$ . O primeiro termo do lado direito da equação (22) é

o nível de energia  $\varepsilon_i$  devido ao confinamento das barreiras de potencial. O segundo termo, chamado usualmente de desvio diamagnético, aumenta cada nível de energia, no eixo da energia, por um fator proporcional a  $B^2$  e a

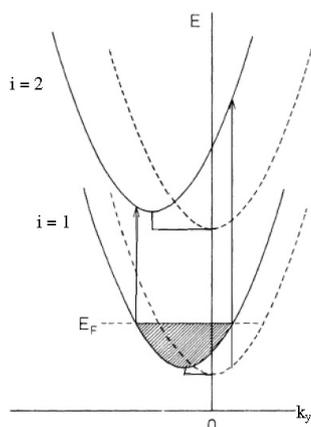
$$\langle \Delta z^2 \rangle_{i,n} = \langle z^2 \rangle_{i,n} - \langle z \rangle_{i,n}^2 \quad (24)$$

O terceiro termo desloca o mínimo das curvas de dispersão em  $k_y$  de um termo igual a ,

$$\frac{-eB \langle z_i \rangle}{\hbar} \quad (25)$$

na direção de  $k_y$ . A Figura 4 mostra o deslocamento com o campo magnético do nível fundamental de um poço em relação ao primeiro nível excitado do mesmo ou de outro poço, de acordo com a equação (22). A ação do campo magnético em uma estrutura de muitos poços quânticos, como é o caso das super-redes.

**Figura 4.** Relação de dispersão dos dois primeiros níveis de energia de um poço quântico na ausência de campo magnético (pontilhado) e com um campo magnético aplicado na direção x (linhas sólidas). Repare no deslocamento em  $k_y$  devido à presença do campo magnético. A energia de Fermi está indicada por  $E_F$ .



Fonte: (BEINVOLGLT; KAMGAR; KOCH, 1974)

A existência de uma faixa de energia (minibanda) afeta os fenômenos de transporte de cargas através da estrutura de rede, pois o campo magnético afeta o mecanismo de espalhamento eletrônico netas faixas de energia que diminui o espalhamento por fônons acústicos nesta super rede semicondutora.

## Conclusões

As principais conclusões deste estudo são as seguintes:

- Este modelo teórico, evidência algumas propriedades da heteroestrutura onde as desordens são muitos variados, e levam a diversos resultados interessantes e às vezes surpreendentes, e os cálculos feitos em nível de energia de banda podem ser resolvidos através da equação de Schrödinger;
- Existe uma ocorrência de tunelamento ressonante nas subbandas termicamente excitadas para níveis de menor energia de poços vizinhos, em multi-poços quânticos na presença de campo magnético paralelo às camadas semicondutoras;
- A relação entre a estrutura cristalina e eletrônica numa super-rede é calculada mediante as funções de onda em um poço de potencial formado por dois materiais semicondutores diferentes em função da atuação do campo magnético em seus níveis de energia;
- O aumento do campo magnético provoca uma sucessão de reduções descontínuas na resistência elétrica devido ao rearranjo dos domínios de campo elétrico induzido pelo campo magnético;
- Aplicando o campo magnético na direção de crescimento da super-rede, verificamos que quanto maior a temperatura, menor a influência do campo para os spins.

## Agradecimentos

Os autores agradecem ao PRH 28 / MCT / ANP pelo o apoio financeiro deste trabalho.

CHOEN-TANNOUJJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. *Quantum Mechanics*. Vol. I and II. New York: John Wiley & Sons, Paris Hermann, 2005.

## Referências

SITT, A; HADAR, I; BANIN, U. Band-gap engineering, optoelectronic properties and applications of colloidal heterostructured semiconductor nanorods. *Nano Today* 329, pp.1-20, 2013.

VAN HUNG, N.; THANG, C.S.; TOAN, N.C.; HIEU, H.K. Temperature dependence of Debye-Waller factors of semiconductors. *Vacuum* 101, pp. 63-66, 2014.

ZHOU, S.; LIU, Y.; WANG, D.; YU, Z. Calculation of the bending area of threading dislocations of InGaAs quantum dots on a GaAs substrate. *Superlattices and Microstructures* 63, pp. 29-35, 2013.

CHELIKOWSKY, J. R.; COHEN, M. L., *Physical Review B*, 10, 5095 (1974).

NUSSENZVEIG, H. M. *Curso de Física Básica – Ótica, relatividade, física quântica*. São Paulo: Edgard Blücher, 1998.

BASTARD, G. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Éditions de Physique, (Paris) 1992.

GRIFFITHS, D.J. *Introduction to Quantum Mechanics*. New York: Pearson Higher Education Publishers, 1994.

YI, L.; TANG, A; NIU, M.; HAN, W.; HOU, Y.; GAO, M. Synthesis and self-assembly of Cu<sub>1,94</sub>S–ZnS heterostructured nanorods. *Cryst.Eng. Comm.* 12, pp.4124–4130, 2010.

CHAMBERS, W. G. *Proc. Phys. Soc.* 82, 181 (1964).

BEINVOGL, W.; KAMGAR, A.; KOCH, J. F. *Physical Review B*, 14, 4274 (1976).

Recebido em 9 Março 2015 - Received on March 9, 2015.  
Aceito em 21 Abril, 2015 - Accepted on April 21, 2015.