



Ministério da Educação

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ

Criada pela Lei nº 10435, de 24 de Abril de 2002

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

ISABELA FRANCO COSTA

*Oscilações de Shubnikov-de Haas em nanoestruturas
baseadas em semicondutores de gap estreito*

Itajubá, abril de 2022



Ministério da Educação

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ

Criada pela Lei nº 10435, de 24 de Abril de 2002

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

ISABELA FRANCO COSTA

*Oscilações de Shubnikov-de Haas em nanoestruturas
baseadas em semicondutores de gap estreito*

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências em Física.

Área de Concentração: Matéria Condensada

Linha de Pesquisa: Semicondutores

Orientador: Dr. Marcelos Lima Peres

Itajubá, abril de 2022

Agradecimentos

Primeiramente agradeço aos meus pais Eliane e Felipe, ao meu namorado Thiago e minha irmã Janaína pelo incentivo, compreensão, paciência e suporte durante todo o programa de mestrado e, em especial, nos períodos de realização de medidas ao longo dos finais de semana.

Grata aos colegas do grupo de pesquisa Luís, Karine, Daniel, Matheus e Gabriel pelas instruções no laboratório que contribuíram para realizar as medidas, assim como, nas discussões dos efeitos observados; além do companheirismo e amizade.

Também, ao Dr. Rappl e Dr. Abramof pelo crescimento das amostras, assim como por corrigir e contribuir com os cálculos para os artigos publicados com resultados deste trabalho.

Ao professor Dr. Marcelos Peres agradeço pelo incentivo, paciência e instrução para realização deste projeto de mestrado e das atividades de estágio no exterior. Também, agradeço pelos bons conselhos no laboratório e amizade que me deram suporte para um bom trabalho.

Em especial, agradeço ao professor e Dr. Demétrio Werner que me apresentou ao mundo da física de matéria condensada no período da graduação, na Universidade Federal de Itajubá. E, dessa forma, cultivou a minha curiosidade por essa área de pesquisa.

Resumo

Neste trabalho foram investigadas propriedades de magneto transporte em estruturas de poço quântico de PbTe, dopado com BaF₂, e uma heteroestrutura de SnTe/Sn_(1-x)Eu_xTe. Ambas as estruturas foram crescidas pela técnica de epitaxia por feixe molecular (MBE) pelo Laboratório Associado de Sensores e Materiais do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – LAS/INPE na cidade de São José dos Campos (SP), a fim de desenvolver semicondutores com alta cristalinidade. Essas estruturas são do tipo-*p* e com espessuras dadas por 10 nm do poço e 5 μm do filme. As medidas realizadas consideraram duas condições de iluminação, com luz infravermelha (IR) (940 nm de comprimento de onda) e escuro, para temperaturas variando de 300 K até 1,9 K e com campo magnético aplicado de até 9 T perpendicular à superfície. Nas discussões das curvas de magnetorresistência foram analisadas as componentes oscilatórias do efeito Shubnikov-de Haas, a fim de identificar a origem do padrão de batimento, considerando a ocorrência do efeito Rashba devido interações de efeito *spin*-órbita e propriedades de simetria do sistema. Com essa finalidade foram calculados massas efetivas, concentração e mobilidade eletrônica de portadores, além dos fatores-*g* de Landé, para investigar anisotropia do sistema. Nas análises das medidas de magneto transporte para o poço quântico de PbTe:BaF₂ foram confirmadas o transporte por multivales, ou seja, com contribuição no transporte eletrônico pelos vales longitudinais e oblíquo da superfície de Fermi, através do cálculo das energias de confinamento dos vales dentro do poço. Enquanto para a heteroestrutura o transporte ocorreu apenas através do vale longitudinal. Para essas amostras também foram verificados os efeitos que contribuíram para geração das componentes oscilatórias do efeito Shubnikov-de Haas. Nesse caso, para o PbTe:BaF₂ o cálculo da energia de Rashba de 8,4 meV explicou *splitting* do vale longitudinal e a ocorrência das frequências α e β . Para a heteroestrutura essa energia do *splitting* de Rashba correspondeu a um valor pequeno de 0,17 meV, calculada a partir de valores de frequências das oscilações Shubnikov-de Haas extraídas do ajuste Lifshitz-Kosevich (LK). Desse mesmo ajuste foram confirmados o transporte por estados de *bulk* na heteroestrutura, embora o SnTe seja isolante topológico cristalino e na teoria de isolantes topológicos são esperados transporte por estados de superfície (TSS).

Palavras-chave: Oscilações Shubnikov-de Haas, efeito Rashba; poços quânticos de PbTe; heteroestrutura baseada em SnTe; isolante topológico cristalino; transporte por multivales.

Lista de Abreviaturas

UNIFEI	Universidade Federal de Itajubá
GIFES	Grupo de Investigação em Física do Estado Sólido
INPE	Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais
LAS	Laboratório Associado de Sensores e Materiais
SdH	Shubnikov-de Haas
MR	Magnetorresistência
SO	<i>Spin</i> -órbita
HQ	Hall Quântico
HQS	Hall Quântico de <i>spin</i>
ALF	Anti-localização fraca
SIT	Simetria de Inversão Temporal
ISQ	Inversão de Simetria Quebrada
IT	Isolante Topológico
ITC	Isolante Topológico Cristalino
TSS	Estados Topológicos de Superfície
ARPES	Angle Resolved Photoemission Spectroscopy
2D	Bidimensional
3D	Tridimensional
MBE	Molecular Beam Epitaxy
UHV	Ultra-high Vacuum
RHEED	Reflection High Energy Electron Diffraction
LEED	Low Energy Electron Diffraction
PPMS	Physical Properties Measurements System
LED	Diodo Emissor de Luz
IR	Infravermelho
UV	Ultravioleta
LK	Lifshitz-Kosevich
FFT	Fast Fourier Transform

Lista de Símbolos

\hbar	Constante de Planck reduzida
h	Constante de Planck
k_B	Constante de Boltzmann
ω_c	Frequência angular ciclotrônica
m_c ou m^{cyc}	Massa ciclotrônica do elétron
m_e	Massa de repouso do elétron
m_{\perp}	Massa efetiva transversal
m_{\parallel}	Massa efetiva longitudinal
m_L^{cyc}	Massa ciclotrônica efetiva longitudinal
m_O^{cyc}	Massa ciclotrônica efetiva oblíqua
e	Carga do elétron
p	Concentração de buracos por unidade de volume
n	Concentração de elétrons por unidade de volume
n_{2D}	Concentração de portadores por unidade de superfície
p_{2D}	Concentração de buracos por unidade de superfície
p_{3D}	Concentração de buracos por unidade de volume
ν	Fator de preenchimento do nível de Landau
l	Comprimento magnético do nível de Landau
μ	Mobilidade
ρ	Resistividade
σ	Condutividade elétrica
σ_{xy}	Condutividade transversal
σ_{xx}	Condutividade longitudinal
R_{xx}	Resistência longitudinal
R_{xy}	Resistência transversal
R_O	Resistência para campo magnético nulo
μ_o	Permeabilidade magnética no vácuo
μ_B	Magneton de Bohr
c	Velocidade da luz no vácuo
λ	Comprimento de onda da luz

γ	Comprimento de atenuação da luz
V_H	Tensão Hall
N	Níveis ocupados por elétrons
ΔE_g	<i>Gap</i> de energia
ΔE_v	Energia da banda de valência
ΔLL	Energia de separação entre níveis de Landau
E_R	Energia de Rashba
Δk_R	Fator de <i>splitting</i> de Rashba
α_R	Parâmetro de Rashba
β	Deslocamento de fase relativo à fase de Berry
δ	Fase relativa à dimensão da superfície de Fermi
T_D	Temperatura de Dingle
T	Temperatura
f	Frequência de oscilação
A_{FFT}	Amplitude de ajuste da <i>Fast Fourier Transform</i>
A_0	Constante de ajuste da amplitude
\bar{B}	Inverso do campo magnético efetivo
S_F	Área da seção transversal da superfície de Fermi
S_F^L	Área da seção transversal da superfície de Fermi longitudinal
S_F^O	Área da seção transversal da superfície de Fermi oblíqua
g	Fator de Landé
ε_Z	Energia de Zeeman
ε_F	Energia de Fermi
k_F	Vetor de onda da superfície de Fermi
\mathbf{B} ou \mathbf{B}_{eff}	Vetor campo magnético
\mathbf{I}	Vetor corrente elétrica
\mathbf{E}	Vetor campo elétrico
$\boldsymbol{\mu}$	Vetor de momento magnético do elétron
\mathbf{p}	Vetor momento linear do elétron

Sumário

1	Introdução.....	- 1 -
2	Revisão Bibliográfica.....	- 5 -
2.1	Isolantes Topológicos	- 5 -
2.2	Oscilações Shubnikov-de Haas e Efeito Hall Quântico.....	- 8 -
2.2.1	Relação de Onsager e as frequências das oscilações Shubnikov-de Haas .-	12 -
2.3	Acoplamento spin-órbita e Efeito Rashba	- 14 -
2.4	Fator g de Landé.....	- 16 -
2.5	O isolante topológico cristalino SnTe.....	- 17 -
2.5.1	Oscilações Shubnikov-de Haas e efeito Rashba em filmes de SnTe	- 18 -
2.6	Heteroestrutura de SnTe/SnEuTe	- 19 -
2.7	Propriedades físicas do PbTe	- 20 -
2.8	Poços quânticos de PbTe	- 23 -
2.8.1	Efeito Hall Quântico e Shubnikov-de Haas em poços quânticos de PbTe.-	25 -
2.8.2	Efeito Rashba em poços quânticos de PbTe.....	- 26 -
3	Materiais e Métodos	- 28 -
3.1	Epitaxia por feixe molecular (MBE)	- 28 -
3.1.1	Crescimento das amostras	- 31 -
3.2	Medidas de transporte eletrônico	- 33 -
3.2.1	Configuração medidas de transporte elétrico	- 33 -
3.2.2	Configuração para medição do efeito Hall	- 35 -
3.3	Comprimento de atenuação da radiação incidente.....	- 36 -
4	Resultados e Análises.....	- 37 -
4.1	Poço quântico PbTe:BaF ₂	- 37 -
4.2	Heteroestrutura SnTe/Sn _(1-x) Eu _x Te	- 49 -
5	Conclusão	- 61 -
6	Referências.....	- 62 -

1 Introdução

Os semicondutores do grupo IV-VI são amplamente investigados pela aplicabilidade em dispositivos óptico e termoeletrônicos^{1,2}. Essas aplicações são possíveis devido as características físicas comuns a esses materiais como a alta constante dielétrica ($\epsilon \gtrsim 400$),³ e a presença de gaps de energia pequenos nos pontos L da zona de Brillouin, os quais permitem a fabricação de lasers de diodo infravermelho, células solares e memórias não voláteis⁴⁻⁶. Tais propriedades elétricas abrem caminho para análise de medidas de magnetotransporte, a fim de compreender a natureza quântica desses semicondutores pela observação de oscilações de Shubnikov-de Haas e o acoplamento spin-órbita.

As investigações abrangem a aplicação dos compostos IV-VI, particularmente PbTe e SnTe em poços quânticos, filmes finos e heteroestruturas. Os teluretos de chumbo e estanho, em especial, possuem características semelhantes na estrutura cristalina e, no entanto, possuem estados topológicos de condução distintos. A topologia desses semicondutores amplia a discussão de efeitos quânticos, que ocasionam estados metálicos em estruturas com banda isolante. Tais materiais são definidos por Isolantes Topológicos (ITs). Neste caso, o SnTe difere do PbTe por possuir superfície condutora e seu interior (*bulk*) isolante. O PbTe é um isolante com topologia trivial, enquanto o SnTe é não trivial⁷.

A topologia não trivial da banda é proveniente da SIT e invariantes topológicas do sistema associados ao acoplamento *spin*-órbita. Esses fatores geram à inversão de bandas de condução e valência, permitindo estados metálicos nas superfícies e fronteiras. Também, em estudos mais recentes têm se discutido a contribuição adicional de simetrias de elementos do cristal, que conferem proteção a esses estados metálicos. Dessa forma, os ITs cujos estados topológicos de superfície são protegidos pela simetria cristalina são classificados como Isolante Topológico Cristalino (ITC)⁸.

Estruturas com estanho como SnS, SnSe e SnTe (Yandong Ma *et.al*, 2016)⁹ são reportados como ITCs. Esses estados topológicos permitem a aplicação em dispositivos de spintrônica, que conduz correntes de *spins* e possibilita desenvolver dispositivos com menos dissipação de energia e aplicados para computação quântica. A análise detalhada das oscilações de Shubnikov-de Haas observadas nessas estruturas permite confirmar a existência de transporte elétrico por estados topológicos de superfície, assim como a

presença do efeito de espalhamento de *spin* de Rashba, que ocorre pela interação do acoplamento *spin*-órbita com variação espacial da estrutura de bandas, em sistema com potencial cristalino assimétrico.

O desenvolvimento dessas tecnologias emergentes não se restringe apenas a ITs. O PbTe possui topologia de isolante trivial e, no entanto, pela presença desse telureto em estruturas como poços quânticos, possibilita a aplicação em spintrônica, devido ao acoplamento *spin*-órbita nesses materiais. A presença do forte efeito Rashba foram verificados em estruturas de poços quânticos de PbTe tipo-*n*, por Peres *et.al* (2014)¹⁰. Nas estruturas desses poços quânticos, as barreiras com liga de PbTe dopada com íons de Eu^{+2} ($\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$) fornecem o confinamento eletrônico necessário para o transporte bidimensional de gás de elétrons^{12,13}.

A presença do elemento estanho, Sn, no PbTe, formando uma liga ternária, introduz importantes propriedades na estrutura de banda. Essas ligas tornam essa estrutura do PbTe em um isolante topológico cristalino, devido a inversão de banda que ocorre para uma dada concentração de Sn. O filme da liga ($\text{Pb}_{(1-x)}\text{Sn}_x\text{Se}$) e heteroestruturas ($\text{PbTe}/\text{Pb}_{(1-x)}\text{Sn}_x\text{Te}$)^{14,15} são exemplos disso. Super redes de PbTe/SnTe, também, são exemplo do estado de isolante topológico em estruturas com PbTe¹⁶. Neste último exemplo, a inversão de bandas no PbTe ocorre pelo forte acoplamento *spin*-órbita, que diminui a energia de *gap* e induz a inversão de banda na super rede e gerando fase de IT.

Neste trabalho, as investigações das propriedades de ITC da heteroestrutura de SnTe/ $\text{Sn}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ em baixas temperaturas viabilizaram a observação e análise desses efeitos quânticos, com maiores amplitudes das oscilações de Shubnikov-de Haas. Através das componentes oscilatórias foram calculadas a concentração dos portadores de carga, assim como as massas ciclotrônicas efetivas, níveis de Landau e o fator-*g* de Landé. Além do estudo dessas oscilações, análises do efeito Hall contribuíram para compreender o comportamento dos portadores de carga e mobilidade com a diminuição da temperatura no sistema.

Da mesma forma, análises das medidas de magnetotransporte foram aplicadas para o poço quântico tipo-*p* de $\text{PbTe}:\text{BaF}_2/\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$. Em adição a essas investigações no poço quântico dopado com BaF_2 , realizamos medidas de fotocondução para verificar canais dos níveis de defeito, que armadilham elétrons nesses níveis de energia das bandas eletrônicas. Os semicondutores IV-VI são sensíveis a radiação infravermelha (IR) e, por isso, nessas medidas utilizamos diodo emissor de luz IR com potência de $64 \mu\text{W}$ e comprimento de onda de 940 nm .

A incidência de luz IR nas medidas de magnetotransporte permitiram comparar, com a ausência de luz, as propriedades do transporte elétrico. No caso para $\text{SnTe}/\text{Sn}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ a condição de iluminação teve por objetivo identificar a contribuição de cada camada da estrutura para o transporte. A partir dessa análise verificou-se o transporte por ambas camadas, mas na presença de luz IR há maior contribuição do filme $\text{Sn}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$, visto que o comprimento de penetração da radiação ocorre apenas nessa primeira camada.

Para o poço quântico de PbTe dopado com BaF_2 a comparação das medidas de magnetotransporte nessas condições de luminosidade permitiram investigar o transporte elétrico pelos vales longitudinais e oblíquos presentes na superfície de Fermi do PbTe, que se constituem de quatro elipsoides de revolução. Em ambas as condições foi verificado o transporte por multivales, a partir do cálculo das energias de confinamento do poço. Na presença de luz IR, há a adição de transporte por um vale longitudinal responsável pela existência de uma componente oscilatória adicional nas oscilações Shubnikov-de Haas.

A discussão das propriedades dos ITs e semicondutores IV-VI será detalhada no capítulo de Revisão Bibliográfica. Assim como a teoria das oscilações Shubnikov-de Haas e efeito Hall. A discussão desses efeitos será importante para compreensão da análise dos dados coletados das medidas para ambas as amostras de $\text{SnTe}/\text{Sn}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ e de $\text{PbTe}:\text{BaF}_2/\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$.

No terceiro capítulo serão apresentados os métodos utilizados para coleta e análise dos dados. Desta maneira, deve-se detalhar a técnica de crescimento por MBE das amostras, bem como descrever os equipamentos de medição. Também será exposto a configuração de montagem das amostras para as medidas de magnetorresistência e efeito Hall.

No quarto capítulo serão exibidos os resultados dos dados analisados, assim como a discussão dos efeitos assinalados pelos gráficos e ajustes feitos a partir de cálculos teóricos, comparando com os dados experimentais. Esse capítulo é separado em duas seções, sendo a primeira direcionada para discussão das análises das medidas de magnetotransporte no poço quântico de $\text{PbTe}:\text{BaF}_2/\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ e a segunda para heteroestrutura de $\text{SnTe}/\text{Sn}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$. O último capítulo é a conclusão desse trabalho de pesquisa, sendo resumido o estudo da origem das componentes oscilatórias, responsáveis pelas oscilações Shubnikov-de Haas investigadas no poço quântico e na heteroestrutura das medidas de magnetorresistência.

2 Revisão Bibliográfica

Nesta revisão bibliográfica será apresentada a teoria fundamental de isolantes topológicos e o processo de transporte elétrico nesses materiais, além da teoria do efeito das oscilações de Shubnikov-de Haas.

2.1 Isolantes Topológicos

A topologia é um ramo da matemática direcionada ao estudo de propriedades da estrutura geométrica, que são invariantes à ocorrência de deformações no espaço. A exemplo disso, as estruturas como esfera e elipsoide (Figura 2.1) não são topologicamente equivalentes, visto que esses dois objetos não possuem invariantes topológicos em comum, que seria a presença ou ausência do orifício em ambos. A Figura 2.1 ilustra essa propriedade e, como indicado, o toroide é equivalente a geometria de uma caneca, considerando a presença de uma cavidade na alça e; para a esfera a equivalência topológica com elipsoide é devido a inexistência de orifícios em ambas.

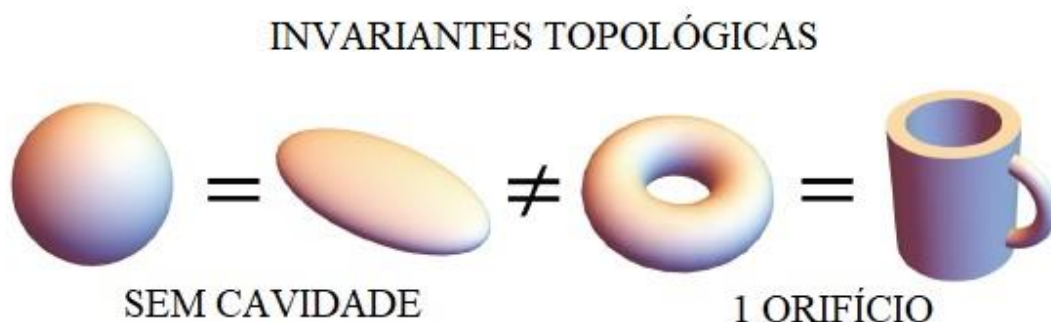


FIG. 2.1. Esquema ilustrativo para representar uma invariância topológica. A esfera e o elipsoide, assim como toroide e uma caneca são equivalentes topologicamente, pois possuem uma deformação no espaço semelhantes, no caso a ausência ou ocorrência da cavidade no sólido. Fonte (adaptada): Bisharat, *et al.* (2021)¹⁷.

Além disso, a topologia geométrica é utilizada dentro da física da matéria condensada para compreender a evolução das funções de onda dos elétrons com relação ao espaço do momento^{18,19}. Em isolantes topológicos, essas funções de onda estão comumente relacionadas com invariantes topológicos, que não mudam enquanto a estrutura permanece isolante. Essa propriedade de invariância dos isolantes topológicos é originada da preservação da SIT e a presença do acoplamento *spin*-órbita.

Os primeiros materiais a serem considerados ITs foram estruturas bidimensionais (2D), pois os estados metálicos nessas estruturas se assemelham ao estado HQ, onde o transporte também ocorre nas extremidades no material. Nesse efeito HQ, os elétrons são confinados nas interfaces de semicondutores pela presença de um campo magnético externo, ocasionando movimentos do elétron em órbitas circulares. Dessa maneira, os elétrons são localizados no interior como em um isolante comum e, nas fronteiras observa-se condução de elétrons percorrendo trajetórias semicirculares (Figura 2.2 (a)). A estrutura da banda, nesse caso, é similar ao isolante, no entanto na região do *gap* a linha diagonal azul da Figura 2.2 (a) ilustra o estado metálico nas bordas.

Em trabalho teórico, Kane e Mele (2005) previram estados de efeito HQS em ITs 2D. Esse efeito é similar ao HQ, porém os invariantes topológicos promovem, com ausência de campo magnético externo, dois canais de condução com sentidos opostos, sendo para transporte de corrente de *spin-up* e outra de *spin-down*. Em outro estudo teórico, Bernevig, Hughes e Zhang (2006)²⁰ também previram o estado HQS em poços quânticos de HgTe-CdTe.

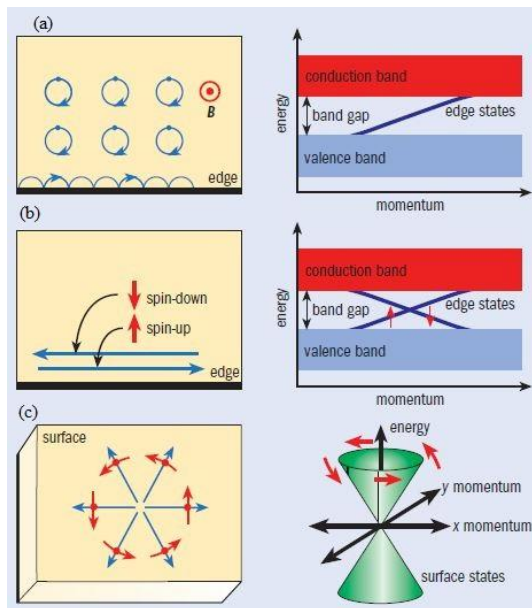


FIG. 2.2. À esquerda estão representados os efeitos presentes na superfície, enquanto à direita temos os respectivos esquemas de dispersão da energia com espaço do momento em 2D (a-b) e 3D (c). (a) As trajetórias semicirculares do elétron produzidas pelo efeito Hall quântico geram condução pelas fronteiras metálicas, como indica a respectiva estrutura de bandas em interface de semicondutores. (b) ITs 2D possuem condução *spin* polarizado nas fronteiras. (c) ITs 3D tem cones de Dirac, gerando a superfície metálica.

A liga semicondutora de $\text{Bi}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ foi o primeiro isolante topológico 3D previsto na teoria e confirmado pela espectroscopia de fotoemissão com ângulo resolvido (ARPES) por Hsieh *et.al* (2008)²¹. Nessa medida de ARPES, a presença de superfície com *spins* polarizados se confirmou pela observação de cones de Dirac no *bulk* nos pontos *L* onde ocorre a inversão de banda da liga, formando a superfície metálica com fase HQS (Figura 2.3). A Figura 2.2(c) identifica a polarização de *spin* helicoidal 2D, resultando em um único estado de *spin* (setas vermelhas) associado a um respectivo espaço do momento (setas azuis). A polarização em *spin* em *up* e *down* depende da posição do nível de Fermi acima ou abaixo do ponto do cone de Dirac²².

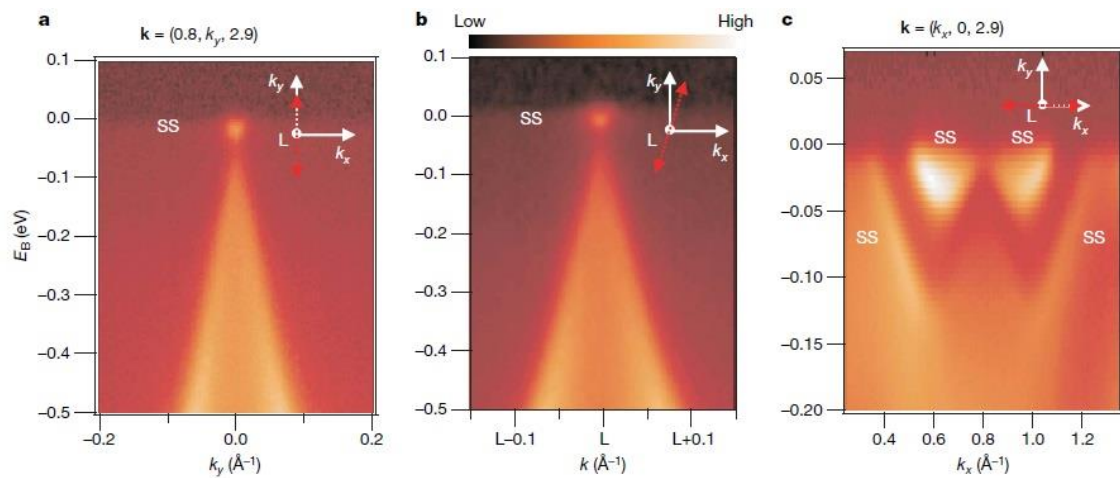


FIG. 2.3. Espectro ARPES ao longo de direções k_y (0 \AA^{-1}) (a), k_x ($0,8 \text{ \AA}^{-1}$) (c) e com direção rotacionada em 10° em relação a k_y (b) para $\text{Bi}_{(0,9)}\text{Sb}_{(0,1)}$ na terceira zona de Brillouin, em $L_z = 2,9 \text{ \AA}^{-1}$, com fóton de energia aplicado de 29 eV. Os estados de superfície (SS) são indicados em a-c. Fonte (adaptada): Hsieh, *et al.* (2008)²¹.

Em medidas de transporte elétrico esses estados polarizados na superfície de ITs 3D são difíceis de detectar, pois mesmo, na maioria dos isolantes topológicos, o bulk é altamente degenerado, dando grande contribuição para a condutividade elétrica, além da superfície, de forma que o transporte elétrico total é uma contribuição dos dois canais. Os primeiros trabalhos a realizar medições de transporte elétrico em ITs investigaram oscilações quânticas de onde é possível extrair informações sobre o transporte por estados de bulk e superfície^{23,24}.

A investigação desses estados de condução contribui para compreender outras simetrias de proteção topológica em ITs, como o isolante topológico cristalino (ITC). Diferentemente do caso de IT 3D, em que a proteção topológica é originada da SIT, para o caso do ITC os estados de superfície são protegidos pela simetria de reflexão da

estrutura cristalina²⁵. O SnTe foi o primeiro semiconductor identificado como um ITC, devido a sua estrutura de banda não-trivial, que permite os estados de superfície nas direções <001>, <110> e <111> do cristal²³.

Em trabalho recente de Okazaki *et al* (2018)²³ foi observado das oscilações Shubnikov-de Haas em medidas de magnetotransporte de um filme epitaxial de SnTe (111). Nesse trabalho, o filme submetido ao campo magnético de até 30 T permitiu investigar se haveria estados de condução pelo *bulk* ou pela superfície. De acordo com o estudo, o transporte elétrico do filme de SnTe se deve a estados de *bulk*, devido a um *splitting* do elipsoide de revolução longitudinal da superfície de Fermi originado da presença do efeito de acoplamento *spin*-órbita de Rashba. Dessa forma, nesse trabalho de dissertação as oscilações de Shubnikov-de Haas foram investigadas para verificar esses estados de condução em um material ITC baseado em SnTe.

2.2 Oscilações Shubnikov-de Haas e Efeito Hall Quântico

A investigação do transporte quântico pela observação de oscilações nas curvas de magnetorresistência (MR) permite o estudo de propriedades como mobilidade eletrônica de um gás de elétrons bidimensional, pelo efeito Hall quântico, assim como informação sobre a superfície de Fermi, com as oscilações de Shubnikov-de Haas. Essas oscilações da curva de MR são originadas da quantização da energia do movimento circular do elétron na presença de campo magnético perpendicular, resultando níveis de Landau e quantização da resistência Hall²⁶.

Como esquematizada na Figura 2.4, o movimento circular dos elétrons resulta em bandas de energia (Equação 2.1) correspondentes aos níveis de Landau. N ($N = 0,1,2,3$) indica o nível de Landau, k_z é vetor de onda na direção \hat{z} , ω_c é a frequência angular ciclôtrônica dada por eB_z/m_c , m_c é a massa efetiva do elétron dada pelo movimento circular, e é a carga do elétron e B_z é campo magnético.

$$\varepsilon_N = \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_c} \quad 2.1$$

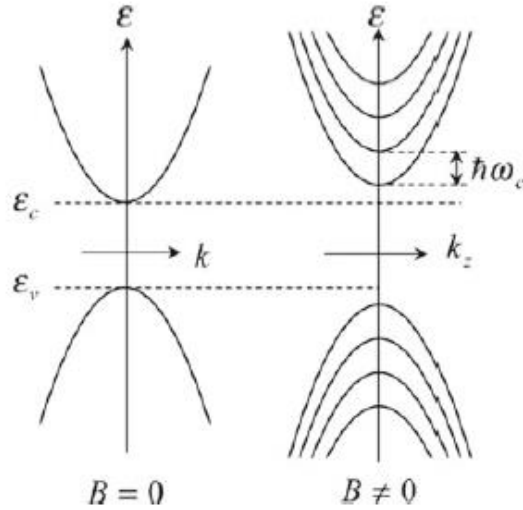


FIG.2.4. Representação esquemática das bandas de valência e condução nos casos sem (esquerda) e com a presença do campo magnético (direita). Os níveis de Landau são separados por $\hbar\omega_c$. Fonte: Hamaguchi (2017)²⁷

A densidade de portadores para quando há aplicação de campo magnético é indicado para cada nível de Landau (n_l) no sistema bidimensional como $1/2\pi l^2$, onde l é comprimento magnético de Landau ($l = \sqrt{\hbar/eB}$). Os níveis (N) ocupados por elétrons são representados pelo fator de preenchimento do nível de Landau (ν), que é retirado da razão entre as densidades de portadores para quando o campo é nulo ($n_{2D} = m_c/\pi\hbar^2$) e para n_l , obtendo-se $\nu = n_{2D}h/eB$.

A origem das oscilações SdH e a quantização da resistência Hall são compreendidas a partir desse fator ν . Para valores inteiros de ν a energia do nível de Fermi é posicionada entre os níveis de Landau e não há contribuição de elétrons para transporte longitudinal, resultando na quantização da resistência Hall (R_{xy}) indicada por *plateaus* (Figura 2.5). Nesse último caso, a condutividade quantizada do efeito Hall é dada pela Equação 2.2

$$\sigma_{xy} = \frac{\nu e^2}{h} \quad 2.2$$

Para o caso em que ν é indicado por valor inteiro, têm-se o nível de Fermi posicionado entre os picos da distribuição de densidade de estados do nível de Landau e, dessa forma, geram os *plateaus* do efeito HQ. Para valores não inteiros de ν , o nível da energia de Fermi se posiciona dentro da densidade de distribuição dos níveis de Landau,

gerando oscilações SdH, com apresentado para o sistema de poço quântico de InAs/AlGaSb da Figura 2.5. Essas oscilações são periódicas com o inverso do campo magnético (Equação 2.3) e, com isso, pode se retirar informação da energia de Fermi para o limite de temperatura $T = 0 K$.

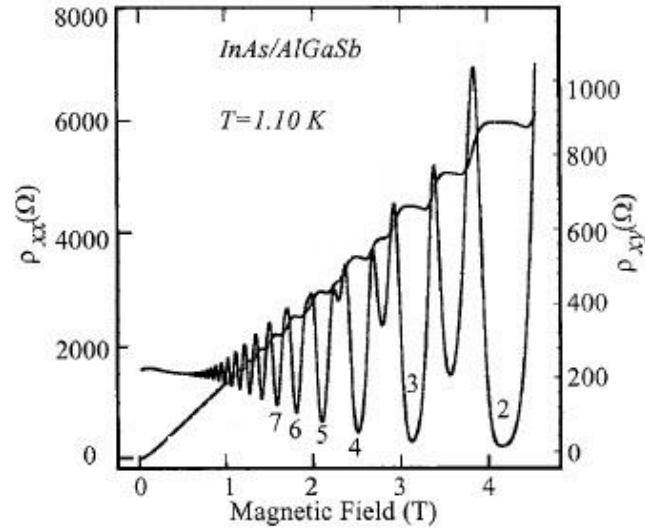


FIG.2.5. Representação das resistividades longitudinal (ρ_{xx}) e transversal (ρ_{xy}) para os respectivos efeitos de Shubnikov-de Haas e Hall quântico para poço quântico de InAs/AlGaSb. Fonte: Manasreh (2005)²⁶

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{e\hbar}{m_c \varepsilon_F} \quad , \quad \varepsilon_F = (3n_{2D}\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_c} \quad 2.3$$

A densidade de portadores nesse caso n_{2D} é calculado a partir da análise de FFT (*Fast Fourier Transform*), que indica as componentes oscilatórias, ou seja, frequência (f) de oscilação dos elétrons, como indicado por $n_{2D} = k_F^2/4\pi = 2 f e/(4\pi \hbar)$.

À medida em que há aumento da intensidade do campo magnético aplicado, as oscilações SdH (Figura 2.5) devem ocorrer quando estados não-localizados, centros dos níveis de Landau, são movidos para cima do nível de Fermi. Os elétrons contribuintes para transporte correspondem a esses estados não-localizados, com as energias indicadas nos centros das funções gaussianas dos níveis de Landau. Com isso, a ampliação da função δ em uma distribuição gaussiana de densidade de estados, devido a inserção de impurezas, como esquematizado na Figura 2.6 na área hachurada em preto, permite maior condução de elétrons. Essa densidade de estados em sistema 2D é indicada pela Equação 2.4²⁸, em que Γ corresponde a energia de ampliação do nível de Landau.

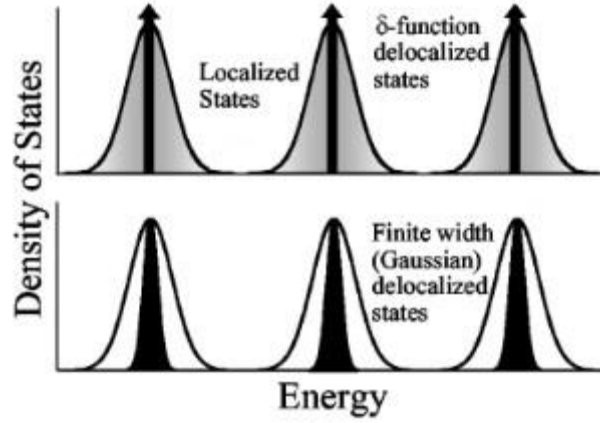


FIG.2.6. Representação da densidade de estados dos níveis de Landau em função da energia. A área cinza do primeiro quadro corresponde a estados localizados, que não contribuem para transporte e a função δ são estados localizados, com inserção de impurezas essa distribuição passa a ser dada pela função gaussiana, indicada pela área em preto. Fonte: Knobel e Samarth (2002)²⁹

$$DOS(\varepsilon, B) = \frac{2eB}{h} \frac{1}{\Gamma\sqrt{2\pi}} \sum_{N=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(\varepsilon-\varepsilon_N)^2}{2\Gamma^2}\right) \quad 2.4$$

O comportamento oscilatório da condutividade SdH pode ser obtida da Equação 2.5,²⁶ onde τ_l corresponde ao tempo de espalhamento da defasagem dos níveis de Landau. O mesmo ajuste para curva SdH também é obtida pela equação de Lifshitz-Kosevich (LK) como utilizado na seção 4.1.2 pela Equação 2.6

$$\sigma_{xx} \propto \cosh\frac{2\pi^2 k_B T}{\hbar\omega_c} \cos\frac{2\pi^2 \varepsilon_F}{\hbar\omega_c} \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_c \tau_l}\right) \quad 2.5$$

A aplicação do ajuste das oscilações SdH pela função de LK (Equação 2.6) permite a análise de transporte elétrico por estados de superfície em filmes epitaxiais de isolante topológico por meio do cálculo do parâmetro de fase $\varphi = \beta - \delta$. Esse parâmetro deve prover valores β equivalentes a 0 ou 1 para transporte por férmions triviais (transporte pelo *bulk*) ou 1/2 para férmions de Dirac (transporte na superfície). A componente δ relativa a dimensão da superfície de Fermi deve ser nula para estruturas 2D e $\pm 1/8$ para 3D³⁰⁻³².

$$\frac{\Delta R_{xx}}{R_0} = \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2\varepsilon_F}} \frac{\lambda}{\sinh \lambda} e^{-\lambda_D} \cos\left[2\pi\left(\frac{\varepsilon_F}{\hbar\omega_c} + \frac{1}{2} + \varphi\right)\right] \quad 2.6$$

Também é possível calcular outros parâmetros com esse ajuste, como a temperatura de Dingle (T_D) e a mobilidade eletrônica. $\Delta R_{xx}/R_0$ é a componente oscilatória normalizada, em que R_0 é a resistência para campo magnético nulo e ΔR_{xx} corresponde à resistência longitudinal após a subtração de componentes de fundo da medida. Essa subtração é feita retirando a curva polinomial da resistência R_{xx} . A frequência ciclotrônica ω_c é dada por eB/m^{cyc} e a energia de Fermi por $\varepsilon_F = (\hbar k_F)^2/2m^{cyc}$, onde m^{cyc} é massa ciclotrônica efetiva do elétron. Enquanto $\lambda = 2\pi^2 k_B T / \hbar \omega_c$ e $\lambda_D = 2\pi^2 k_B T_D / \hbar \omega_c$. Os valores das frequências de oscilação SdH são expressas pelo vetor de onda de Fermi k_F .

As massas ciclotrônicas efetivas dos elétrons que contribuem para o transporte são estimadas pela Equação 2.7, do termo termodinâmico da expressão de Lifshitz-Kosevich (LK),^{31,33} em que \bar{B} é o campo magnético efetivo, correspondente ao inverso da média do intervalo de $1/B$.

$$A_{\text{FFT}} = A_0 \left(\frac{2\pi^2 k_B m^{cyc} T}{e\hbar \bar{B}} \right) / \sinh \left(\frac{2\pi^2 k_B m^{cyc} T}{e\hbar \bar{B}} \right) \quad 2.7$$

2.2.1 Relação de Onsager e as frequências das oscilações Shubnikov-de Haas

No estudo da origem das componentes oscilatórias das oscilações Shubnikov-de Haas desse trabalho é utilizada a relação de Onsager (Equação 2.8), que relaciona a área de secção transversal da superfície de Fermi, do semiconductor IV-VI, perpendicular ao campo magnético aplicado com a frequência de oscilação (f) (Figura 2.7). A Figura 2.7 é esquema dos vales oblíquos e longitudinal por onde ocorre o transporte de elétrons, também conhecido por transporte de multivales.

A partir dessa relação verifica-se se há contribuição de transporte pelos elipsoides da superfície de Fermi longitudinal ($[111]$) e oblíquo ($[\bar{1}11]$) como esquematizados na Figura 2.7

$$S_F = (2\pi e / \hbar) f \quad 2.8$$

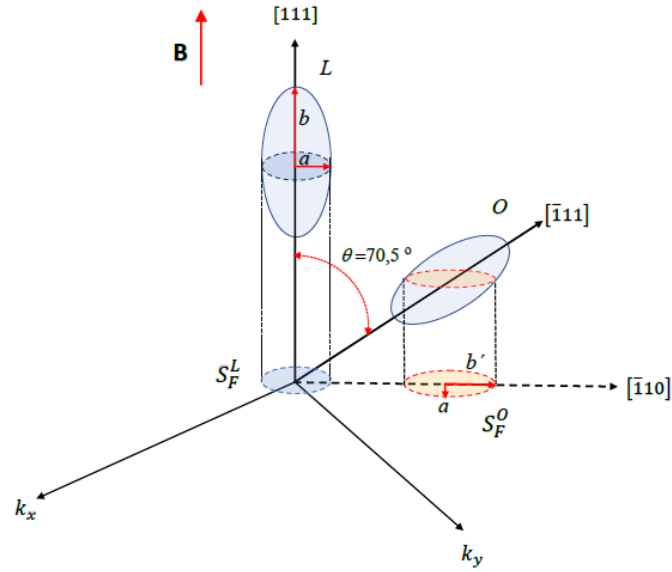


FIG.2.7. Esquema representativo dos elipsoides longitudinal (L), na direção paralela a aplicação do campo magnético (seta vermelha) em $[111]$, e oblíquo (O) inclinado $70,5^\circ$ com relação a L na direção $[\bar{1}11]$. Os elipsoides possuem semieixos a e b (linha sólida vermelha) e as áreas hachuradas no plano $k_x k_y$, correspondem as áreas de secção transversal de L e O , sendo S_F^L área circular e S_F^O elíptica com semieixo maior b' .

Por meio de considerações geométricas dos elipsoides L e O , longitudinal e oblíquo é possível estimar o valor teórico da razão entre as frequências desses vales, utilizando a igualdade entre as razões $f_O/f_L = S_F^O/S_F^L$, em que S_F^O e S_F^L são as áreas das secções transversais dos elipsoides da superfície de Fermi projetadas no plano $k_x k_y$ (ver áreas projetadas em azul e vermelho na Figura 2.7).

Com o campo magnético aplicado na direção $[111]$, essas áreas são correspondentes às do círculo e da elipse, $S_F^L = \pi a^2$ e $S_F^O = \pi a b'$. Dessa forma, $f_O/f_L = b'/a$. Os valores dos semieixos da elipse a e b' são obtidos a partir da relação da anisotropia das massas transversal (m_\perp) e longitudinal (m_\parallel) dos vales $K = m_\parallel/m_\perp = (b/a)^2$,

O b' é estimado pela relação triangular,

$$b' = \sqrt{x^2 + y^2} \quad 2.9$$

Em que x e y são retirados da equação da elipse e dados por:

$$x^2 = a^2 b^2 / (b^2 + a^2 \tan^2 \theta) \quad 2.10$$

$$y^2 = x^2 \tan^2 \theta$$

Substituindo x em y da Equação 2.10 e aplicando essas coordenadas na expressão para b'/a , temos:

$$\frac{S_F^O}{S_F^L} = \sqrt{\frac{K(1 + \tan^2 \theta)}{K + \tan^2 \theta}} \quad 2.11$$

2.3 Acoplamento spin-órbita e Efeito Rashba

O movimento orbital em um sistema atômico, considerando no referencial de repouso do elétron, constitui relevante efeito relativístico de interação da propriedade de *spin* do elétron com campo magnético, o acoplamento *spin-órbita* (SO). Nessa condição, o elétron move através de um campo elétrico, responsável pela geração do campo magnético efetivo e, dessa forma, orienta o momento magnético do elétron. Esse alinhamento do momento magnético com campo magnético efetivo modifica os níveis de energia do elétron.

Os autovalores da energia devido ao acoplamento SO (\hat{H}_{SO}) é indicado pela Equação 2.12, em que $\boldsymbol{\mu}$ corresponde ao vetor de momento magnético do elétron e \mathbf{B}_{eff} ao campo magnético efetivo (determinado pelo campo elétrico, \mathbf{E} , vetor de momento \mathbf{p} do elétron, massa do elétron m e velocidade da luz indicada por c).

$$\hat{H}_{SO} = \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_{eff}, \quad 2.12$$

$$\mathbf{B}_{eff} = \mathbf{E} \times \mathbf{p} / mc^2$$

Considerando esse efeito em materiais semicondutores, o campo elétrico experimentado pelo elétron é devido ao gradiente do potencial cristalino (Equação 2.13) e o momento angular de *spin* em função do operador de matriz de Pauli ($\boldsymbol{\sigma}$) ($\mathbf{S} = \boldsymbol{\sigma} \hbar/2$). Dessa forma, a energia do acoplamento SO é definido pela Equação 2.13, em que μ_B é magnéton de Bohr ($e \hbar/2 m$).

$$\hat{H}_{SO} = \mu_B (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} / mc^2, \quad 2.13$$

$$\mathbf{E} = -\nabla U_{\text{cristal}}$$

Sendo a energia \hat{H}_{SO} para o sólido indicada por $\hat{H}_{SO} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_{\text{eff}}$ ³⁴, o acoplamento SO preserva a SIT, quando o campo magnético é definido como função ímpar, $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_{\text{eff}}(\mathbf{p}) = -\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_{\text{eff}}(-\mathbf{p})$, como demonstrado por Manchon *et al* (2015)³⁵. Esse acoplamento SO gera a separação dos níveis de energia degenerados (*spin-splitting*) do átomo. Nos semicondutores, isso é verificado pela separação dos níveis de energia das bandas do cristal. Dessa forma, o efeito de acoplamento SO e a presença de defeitos ou impurezas da rede cristalina podem modificar a estrutura de bandas do cristal e gerar estados de separação de *spin*.

Tais interações da rede cristalina com acoplamento SO são explicados pelo efeito Rashba. Para isso, as estruturas devem possuir inversão de simetria quebrada (ISQ), ou seja, sistema cristalino com presença de dipolos elétricos responsável por criar um gradiente do potencial cristalino. O acoplamento do momento do cristal à ISQ produz efeito de acoplamento SO, como apresentado na Equação 2.14. \hbar é a constante de Planck e α_R o parâmetro Rashba, que indica a força do acoplamento SO ao modificar a estrutura das bandas.³⁶

$$\hat{H}_R = -\alpha_R/\hbar (\mathbf{p} \times \boldsymbol{\sigma}) \hat{z} \quad 2.14$$

Considerando a energia do acoplamento SO de Rashba com a energia do sistema obtêm-se a Equação 2.15 da energia de dispersão das bandas, em função do vetor de onda do espaço recíproco. A energia de Rashba é obtida por $E_R = \hbar^2 \Delta k^2 / 2 m_e$ e $\Delta k = \alpha_R m_e / \hbar^2$.

$$E(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2 m_e \pm \alpha_R |\mathbf{k}| \quad 2.15$$

O cálculo da magnitude do acoplamento SO nas estruturas é relevante para a investigação das propriedades de transporte elétrico de poços quânticos e heteroestruturas. Principalmente nos semicondutores IV-VI, pois a estrutura cristalina cúbica desses materiais os torna aplicáveis ao efeito de acoplamento SO de Rashba. Isso permite a presença da simetria de inversão do *bulk* que pode sofrer a quebra nas superfícies e interfaces^{37,38}.

2.4 Fator g de Landé

O fator g de Landé está associado a propriedade de momento angular (\mathbf{J}) e magnético do elétron ($\boldsymbol{\mu}$) ($\boldsymbol{\mu} = \mu_B g \mathbf{J}/\hbar$). Esse fator g contribui para *spin-splitting* dos níveis de Landau como indicado na Equação 2.16, onde $g \mu_B B$ corresponde a energia devido efeito Zeeman. De forma similar ao que foi apresentado na seção anterior, onde o campo magnético efetivo é devido a interação relativística do movimento oscilatório do elétron no átomo, a aplicação de um campo externo no sistema gera a separação dos níveis de energia (efeito Zeeman).

$$\varepsilon_{N\pm} = \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c \pm \frac{1}{2} g \mu_B B \quad 2.16$$

Considerando que as soluções da Equação 2.16 devam ser iguais a energia de Fermi (ε_F) para valores respectivos das oscilações Shubnikov-de Haas em $(1/B)_{n+}$, para valores de N iguais a $n +$, $n -$ e $(n - 1) +$, têm-se a Equação 2.17

$$\frac{1}{B_{n+}} = \frac{1}{\varepsilon_F} \left[\frac{\hbar e}{m^{cyc}} \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2} g \mu_B \right]$$

$$\frac{1}{B_{n-}} = \frac{1}{\varepsilon_F} \left[\frac{\hbar e}{m^{cyc}} \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2} g \mu_B \right] \quad 2.17$$

$$\frac{1}{B_{(n-1)+}} = \frac{1}{\varepsilon_F} \left[\frac{\hbar e}{m^{cyc}} \left(n - \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2} g \mu_B \right]$$

Fazendo as devidas subtrações entre as Equações 2.17, obtêm-se Equação 2.18

$$\frac{1}{B_{n+}} - \frac{1}{B_{n-}} = \frac{1}{\varepsilon_F} g \mu_B \quad 2.18$$

$$\frac{1}{B_{n+}} - \frac{1}{B_{(n-1)+}} = \frac{1}{\varepsilon_F} \frac{\hbar e}{m^{cyc}}$$

Logo, o fator g de Landé pode ser obtido das curvas de SdH pela Equação 2.19

$$g(\varepsilon_F) = \frac{2}{m^{cyc}} \cdot \frac{\left(\frac{1}{B}\right)_{n+} - \left(\frac{1}{B}\right)_{n-}}{\left(\frac{1}{B}\right)_{n+} - \left(\frac{1}{B}\right)_{(n-1)+}} \quad 2.19$$

Na Figura 2.8 está esquematizada as oscilações SdH como inverso do campo magnético aplicado para uma amostra de PbTe. Como indicado na figura, os valores do g de Landé são obtidos experimentalmente, a partir da posição dos picos onde ocorrem o *spin-splitting* na curva das oscilações da resistência longitudinal e, também conhecendo o valor da massa efetiva do material.

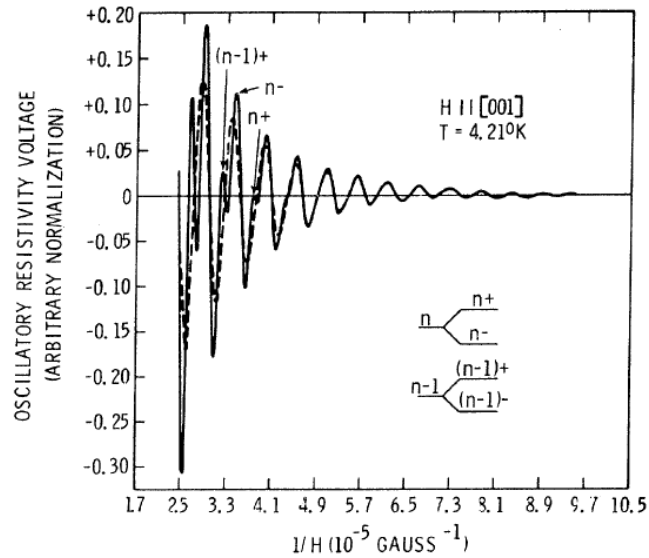


FIG.2.8. Componente oscilatória da resistividade normalizada em função do inverso do campo magnético aplicado ($1/H$) para PbTe tipo- p . Os picos duplos indicam a presença de *spin-splitting*, como indicado por $n+$, $n-$ e $(n-1)+$. Fonte (adaptada): Burke, Houston e Savage (1970).³⁹

2.5 O isolante topológico cristalino SnTe

Como indicado na seção 2.1 os isolantes topológicos são um semicondutor com *bulk* isolante e presença de estados de superfície. Essa superfície metálica é devido ao número ímpar de cones de Dirac formados por acoplamento *spin-órbita* e invariantes topológicas, responsáveis pela inversão de bandas. Esses estados são protegidos por simetria de reversão temporal, no entanto para isolantes topológicos cristalinos a proteção desses estados passa a ser devido a uma simetria de reflexão, indicada pela cristalinidade da rede, contribuindo para ocorrência de número par de cones de Dirac na superfície da zona de Brillouin.

O telureto de estanho foi identificado por Hsieh *et al* (2012) como isolante topológico cristalino, possuindo quatro cones de Dirac nas superfícies $\{111\}$, $\{110\}$ e $\{001\}$ da zona de Brillouin e simétricos à família do plano de reflexão $\{110\}$ ⁷, como

indicado na Figura 2.9. A posição da inversão de bandas está esquematizada na Figura 2.9 pelos pontos L , centrado nas faces hexagonais. Embora essa estrutura cristalina se assemelha à de outros semicondutores IV-VI, como o PbTe e PbSe, esses compostos possuem uma topologia trivial, isolante, e não têm inversão de bandas.

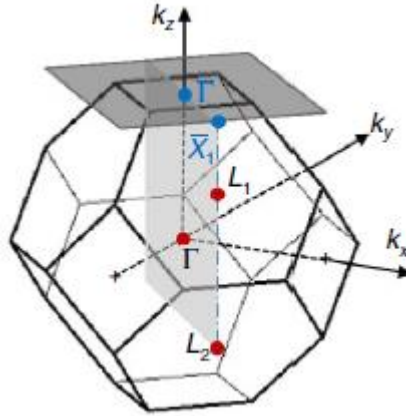


FIG.2.9. Zona de Brillouin do SnTe com plano de reflexão indicado pelo plano $\Gamma L_1 L_2$ e projetado em $\bar{\Gamma} \bar{X}_1$. Fonte: Hsieh *et al* (2012).

O crescimento de estruturas como filmes de $\text{Pb}_{(1-x)}\text{Sn}_x\text{Te}^{40}$, $\text{Pb}_{(1-x)}\text{Sn}_x\text{Se}^{41}$ e super redes de $\text{PbTe}/\text{SnTe}^{16}$ em trabalhos publicados indicaram a ocorrência de uma fase topológica nesses materiais, a partir da inserção do Sn. Embora, o SnTe tenha sido o primeiro isolante topológico cristalino definido teoricamente, a ocorrência de distorções romboédricas no cristal e sua forte estrutura de bandas do tipo- p impedem a verificação de os estados de superfície, enquanto cristais com Pb possuem uma estrutura cristalina sem distorções e com *gap* menor aplicável para crescimento de isolantes topológicos cristalinos com nível de Fermi acima da banda de valência⁴⁰.

Ainda que em cristais de SnTe seja difícil observar os estados topológicos de superfície, os estudos de estruturas semicondutoras baseadas em SnTe são importantes para o transporte eletrônico de dispositivos óptico e termo eletrônicos. Nesse trabalho, a heteroestrutura do $\text{SnTe}/\text{Sn}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ é investigada a fim de identificar esses estados de superfície próprios da fase ITC, por meio das oscilações de Shubnikov-de Haas (seção 2.2)

2.5.1 Oscilações Shubnikov-de Haas e efeito Rashba em filmes de SnTe

A investigação das oscilações Shubnikov-de Haas viabiliza calcular a magnitude do efeito Rashba no sistema e, dessa forma identificar parâmetros das propriedades presentes no transporte elétrico. As possibilidades de aplicação em dispositivos

eletrônicos dos ITCs abriram espaço para estudo dessas propriedades em estruturas baseadas em SnTe.

Em trabalhos de Okazaki *et al* (2018)²³ e Safdar *et al* (2013)⁴² utilizaram as oscilações SdH como meio de identificar o transporte pelos estados de superfície em um filme epitaxial e nanofio de SnTe, respectivamente. No estudo do filme a análise do ajuste Lifshitz-Kosevich (LK) (seção 2.2, Equação 2.6) das curvas de SdH indicaram o transporte elétrico pela contribuição do *bulk*, por Férmions triviais; enquanto para o nanofio se apresentaram estados de superfície em uma dimensão no nanofio de SnTe, devido a diminuição do *bulk* do material. Ainda nesse último, se observou a presença de anti-localização fraca devido forte desordem do sistema.

As oscilações SdH no trabalho Okazaki *et al* (2018)²³, também indicaram a origem das componentes oscilatórias como sendo do *splitting* do vale longitudinal do *bulk*, devido a ocorrência do efeito Rashba no SnTe. A presença desse efeito é discutida por duas possibilidades em Okazaki *et al* (2018), sendo uma a distorção romboédrica (apresentada na seção 2.4) ou ocasionada por inomogeneidades do *bulk*, como defeitos na rede por quebra de simetrias e presença de desordens.

O efeito Rashba em filmes epitaxiais de SnTe também justifica existência da anti-localização fraca (ALF) em Assaf *et al* (2014)⁴³ e indica a presença de estados de superfície, visto que a ALF é efeito bidimensional. Nesse mesmo trabalho, é apresentado que o *bulk* contribui para ALF por meio do acoplamento das superfícies de cima e abaixo para geração de caminhos com momentos de *spin* fechados (estados de superfície). A existência de ALF também foi verificado em trabalho de Lopes *et al* (2021)⁴⁴ de medida de fotocondutividade de poço quântico de SnTe com barreiras de PbEuTe.

2.6 Heteroestrutura de SnTe/SnEuTe

As primeiras investigações das propriedades dos semicondutores baseados em SnTe tiveram por objetivo a aplicação em dispositivos de sensores infravermelhos e, com isso, que direcionou a análise das características estruturais e eletrônicas. Ueta *et al* (2004)⁴⁵ observou em medidas de difração de raios-X a degradação de filmes epitaxiais de Sn_(1-x)Eu_xTe para $x > 0.03$. Em outro trabalho sobre as propriedades elétricas de filmes de Sn_(1-x)Eu_xTe, Ishida *et al* (2010)³² calculou a variação dos *gaps* de energias em

função da concentração de Eu (Figura 2.10) e observou inversão de bandas para concentração de 0.02. Para o cálculo desses *gaps* se utilizou a Equação 2.20.

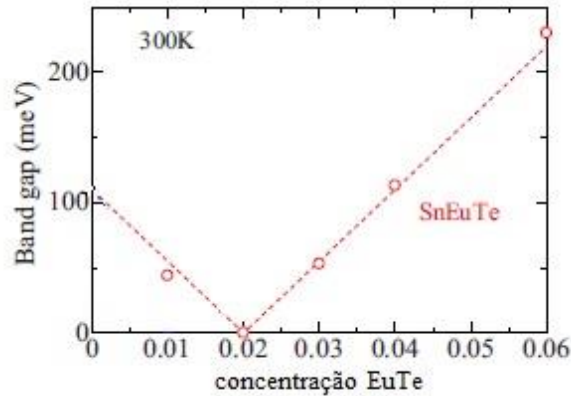


FIG.2.10. Valores do *gap* de energia para filme de $\text{Sn}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ para diferentes concentrações de x à temperatura de 300 K. Fonte (adaptada): Ishida *et al* (2010)³².

$$E_g(x) = |-110 + 5500 x_{Eu}| \text{ (meV)} \quad 2.20$$

Em outro trabalho de Abramof, Rappl e Ueta (2004)⁴⁶ super redes de $\text{SnTe}/\text{Sn}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ são analisadas por difração de raios-X. Essa caracterização estrutural é feita para diferentes concentrações de Eu até x igual a 0.28. Pelo espectro de raio-X da reflexão de Bragg (222) o crescimento de camadas uniformes é reportado para valores de Eu até 0,16, enquanto para valores $x > 0.24$ não há formação das camadas da super rede.

2.7 Propriedades físicas do PbTe

O PbTe é semicondutor do grupo IV-VI com *gap* estreito e com forte efeito de acoplamento spin-órbita. Essas propriedades de estruturas baseadas em PbTe são aplicáveis ao desenvolvimento de dispositivos como sensores e detectores de infravermelho⁴⁷, computação quântica⁴⁸, spintrônica⁴⁹ além de aplicações termoelétricas para fabricação de dispositivos com geração de energia mais eficientes⁵⁰

Os teluretos de chumbo possuem estrutura atômica cúbica de face centrada (cfc), com átomos de Pb e Te intercalados nos planos da rede cristalizada, como na forma da NaCl sólido ⁵¹. Na Figura 2.11 está representada essa estrutura para cristal de PbTe, os átomos de Pb são representados pelos círculos preenchidos em amarelo. Devido a esta estrutura cristalina, o semicondutor a base de PbTe possui estrutura de bandas complexa e não-parabólica (Figura 2.12).

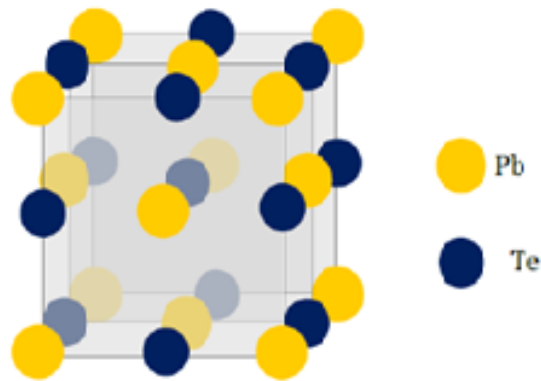


FIG.2.11 Esquema ilustrativo de estrutura cristalina PbTe (cfc) com família de planos {200}. Fonte (adaptada): Bauer *et al* (2013)

Na Figura 2.12 está esquematizada a estrutura de bandas não-parabólica do PbTe na direção $\overline{K\Gamma}$ da zona de Brillouin do espaço recíproco dos vetores de onda. Os pontos em vermelho são representação da ocupação de elétrons de telúrio, enquanto os orbitais de chumbo estão desocupados. Além disso, apresenta a posição central do ponto L na estrutura de bandas. Nesse ponto L , na direção $[111]$ do plano cristalino, estão presentes quatro superfícies elípticas de revolução da superfície de Fermi, que contribuem para o transporte elétrico correspondendo ao multivale transporte por três vales oblíquos e um longitudinal.

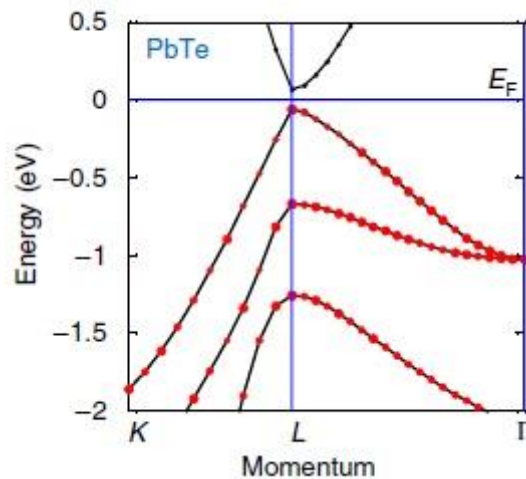


FIG.2.12. Estrutura de bandas do PbTe em $\overline{K\Gamma}$. Fonte (adaptada): Hsieh *et al* (2012)⁷

O vale longitudinal corresponde ao elipsoide de revolução na direção $[111]$ e, inclinados a este com ângulo de $70,53^\circ$, estão os outros três vales oblíquos nas direções

$[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$ e $[11\bar{1}]$ (Figura 2.13). Essa configuração da estrutura de banda proporciona a alta anisotropia das massas longitudinal (m_{\parallel}) e transversal (m_{\perp}) do PbTe dada pela relação de $K = m_{\parallel}/m_{\perp} \sim 10.1$,² assim como as energias de gap estreito e direto de 200 meV, em 4 K, e 300 meV na temperatura ambiente⁵².

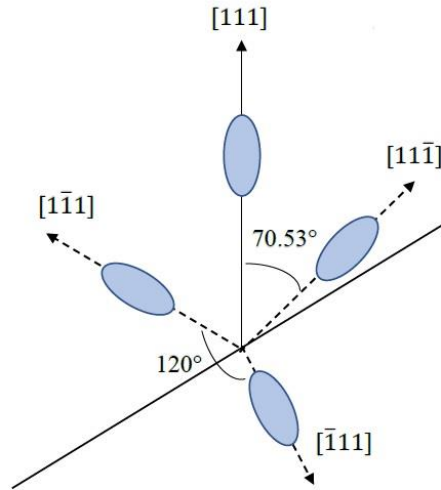


FIG.2.13. elipsóides de revolução da superfície de Fermi do PbTe e SnTe orientados nas direções de $[111]$, $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$ e $[11\bar{1}]$. Sendo estes três últimos, os elipsóides correspondentes ao vale oblíquo distanciados entre si por um ângulo de 120° e, destes entre $[111]$ com um ângulo de $70,53^\circ$.

A interação do acoplamento *spin-órbita* com essa anisotropia das massas nesse semiconductor fornece altos valores efetivos do fator- g de Landé para componentes longitudinal e transversal ($g_{\parallel} \sim 57$ e $g_{\perp} \sim 25$)³⁹. O fator g contribui para determinar os níveis de energia do espalhamento de *spin* na presença de campo magnético externo. Como esquematizado na Figura 2.14, os estados de *splitting* de *spin-up* e *spin-down* dos níveis de Landau ($n+$, $n-$ e $(n-1)+$) podem ser dados pela contribuição da energia Zeeman (ϵ_z) dada por $g\mu_B B$ e comparados com a energia de separação dos níveis de Landau $\hbar\omega_c$.

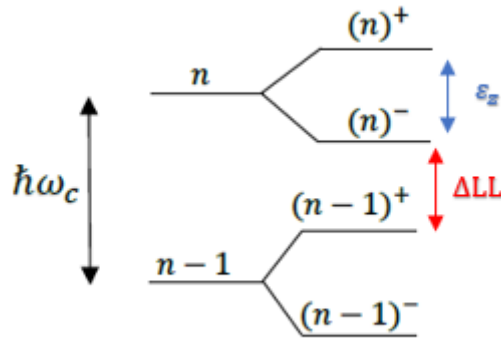


FIG.2.14. Separação dos níveis de Landau n e $n - 1$ em *spin up* e *spin down*.

O fator g de Landé é um parâmetro importante para spintrônica e auxiliam a compreender a estrutura eletrônica do semiconductor na presença de campo magnético⁵³. Outras propriedades dessa estrutura de bandas ampliam a discussão para estudo de filmes de PbTe com dopantes. A inserção de elementos na rede cristalina do PbTe, por exemplo, permite controlar a densidade de portadores de carga para análise de outros efeitos de confinamento, como efeito Hall quântico em poços de PbTe/Pb_(1-x)Eu_xTe², assim como a magnetorresistência linear em filmes do tipo-*p* de PbTe dopado com BaF₂^{11,54}.

A alta cristalinidade desses filmes de PbTe crescidos no MBE (Molecular Beam Epitaxy), evita distorções que possam intervir no estudo da estrutura de bandas. E dessa forma, possibilita outras análises de defeitos gerados por elementos inseridos na rede cristalina durante o crescimento. Esses estudos permitem investigar efeitos magneto transporte, como Hall e oscilações Shubnikov-de Haas.

2.8 Poços quânticos de PbTe

O maior *gap* de energia nos filmes epitaxiais de Pb_(1-x)Eu_xTe comparada ao PbTe permite o transporte exclusivamente pelo poço, devido a característica metálica do PbTe. Alguns trabalhos, ainda, propõe desenvolvimento de heteroestruturas com múltiplos poços quânticos PbTe/Pb_(1-x)Eu_xTe^{13,55,56}. No entanto, a tensão entre Pb_(1-x)Eu_xTe e PbTe, também, contribuem para o confinamento do transporte pelo poço. Esse efeito de tensão promove a descontinuidade entre as bandas de valência e condução nos pontos L da zona de Brillouin¹². Esses deslocamentos das bandas são determinados pelo parâmetro de *band-offset*, correspondente a razão entre energia da banda (valência/condução) e a energia do *gap*.

Parâmetros da estrutura desses poços quânticos, como *band-offset*, são relevantes para compreensão dos efeitos de simetria e acoplamento spin-órbita nesses materiais. Em estudo teórico, Hasegawa e Silva (2003)⁵⁷ indicaram que o pequeno espalhamento Rashba em poços quânticos assimétricos, como $\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}/\text{PbTe}/\text{Pb}_{(1-y)}\text{Eu}_y\text{Te}$, é linearmente proporcional a diferença dos *band-offset* das duas interfaces. Ainda, de acordo com os autores, a possibilidade de maior espalhamento pelo efeito Rashba em poços de PbTe se deve pelo forte acoplamento *spin*-órbita nos semicondutores *IV-VI*, além do fato do espalhamento de *spin* estar relacionado com a diminuição da largura do poço.

A condução de elétrons apenas pelo poço de PbTe em estruturas de $\text{PbTe}/\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ podem ser verificadas por medidas de efeito Hall. Nas Figuras 2.15 (a-b) estão representadas as mobilidades Hall em 77 K e 7 K para a heteroestrutura de múltiplos poços quânticos de $\text{PbTe}/\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$, comparado com camada do filme epitaxial de $\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$. Como identificado nos gráficos, para o filme de $\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ a mobilidade decresce linearmente com aumento da concentração de Eu^{+2} , enquanto para os poços de $\text{PbTe}/\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ há o aumento¹³. Com a concentração de $x_{\text{Eu}} \sim 0,06$ a mobilidade no poço quântico obtém valor de $30 \times 10^4 \text{ cm}^2 (\text{V s})^{-1}$ em 7 K e, $20 \times 10^4 \text{ cm}^2 (\text{V s})^{-1}$ em 77 K. Esse comportamento dos poços de $\text{PbTe}/\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ viabiliza o transporte pelo gás bidimensional de elétrons somente pelo poço, além da observação e análise de oscilações de Shubnikov-de Haas, devido a maior mobilidade eletrônica.

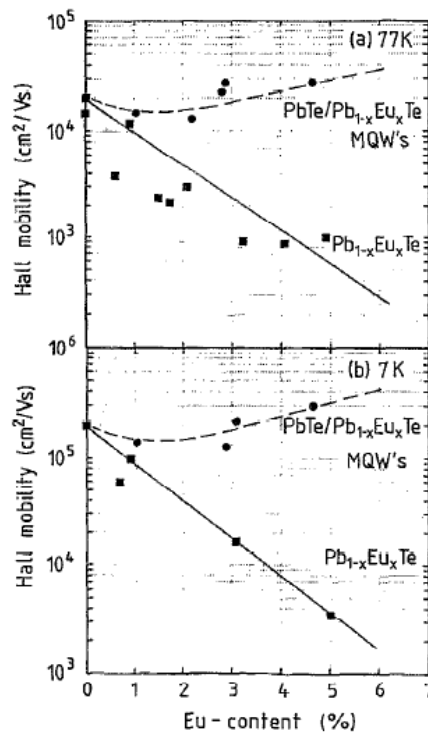


FIG.2.15. Mobilidade Hall para múltiplos poços quânticos de PbTe/Pb_(1-x)Eu_xTe (círculos) e filme epitaxial de Pb_(1-x)Eu_xTe (quadrados) em função da concentração de íons de Eu⁺² em 77 K (a) e em 7 K (b). Fonte: Springholz *et.al* (1993)¹³.

As investigações das oscilações de Shubnikov-de Haas são relevantes para o estudo das propriedades de magnetotransporte, como para verificar o transporte eletrônico pelos vales longitudinal e oblíquo, além identificar os parâmetros de massas ciclônicas efetivas. Neste trabalho será apresentado no Capítulo 4 esse estudo realizado para poço quântico de PbTe dopado com BaF₂ e barreiras de Pb_(1-x)Eu_xTe. O BaF₂ possui estrutura cristalina cúbica que permite sua incorporação em filmes epitaxiais de semicondutores com cristalinidade semelhantes, evitando maiores distorções na rede⁵⁸.

A dopagem de poços quânticos de PbTe com BaF₂ têm sido direcionadas para investigação das propriedades elétricas, efeitos de fotocondutividade persistente e de magneto transporte. Nesses trabalhos a maior concentração de BaF₂ no poço quântico diminuiu a mobilidade eletrônica, devido ao aumento do espalhamento de portadores de carga em poços quânticos do tipo-*p* de PbTe:BaF₂^{11,59}. Ainda, a presença de magnetorresistência linear em campos magnéticos até 15 T apresentou dependência com baixa concentração de BaF₂ em poços do tipo-*p* de PbTe, $x \sim 0,02\%$, enquanto para valores mais altos de dopagem esse efeito é atenuado⁵⁴.

2.8.1 Efeito Hall Quântico e Shubnikov-de Haas em poços quânticos de PbTe

Em estruturas de poços quânticos são observadas em medidas de magnetorresistência os efeitos Hall quântico e as oscilações SdH em baixas temperaturas. Em primeiro trabalho de Springholz *et al* (1993)¹³ o aumento da concentração de íons de Eu nas barreiras de Pb_(1-x)Eu_xTe em múltiplos poços quânticos tipo-*n* de PbTe permitiu a observação do efeito Hall quântico inteiro em baixos campos (1 - 4) T e à 1,6 K, pois diminuiu a contribuição do transporte elétrico pelas barreiras e intensificou o confinamento de elétrons pelo poço. A Figura 2.16 apresenta os *plateaus* do efeito Hall quântico para os múltiplos poços de PbTe.

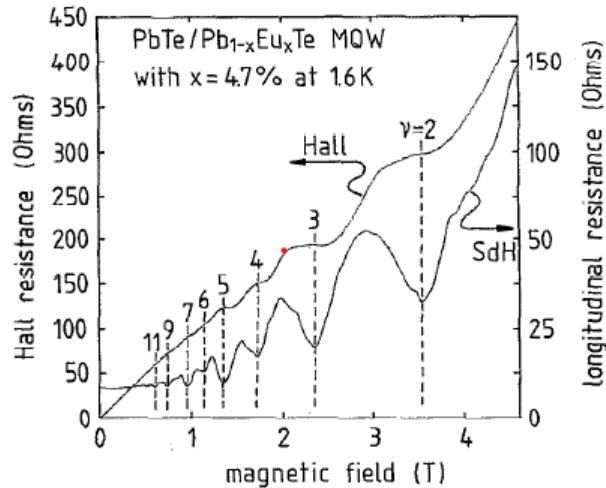


FIG.2.16. As resistências Hall (R_{xy}) e longitudinal (R_{xx}) estão representadas em função do campo magnético de 1 à 4 T, com temperatura de 1,6 K para múltiplos poços quânticos de PbTe. Os índices de preenchimento dos níveis de Landau são indicados por ν . Fonte: Springholz *et.al* (1993).¹³

Nas medidas de magnetorresistência de poço quântico tipo- n de PbTe/Pb_(1-x)Eu_xTe por Chitta *et al* (2005)² indicou a ausência de condução paralela, ou seja, apenas pelo poço através a resistência longitudinal nula obtida em 4 K para 15 T. A partir do comportamento das curvas de magnetorresistência em função da temperatura foi possível calcular as massas ciclotrônicas efetivas dos elétrons no transporte pelos vales oblíquo e longitudinal, assim como as energias de confinamento no poço.

Pena *et al* (2021)⁶⁰ também observou efeito Hall quântico e oscilações SdH em poço do tipo- p de PbTe com campos magnéticos aplicados até 30 T. Diferente dos trabalhos anteriores, as medidas foram realizadas em condições de escuro e na presença de luz (LED, diodo emissor de luz) vermelha. A maior densidade de portadores na condição de iluminação modificou o efeito Hall quântico, em comparação ao ambiente escuro, por meio da existência de valores maiores de preenchimento dos níveis de Landau.

2.8.2 Efeito Rashba em poços quânticos de PbTe

O efeito Rashba são verificados em poços quânticos de semicondutores IV-VI, devido aos parâmetros de simetria de inversão do *bulk* do cristal com rede cúbica. A interação desse último com forte acoplamento *spin*-órbita desses materiais gera o *splitting* das sub-bandas de energia do poço.⁶¹ Em Peres *et al* (2014)⁶² pela análise de do efeito de ALF foram calculadas as energias de *spin-splitting* entre 0,17 – 0,60 meV

para poços quânticos do tipo- n de $\text{PbTe}/\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$. A origem dessas energias teria sido justificada pela presença do efeito Rashba, considerando o forte acoplamento SO e ao fato da energia do *spin-splitting* ter valor de sua função proporcional ao vetor de onda de Fermi.

Altos valores de energia de *splitting* de Rashba foram calculados para poços quânticos assimétricos de PbTe , como em Shuqiang *et al* (2009)³⁷. Nesse último trabalho poços $\text{CdTe}/\text{PbTe}/\text{Pb}_{(1-x)}\text{Sr}_x\text{Te}$ tiveram as energias de Rashba estimadas para diferentes direções de crescimento como, [111] e [110]. Tendo apresentado maior valor dessa energia pelo *splitting* do vale oblíquo em [110] da ordem de $13,7 \text{ meV}$ para a temperatura de 0 K.

Neste trabalho, as análises são realizadas para o poço quântico de PbTe dopado com BaF_2 . Essa estrutura não é um isolante topológico, mas possui propriedades de magnetotransporte interessantes com transporte eletrônico pelos vales oblíquo e longitudinal da superfície de Fermi, além do acoplamento *spin-órbita* dessa estrutura que possibilita a aplicação em spintrônica.

3 Materiais e Métodos

Neste capítulo serão abordadas as técnicas utilizadas para o crescimento e análise dos dados experimental de filmes epitaxiais. Desse modo, será apresentada um breve estudo teórico do crescimento de filmes por epitaxia por feixe molecular (MBE) e a alta cristalinidade obtida nesse processo. Ainda, serão discutidas as configurações para medidas de efeito Hall, magnetorresistência e fotocondutividade.

3.1 Epitaxia por feixe molecular (MBE)

A fabricação de monocristais depende de ambientes controlados (com baixa pressão e alta temperatura dos substratos) como disponível nas câmaras de MBE, em que se utiliza câmaras com ultra-alto vácuo (UHV) para o crescimento de filmes epitaxiais. Essa tecnologia de UHV impede a adsorção de impurezas na superfície da amostra, retirando outros espécimes da câmara de preparação com a associação de bombas de vácuo (bomba turbo molecular, bomba de vácuo iônica e de sublimação de titânio) responsáveis por manter a pressão entre $(10^{-7} - 10^{-9}) Torr$.

Esse ambiente em baixa pressão contribui para o transporte dos espécimes crescidos na superfície do substrato por meio do regime molecular, ou seja, com fluxo de crescimento contínuo e sem colisões entre as partículas de gás. Dessa maneira, o livre caminho médio (\bar{l}) e o tempo para formar uma monocamada são definidos pelo vácuo da câmara de MBE, tendo \bar{l} dimensões comparáveis a distância x , entre as aberturas mecânicas (*shutters*) das células de efusão e a posição da porta amostra ($\bar{l}/x \gg 1$). Essa característica constitui uma das vantagens principais da produção de filmes epitaxiais no MBE, pois permite o controle do tempo de crescimento de monocamadas na ordem de segundos.

Como indicado na Equação 3.1, a intensidade do feixe de partículas de gás incididos sobre o substrato depende da pressão da câmara (p), a temperatura da célula de efusão (T) e a massa molecular das partículas de gás (m). A densidade molecular (n) e o tempo de deposição de uma monocamada (τ), também serão dependentes da pressão e do fluxo, em que n_0 corresponde a quantidade de partículas em uma monocamada.

$$I = \frac{p}{\sqrt{2 \pi m T k_B}}$$

$$n = \frac{p}{T k_B}$$

$$\tau = \frac{n_0}{I}$$
3.1

Como segue na Figura 3.1, o sistema do MBE é composto por uma câmara de aço inoxidável com aberturas para o posicionamento das células de efusão (*effusion cells*), manipuladores de hastes magnéticas (*wafer manipulator*), câmara de entrada do substrato (*load lock*), medidor de pressão (*ion gauge*), porta amostra (*substrate*), camadas termoisolantes (*cryoshrouds*) e dispositivo para análise de superfície *in situ* pela técnica de difração de elétrons de reflexão de alta energia (RHEED).

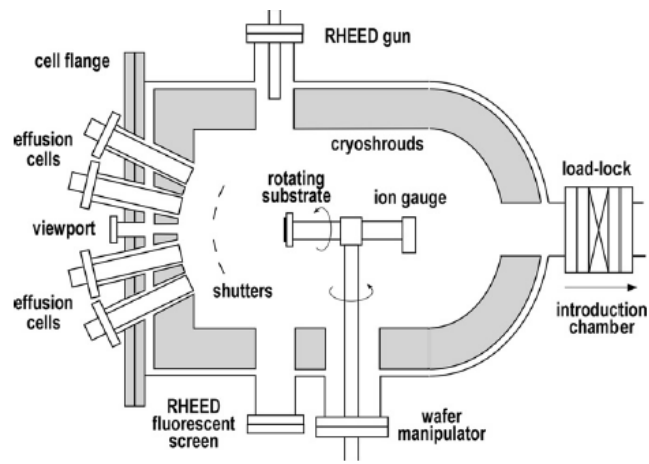


FIG.3.1. Esquema representativo de uma câmara de MBE. Fonte: Henini (2013)⁶³

A inclusão de técnicas de análise de superfície durante o crescimento da estrutura é uma segunda vantagem no uso de câmaras de MBE. Em UHV é possível compor um sistema de câmaras para verificar as propriedades do filme epitaxial, como por técnicas de espectroscopia de fotoelétrons (espectroscopia de raios-X) e difração de elétrons de baixa energia (LEED). No caso do MBE, a intensidade RHEED permite verificar o crescimento das monocamadas, assim como observar se a superfície construída é uniforme.

A Figura 3.2 apresenta esse controle da intensidade das oscilações do feixe difratado do RHEED *in situ* do filme epitaxial durante o tempo de deposição. Nessa técnica é utilizado um canhão de feixes de elétrons (Figura 3.1- RHEED *gun*) de alta energia (50 – 100 keV), que incide com ângulos rasos para gerar padrões de interferência

construtiva apenas com elétrons elasticamente espalhados na superfície. Como indicado na Figura 3.2, o período de oscilação no intervalo de (a) até (e) define a formação de uma monocamada, pois no gráfico da intensidade RHEED as etapas (a) e (e) correspondem aos pontos de intensidades máximas das oscilações. O decaimento das oscilações é devido à formação de algumas ilhas depositadas, responsáveis por diminuir a intensidade dos feixes de elétrons difratados^{63,64}.

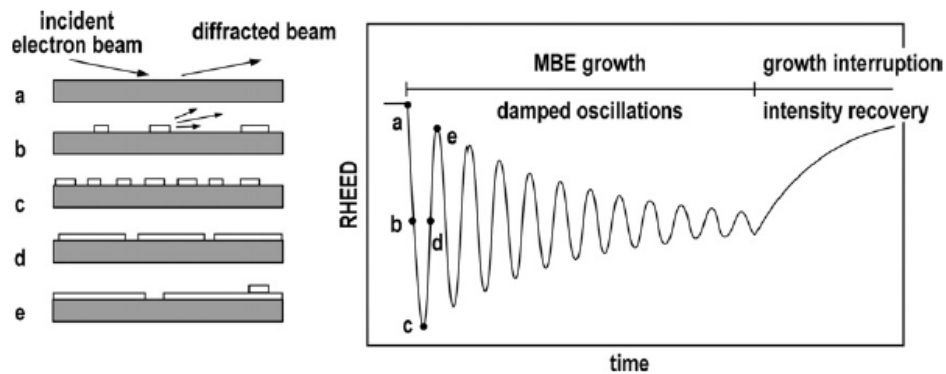


FIG.3.2. Esquema representativo à esquerda do crescimento do filme epitaxial em diferentes etapas de a-e. À direita, estão as oscilações da intensidade RHEED em função do tempo de deposição Fonte: Henini (2013)⁶³

Esse padrão RHEED também é verificado nas imagens da rede recíproca projetada no anteparo fluorescente. Na Figura 3.3, de (a) à (c) estão representadas as redes recíprocas da estrutura do filme epitaxial de GaAs, com respectiva superfície (à direita). A rede recíproca representada por pontos indica presença de distorções na superfície (a-b), enquanto para superfície uniformizada (c) há formação de linhas de difração.

Utilizando a técnica de epitaxia por feixe molecular descrita nesta secção, foram crescidas as amostras de poço quântico de PbTe:BaF₂ e a heteroestrutura SnTe/Sn_(1-x)Eu_xTe, em UHV na câmara de MBE, e analisadas a construção da superfície uniforme utilizando o padrão RHEED. Para ambas as amostras será apresentado um estudo das propriedades de magneto-transporte no capítulo 4 e na seção 3.1.1 estará disponível os parâmetros de crescimento dessas estruturas.

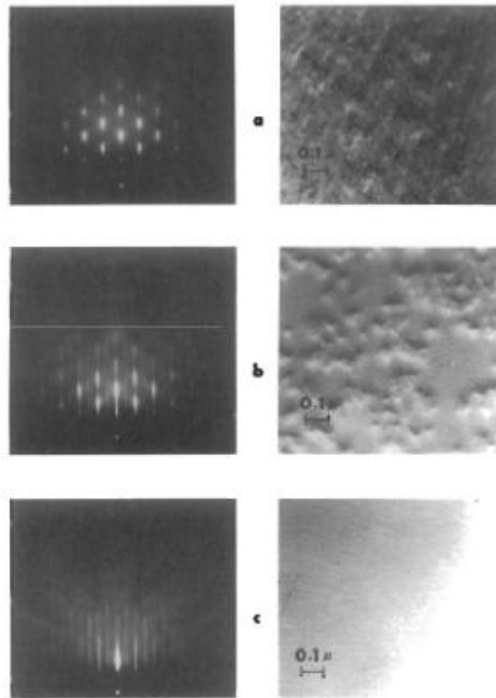


FIG.3.3. Padrões de difração RHEED para filme epitaxial de GaAs $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ (à esquerda) e as imagens das superfícies (à direita). Fonte: Ohring (1992)⁶⁵

3.1.1 Crescimento das amostras

O poço quântico e a heteroestrutura estudados nesse trabalho foram crescidas no sistema de MBE pelo grupo de pesquisa do Laboratório Associado de Sensores e Materiais do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais – LAS/INPE na cidade de São José dos Campos, estado de São Paulo. Ambas as amostras foram crescidas sobre um substrato de fluoreto de bário (BaF_2) clivado na direção $[111]$. A seguir estão disponibilizadas os parâmetros de controle de crescimento nas Tabelas 3.1 e 3.2 respectivas ao $p\text{-PbTe}:\text{BaF}_2$ e $p\text{-SnTe}/\text{Sn}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$. Nas Figuras 3.4 (a-b) estão indicadas as estruturas do poço quântico e da heteroestrutura.

TABELA 3.1- Informação de alguns parâmetros de crescimento para o poço quântico tipo-*p* de PbTe dopado com BaF₂.

<i>PbTe:BaF₂</i>								
Camada	ID	Pressão das células de efusão (<i>Torr</i>)					Tempo de deposição	Espessura
		PbTe	Te1	Te2	Eu	BaF ₂ (1,7%)		
Barreira <i>buffer</i>	16021	9,3 × 10 ⁻⁷	7,7 × 10 ⁻⁸	8,0 × 10 ⁻⁸	1,2 × 10 ⁻⁷	—	03:26:00	2 μm
Poço		9,4 × 10 ⁻⁷	3,0 × 10 ⁻⁸	8,4 × 10 ⁻⁸	—	—	00:01:01	10 nm
Barreira <i>cap</i>		9,2 × 10 ⁻⁷	7,5 × 10 ⁻⁸	7,8 × 10 ⁻⁸	1,2 × 10 ⁻⁷	—	03:26:00	2 μm

TABELA 3.2- Informação de alguns parâmetros de crescimento para a heteroestrutura do tipo-*p* baseada em SnTe.

<i>SnTe/Sn_{0,98}Eu_{0,02}Te</i>				
Camada	ID	Pressão das células de efusão (<i>Torr</i>)		Espessura
		SnTe (690 °C)	Eu (318 °C)	
<i>buffer</i>	934	8,5 × 10 ⁻⁷	—	2,1 μm
<i>cap</i>		8,5 × 10 ⁻⁷	0,17 × 10 ⁻⁷	3,0 μm

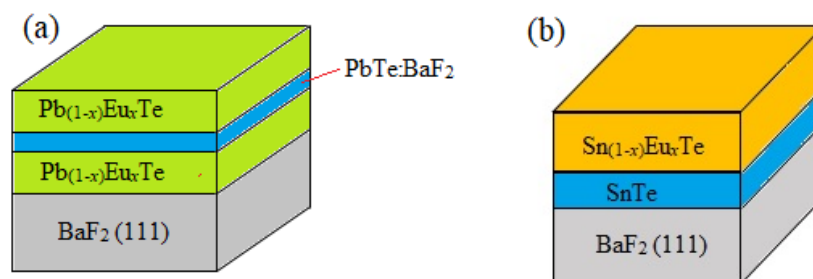


FIG.3.4. Esquema representativo do crescimento das estruturas do poço quântico de PbTe:BaF₂ (a) e a heteroestrutura de SnTe/Sn_(1-x)Eu_xTe (b).

3.2 Medidas de transporte eletrônico

As análises das propriedades de transporte de ambas as amostras foram realizadas no laboratório do grupo de investigação em física do estado sólido (GIFES), do instituto de Física e Química na Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI). Esse laboratório é equipado para medidas de magneto transporte, com sistema liquefator de Hélio que atinge baixas temperaturas até 1,9 K e uma bobina supercondutora que gera campo magnético até 9 T. Esse equipamento foi desenvolvido pela *Quantum Design* e é um sistema de medidas de propriedades físicas (*PPMS- Physical Properties Measurement System*) (Figura 3.5).

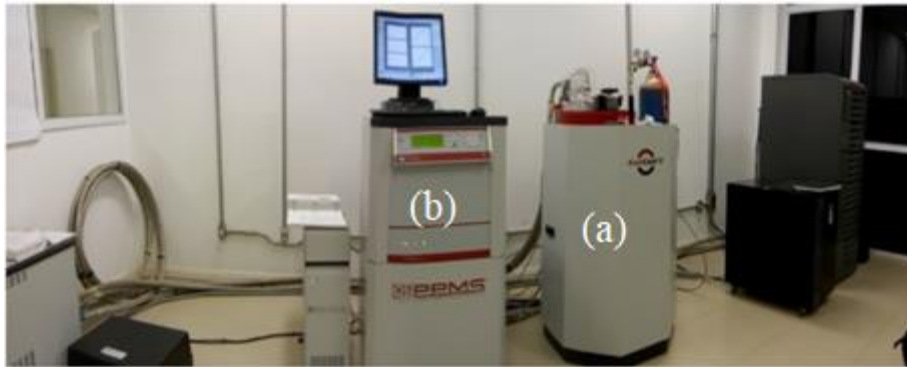


FIG.3.5. Imagem do laboratório *PPMS* do instituto de Física e Química da UNIFEI.

Na Figura 3.5 está apresentado o *PPMS* com o criostato de hélio (a) e o sistema de comando, em (b), para monitorar os parâmetros de temperatura, intensidade do campo magnético, nível do hélio no criostato, assim como, configurar as séries de medidas. A precisão no controle das medidas dentro desse sistema permite medir diferentes efeitos como de magneto-transporte e fotocondutividade, apenas com mudança das configurações de montagem no porta-amostras da amostra a ser estudada. Nas próximas seções serão discutidas essas configurações distintas utilizadas nas análises desse trabalho.

3.2.1 Configuração medidas de transporte elétrico

As medidas de magnetorresistência realizadas no *PPMS* permitiram variar o campo magnético até 9 T, com temperaturas variando de 300 K à 1,9 K. Na Figura 3.6 está uma imagem do porta-amostras utilizado para as medidas de transporte eletrônico. De acordo com a figura a disposição do circuito do porta-amostras permitiu inserir um

dispositivo de diodo emissor de luz (LED) infravermelha (IR), com comprimento de onda de 940 nm e, com isso, se pode analisar medidas de magnetotransporte na ausência e presença de luz, além de fotocondutividade para estudo do tempo de foto-resposta do material.

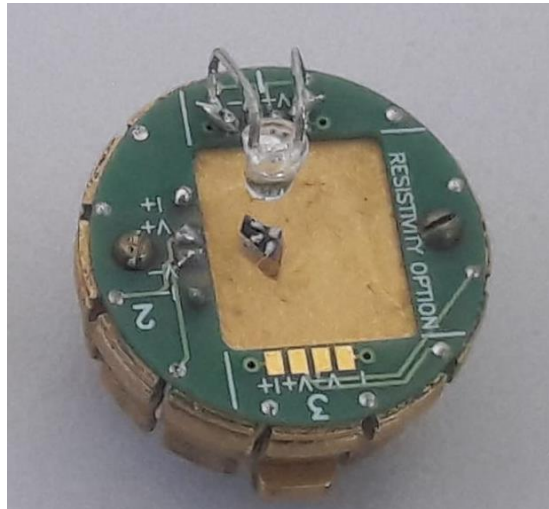


FIG.3.6. Configuração de montagem dos contatos em um filme epitaxial para medidas de transporte elétrico.

Para a soldagem dos fios de Au são utilizados contatos de In, seguindo a geometria de Van der Pauw na superfície da amostra. Essa configuração para medidas de propriedades elétricas é feita quando a amostra tem uma forma arbitrária e a disposição de quatros pontos deve estar próxima das bordas do material. Na Figura 3.7 está esquematizado a passagem de corrente e tensão por esse método de medida.

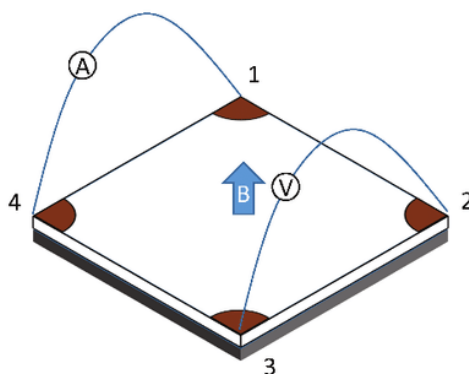


FIG.3.7. Representação esquemática de contatos dispostos pela geometria de Van der Pauw. Fonte: Balestrieri (2014)⁶⁶

Na Figura 3.7, a corrente passa pelo trecho I_{14} e tem sua tensão medida em V_{32} e, pela lei de Ohm, tem sua resistência correspondente a $R_{32,14} = V_{32}/I_{14}$. A vantagem da simetria nessa técnica são as possíveis configurações de resistências equivalentes (ou seja, $R_{32,14} = R_{14,32}$ e $R_{21,43} = R_{43,21}$), de modo que a resistência final é média dessas equivalências. Esse fato torna a medida mais precisa e sensível a pequenos valores de resistências como nas medidas de efeito Hall (seção 3.2.2).^{66,67}

Como método para análise complementar de magneto transporte, também, foram feitas medidas variando a posição angular da superfície da amostra em relação ao campo magnético aplicado. Essa técnica está apresentada na Figura 3.8 e para isso foi utilizado suporte para mudança dos ângulos de inclinação da amostra. Essa técnica foi usada na análise das seções 4.1 e 4.2 (Figuras 4.9 e 4.18).

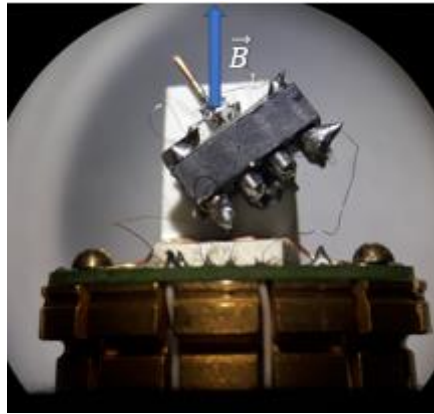


FIG.3.8. Imagem do porta-amostra do PPMS com suporte fixo para inclinação da superfície da amostra com relação ao campo magnético aplicado \mathbf{B} .

3.2.2 Configuração para medição do efeito Hall

A geometria de Van der Pauw apresenta importante contribuição para medidas de magneto transporte, como em magnetorresistência, e da mesma forma é relevante para caracterização elétrica de filmes semicondutores por meio do efeito Hall. A aplicação dessas duas técnicas permite o cálculo da mobilidade elétrica e concentração de portadores tipo n e p , a partir da tensão Hall experimental do material (V_H). Embora a geometria da posição dos contatos seja a mesma, na medida Hall a configuração dos fios mudam como indicado na Figura 3.7.

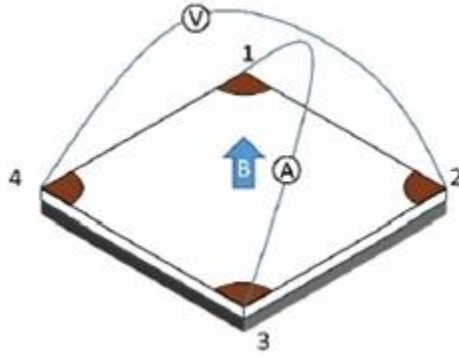


FIG.3.7. Configuração de contatos dispostos pela geometria de Van der Pauw para medida de efeito Hall. Fonte: Balestrieri (2014)⁶⁶

3.3 Comprimento de atenuação da radiação incidente

Como para as análises de medida de magneto transporte as amostras foram submetidas a incidência luminosa, de LED infravermelho, uma informação relevante é o comprimento de penetração da radiação na superfície do material. Para isso, se utiliza a Equação 3.2, em que esse comprimento da luz é indicada por γ , onde λ corresponde ao comprimento de onda da radiação incidente, c é a velocidade da luz no vácuo, μ_0 é a permeabilidade magnética no vácuo e σ é a condutividade do material.

Na seção 4.2 do capítulo de análise e resultado para a heteroestrutura essa técnica será utilizada para explicar a contribuição de cada filme de SnTe e $\text{Sn}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ para o transporte elétrico do sistema.

$$\gamma = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi c \mu_0 \sigma}} \quad 3.2$$

4 Resultados e Análises

Neste capítulo os dados experimentais do poço quântico PbTe:BaF₂ e da heteroestruturas SnTe/Sn_(1-x)Eu_xTe, ambas estruturas do tipo-*p*, são analisados nas seções 4.1 e 4.2, respectivamente, utilizando a teoria apresentada do capítulo de revisão bibliográfica.

4.1 Poço quântico PbTe:BaF₂

Nesta primeira seção serão discutidos os dados para o poço quântico do tipo-*p* de PbTe:BaF₂. A análise que será apresentada corresponde as medidas de magnetorresistência e efeito Hall em baixas temperaturas, que contribuíram para estudar as propriedades físicas da estrutura de banda do poço quântico.

Na Figura 4.1 a medida da resistência elétrica longitudinal (R_{xx}) para o poço quântico de PbTe:BaF₂ apresenta um comportamento metálico, visto a diminuição contínua da resistência abaixo de 300 K; esse padrão da R_{xx} implica em um transporte por gás de bidimensional de buracos, exclusivamente, pela camada do poço, uma vez que as barreiras de Pb_(1-x)Eu_xTe tem propriedades isolantes. O *inset* nesta figura apresenta o esquema do poço de PbTe dopado com BaF₂ que é encapsulada entre as camadas de Pb_(1-x)Eu_xTe (em azul) e crescida sobre o substrato de BaF₂ clivado na direção[111] (camada verde). A fim de compreender as propriedades elétricas do poço foram realizadas medições de efeito Hall na presença e ausência de radiação infravermelha (IR) (Figuras 4.1(b-c)). Como apresentado nas Figuras 4.1.(b-c), para temperaturas abaixo de 50 K a concentração de buracos diminui, enquanto a mobilidade satura. Neste último não há diferença para ambas condições de iluminação. A diminuição da concentração de portadores em baixas temperaturas pode estar associado a presença de níveis de defeito, que de acordo com Pena *et al* (2017)⁶⁸ devem ocorrer quando há níveis defeitos pelos canais de condução da barreira e do poço e, portanto, gera uma saturação da mobilidade em mais baixas temperaturas.

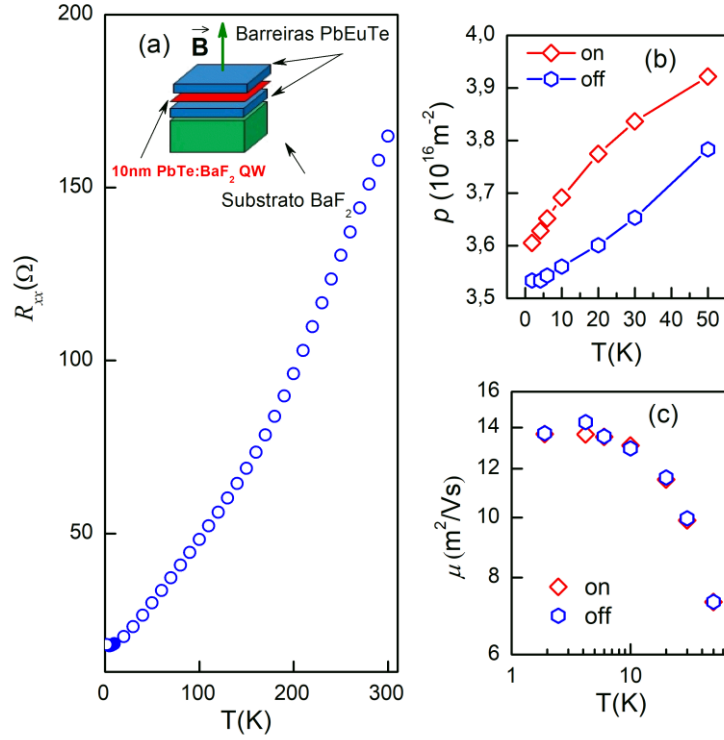


FIG.4.1. (a) Resistência longitudinal em relação a faixa de temperatura entre 1,9 - 300 K. O *inset* mostra um esquema representativo da estrutura do poço de PbTe:BaF₂ (10 nm de espessura). A figura (b) apresenta os valores da concentração de portadores com incidência (losangos vermelhos) e na ausência de luz (hexágonos azuis) em função da temperatura. (c) Mobilidade elétrica em função da temperatura para condições de iluminação e escuro.

Para compreender esses efeitos da luz nas propriedades de magneto transporte foram executadas medidas de magnetorresistência (MR) (Figuras 4.2 (a-b)) com campo magnético até 9 T. O estudo em diferentes condições iluminação permitem comparar e identificar os mecanismos de transporte pelos multivales da estrutura do PbTe e, sendo um material aplicável a dispositivos de sensores infravermelhos é necessário caracterizar as propriedades de magneto transporte com luz infravermelha.

Na Figura 4.2(a) a curva da resistência longitudinal R_{xx} com luz tem sua amplitude diminuída (seta vermelha indica o translado da curva para baixo), comparada a curva sob condição de escuro e evidencia oscilações acima de 5 T. Com a finalidade de verificar em detalhes essas oscilações foi aplicada a derivada segunda de R_{xx} (d^2R_{xx}/dB^2), como identificada na Figura 4.2(b). Em ambas condições *on* e *off* são explicitados um padrão de batimento de oscilações Shubnikov-de Haas (SdH). No caso

do led *on*, é possível verificar uma fase responsável por transladar o batimento para direita em campos acima de 6 T.

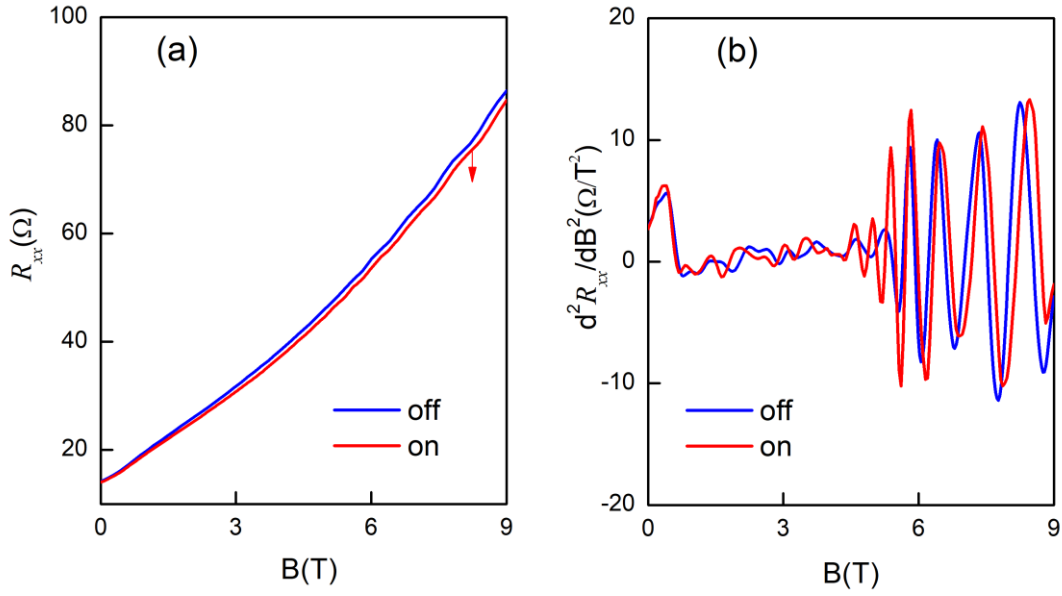


FIG.4.2. Para ambas condições de iluminação em 1,9 K são apresentadas em (a) a resistência longitudinal (R_{xx}) e em (b), a respectiva, derivada segunda de R_{xx} em função do campo magnético aplicado perpendicularmente a direção de crescimento da amostra [111].

Com a observação das oscilações SdH foram realizadas medidas de MR até 50 K. Na Figura 4.3(a), estão as amplitudes da derivada segunda dessas oscilações, d^2R_{xx}/dB^2 , em função do inverso do campo magnético para luz *off*. As intensidades são atenuadas com aumento da temperatura, devido ao alargamento dos níveis de Landau (seção 2.2, Figura 2.6). Para calcular as componentes oscilatórias dessas curvas fez-se a transformada FFT (*Fast Fourier Transform*) em função das frequências para led *off* e *on*.

Na Figura 4.3(b) são assinaladas duas frequências principais $\alpha = 58$ T, $\beta = 78$ T, enquanto na presença de luz IR (Figura 4.3(c)) uma terceira componente oscilatória é observada com frequência indicada por $\gamma = 124,7$ T. Para cada pico nas Figuras 4.3(b-c) foram calculadas as concentrações de portadores utilizando a relação p_{2D} , sendo com led *off* $p_{\alpha}^{off} = 1,4 \times 10^{16} m^{-2}$ e $p_{\beta}^{off} = 1,9 \times 10^{16} m^{-2}$. Para o led *on* foram calculados $p_{\alpha}^{on} = 1,4 \times 10^{16} m^{-2}$, $p_{\beta}^{on} = 1,8 \times 10^{16} m^{-2}$ e $p_{\gamma}^{on} = 2,9 \times 10^{16} m^{-2}$. Esses valores serão utilizados mais adiante para o cálculo do nível de Fermi.

Para verificar a origem dessas componentes oscilatórias foi considerada a relação de Onsager (Equação 2.8). A partir dessa relação verifica-se se há contribuição de

transporte pelos elipsoides da superfície de Fermi longitudinal ([111]) e oblíquo ($[\bar{1}11]$) esquematizados na Figura 2.7. As razões das frequências tiradas da análise de FFT (Figura 4.3), f_β/f_α e f_γ/f_α , correspondente a valores não inteiros como 1,34 e 2,15, respectivamente e, por isso os picos não são harmônicos entre si.

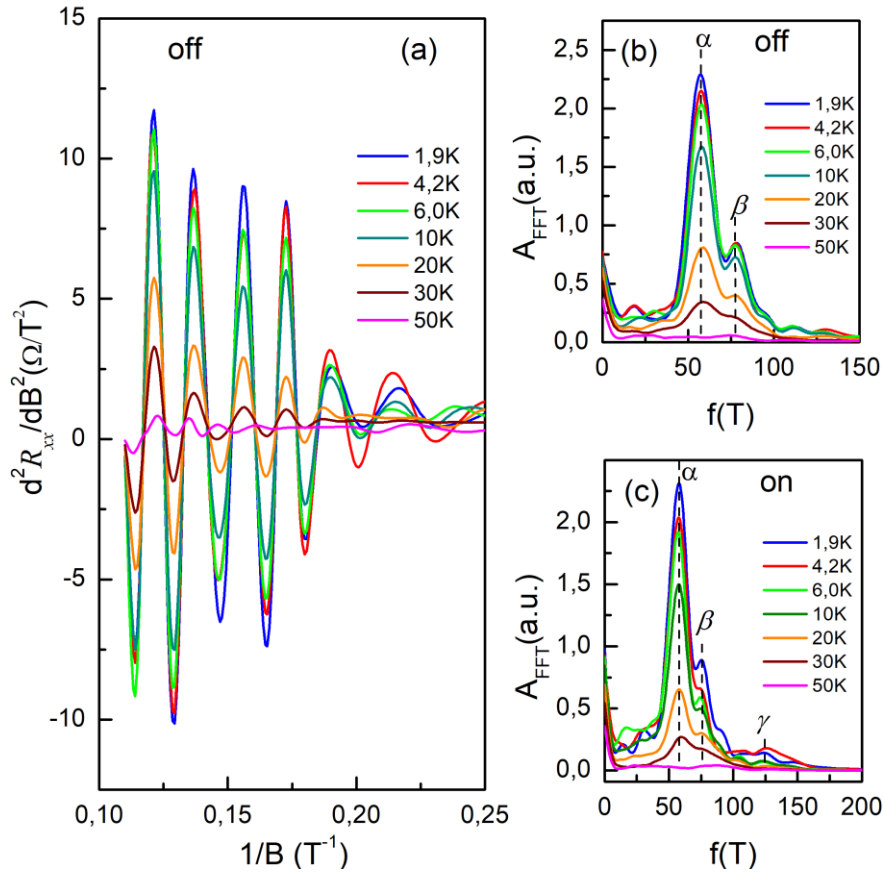


FIG.4.3. (a) Derivada segunda da componente longitudinal da resistência em função do inverso do campo magnético e em (b) está a análise de FFT para o led *off*. Em (c) está representado os dois picos α e β principais, com a adição de uma componente de oscilação γ para led *on*.

Dessa forma, foi calculado um valor teórico da razão entre frequência dos vales longitudinal e oblíquo (seção 2.2.1, Figura 2.7), utilizando a igualdade entre as razões $f_o/f_L = S_F^o/S_F^L$, em que S_F^o e S_F^L são as áreas das secções transversais dos elipsoides da superfície de Fermi projetadas no plano $k_x k_y$. Para a relação da anisotropia das massas do PbTe, $K = 20$ (seção 2.2.1), sendo $m_{||} = 0,213$ e $m_{\perp} = 0,021^2$ e $\theta = 70,5^\circ$, obtêm-se razão teórica $S_F^o/S_F^L = \frac{f_o}{f_L} = 2,24$.

Com essa razão, entre as áreas de secção transversal da superfície de Fermi para o PbTe, pôde-se assumir que f_β não é contribuição do transporte pelo vale oblíquo, uma vez que os dados experimentais da figura 4.3(b) fornecem $f_\beta = 1,34 f_\alpha$. Por outro lado, de acordo com os dados experimentais da Figura 4.3(c) sendo $f_\gamma = 2,15 f_\alpha$ conclui-se que deve ocorrer transporte pelo vale oblíquo, já que essa proporção é muito próxima da encontrada nos cálculos acima $f_o = 2,24 f_L$.

Além dos cálculos da razão entre as frequências, a estimativa dos valores experimentais para as massas ciclotrônicas efetivas $m_{\alpha,\beta,\gamma}^{cyc}$ confirmam o transporte por multivales na superfície de Fermi. Com isso, na Figura 4.4(a-b) estão apresentadas as amplitudes do FFT, obtidas dos gráficos 4.3 (b) e (c), que obedecem ao termo termodinâmico da expressão de Lifshitz-Kosevich (LK)^{31,33} (Equação 2.7, seção 2.2). Para os nossos cálculos foi utilizado o intervalo de $1/B$ entre $0,11 \text{ T}^{-1}$ (9 T) e $0,35 \text{ T}^{-1}$ (2,8 T).

As linhas sólidas nas Figuras 4.4(a-b) são os ajustes LK para cada frequência α , β e γ . Na Figura 4.4(a) (sob condição de escuro) as massas ciclotrônicas efetivas para α e β possuem valores comparáveis aos encontrados na literatura $m_L^{cyc} = 0,021 m_e$,², indicados por $m_\alpha^{off} = (0,041 \pm 0,01)m_e$ e $m_\beta^{off} = (0,034 \pm 0,01)m_e$. Embora esses valores sejam maiores que m_L^{cyc} esperado para o PbTe, esse resultado atribui-se ao efeito Rashba, responsável pelo *splitting* do elipsoide longitudinal (L) e a existência das duas massas efetivas.

Por outro lado, quando aplicamos a luz IR (Figura 4.4(b)) os valores efetivos de m_α^{on} e m_β^{off} sofrem ligeiro aumento. Além disso a massa do pico γ dada por $m_\gamma^{on} = 0,060 m_e$ possui um valor condizente $m_o^{cyc} = 0,063 m_e$, sendo a expressão para a massa ciclotrônica efetiva do vale oblíquo, $m_o^{cyc} = \frac{1}{3} m_\perp \sqrt{(1 + 8 m_\parallel / m_\perp)}$,² escrita em função dos valores m_\parallel e m_\perp do PbTe. Esse resultado confirma a origem componente oscilatória γ pela contribuição do vale oblíquo para quando há incidência de luz IR.

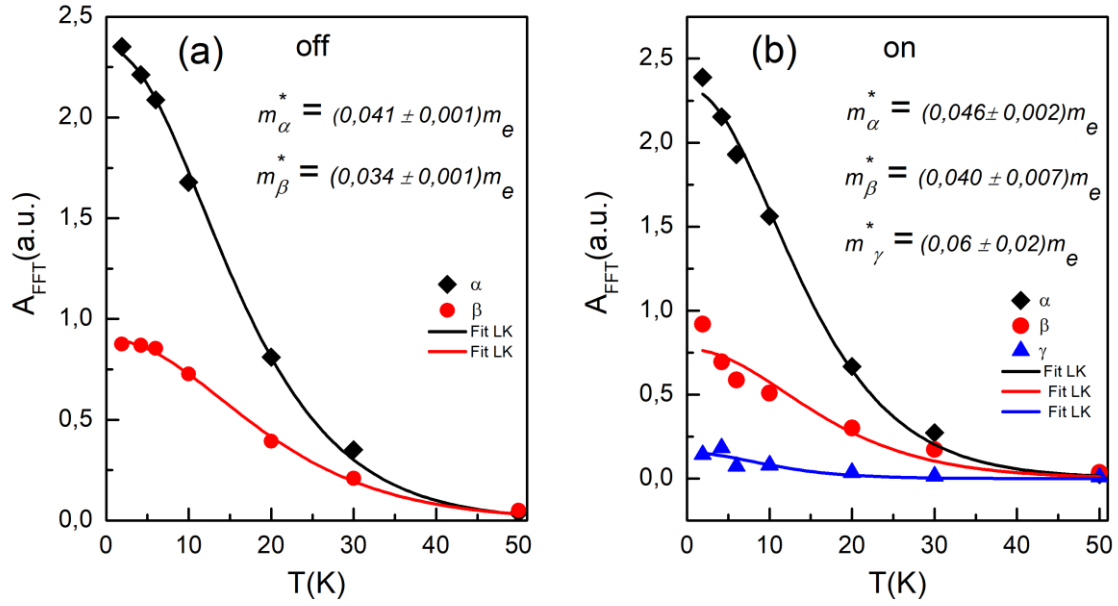


FIG.4.4. Amplitudes das curvas da análise de FFT para as frequências principais apresentadas pelos picos α , β e γ (símbolos fechados), em função da temperatura abaixo de 50 K, ajustadas com a expressão LK (Equação 2.7, seção 2.2) com led *off* (a) e *on* (b) (linhas sólidas). As massas ciclotrônicas efetivas resultantes de cada ajuste estão indicadas pelas respectivas frequências nos subíndices.

Um cálculo detalhado das energias de confinamento no poço quântico e da energia de Fermi permitem verificar a contribuição dos múltiplos vales no transporte eletrônico do poço quântico de PbTe:BaF₂. Para determinar as energias confinadas de cada vale são utilizados os vetores de onda da barreira, $\chi = \sqrt{(2m_b^{L,O}/\hbar^2)(\Delta E_v - E)}$, e do poço, $q = \sqrt{(2m_p/\hbar^2)E}$. Ao utilizar as condições de contorno de Ben-Daniel-Duke as soluções das ondas planas na interface do poço quântico correspondem as equações transcendentais^{47,69} (Equação 4.1), em que a espessura do poço é representada por l , e $m_b^{L,O}$ e $m_p^{L,O}$ são as massas ciclotrônicas efetivas da barreira e do poço para ambos os vales longitudinal e oblíquo.

$$\frac{\chi}{m_b^{L,O}} = \frac{q}{m_p^{L,O}} \tan\left(\frac{ql}{2}\right)$$

4.1

$$\frac{\chi}{m_b^{L,O}} = -\frac{q}{m_p^{L,O}} \cot\left(\frac{ql}{2}\right)$$

Sendo a altura da barreira na banda de valência ΔE_v igual a $D \Delta E_g$, em que $D = 0,45$ é o deslocamento normalizado da banda de valência e $\Delta E_g = 0,202$ é a diferença entre os *gaps* de energias do $\text{Pb}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ e PbTe .^{2,47,56} Desse modo, o cálculo das energias confinadas no poço do tipo-*p* PbTe resulta nos seguintes níveis de energia para o vale longitudinal: 10 meV, 38 meV, 77 meV, 121 meV, and 168 meV, enquanto para o oblíquo são obtidos dois níveis 42 meV and 149 meV.

As energias de Fermi (ε_F) podem ser calculadas realizando a integração sobre a densidade de estados de buracos e pode ser expressa pela razão entre a concentração total de portadores e as massas dos elipsoides da superfície de Fermi, $\varepsilon_F = p\pi\hbar^2 / (m_L^{cyc} + 3 m_O^{cyc})$. Para cada condição de iluminação (*off* e *on*) são somadas as concentrações p_{2D} calculadas anteriormente a partir das frequências obtidas das análises de FFT das Figuras 4.3(b-c). Assim, para o led *off*, temos $p_{off} = p_\alpha^{off} + p_\beta^{off} = (3,3 \pm 0.1) \times 10^{16} m^{-2}$, com $\varepsilon_F = 73$ meV. Para o led *on*, $p_{on} = p_\alpha^{on} + p_\beta^{on} + p_\gamma^{on}$ calculado foi $(6,3 \pm 0.1) \times 10^{16} m^{-2}$, correspondendo a $\varepsilon_F = 101$ meV.

Na Figura 4.5 está representado um esquema dos níveis quantizados de energia dentro do poço de PbTe , juntamente com as energias de Fermi para o $\text{PbTe}:\text{BaF}_2$ calculadas para as condições de escuro e iluminação. Para a condição de escuro (*dark*) há contribuição de dois vales longitudinais (L1 e L2) e um vale oblíquo (O1) para o transporte eletrônico. Para a condição com iluminação (*light*), um vale longitudinal adicional (L3) é populado.

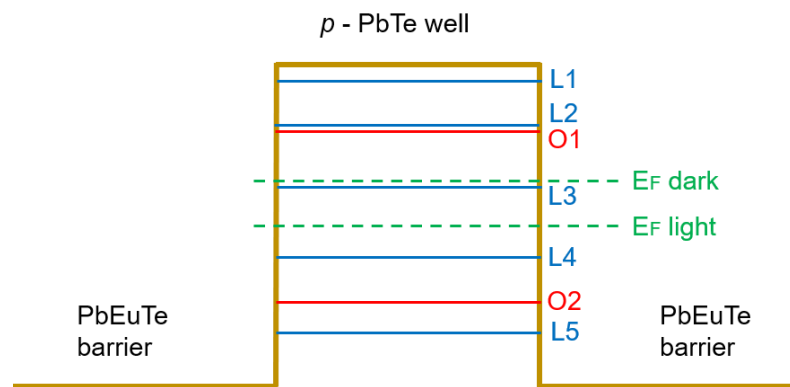


FIG.4.5. Representação esquemática do poço quântico *p*- PbTe com as energias de confinamento dos vales longitudinal e oblíquo, além das energias dos níveis de Fermi para condição de luz *off* e *on*.

Como demonstrado anteriormente, a frequência f_γ é originada do vale oblíquo, contudo ainda é necessário identificar a origem da frequência f_β . A princípio f_β não se confirmou ser segundo harmônico de f_α ou, ainda, se originar do vale oblíquo. Dessa maneira, o efeito Rashba deve ser a causa da existência de pico β , considerando o fato de poços quânticos de PbTe do tipo- n terem apresentado forte efeito de acoplamento *spin* órbita (SO).¹⁰

Como mostrado na Figura 4.6, o efeito Rashba promove um *splitting* (separação) do elipsoide do vale longitudinal (L), dado por um fator de deslocamento Δk_R entre os centros das áreas circulares de secção transversal (S_F^L), gerando no plano $k_x k_y$ outras duas áreas circulares, sendo uma interna $S_{F,i}^L$ e externa $S_{F,e}^L$ (Figura.4.6).

Por considerações geométricas se estima a diferença entre os dois centros circulares, de modo que Δk_R é igual a $0,01 \text{ \AA}^{-1}$. Com Δk_R e os valores de massa $m_{\parallel} = 0,213$ e $m_{\perp} = 0,021$, para o PbTe,² a energia de Rashba para o sistema é calculado por $E_R = \hbar^2 \Delta k_R^2 / (2^3 \sqrt{m_{\parallel} m_{\perp}^2})$ que fornece o valor de 8,4 meV. Esse valor para E_R é relativamente alto comparado a outra energia de Rashba para o poço PbTe do tipo- n ,¹⁰ o qual varia entre 0,17 – 0,6 meV. No entanto, para múltiplos poços quânticos de perovskita orgânico-inorgânico foi reportado um valor de energia Rasha *splitting* de (35 ± 10) meV.

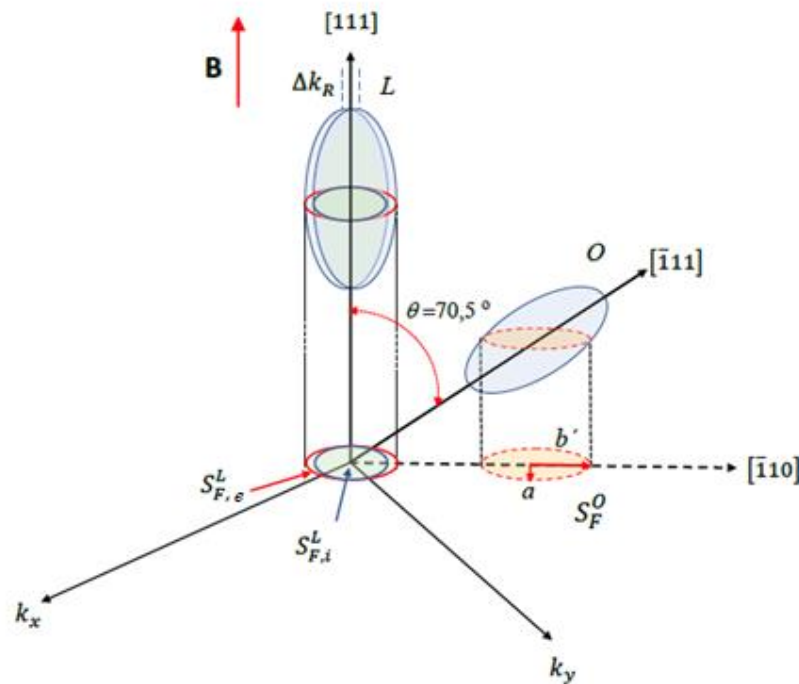


FIG.4.6. Representação esquemática do Rashba *splitting* no elipsoide do vale longitudinal (L) na direção [111].

Figuras 4.7(a-b) está apresentada a evolução angular das oscilações SdH na temperatura de 4,2 K, em função do inverso do campo magnético a superfície da amostra ($1/B_{\perp}$, em que B_{\perp} corresponde a $B \cos \theta$ para ângulos de inclinação θ entre 0° e 50° . Em (a) estão essas curvas para quando não há luz IR iluminando a amostra (*off*) e na Figura 4.7 (b) para há incidência de iluminação IR (*on*). Essas medidas da evolução angular das oscilações devem afirmar se a frequência f_{β} é segundo harmônico de f_{α} . Dessa forma, as posições dos picos de oscilação não devem modificar para diferentes ângulos, apresentado a mesma posição como indicado pelas linhas verticais pontilhadas e, com isso, mantendo constante a diferença da distância entre os picos α e β da análise de FFT dessas curvas (Figura 4.8).⁷⁰

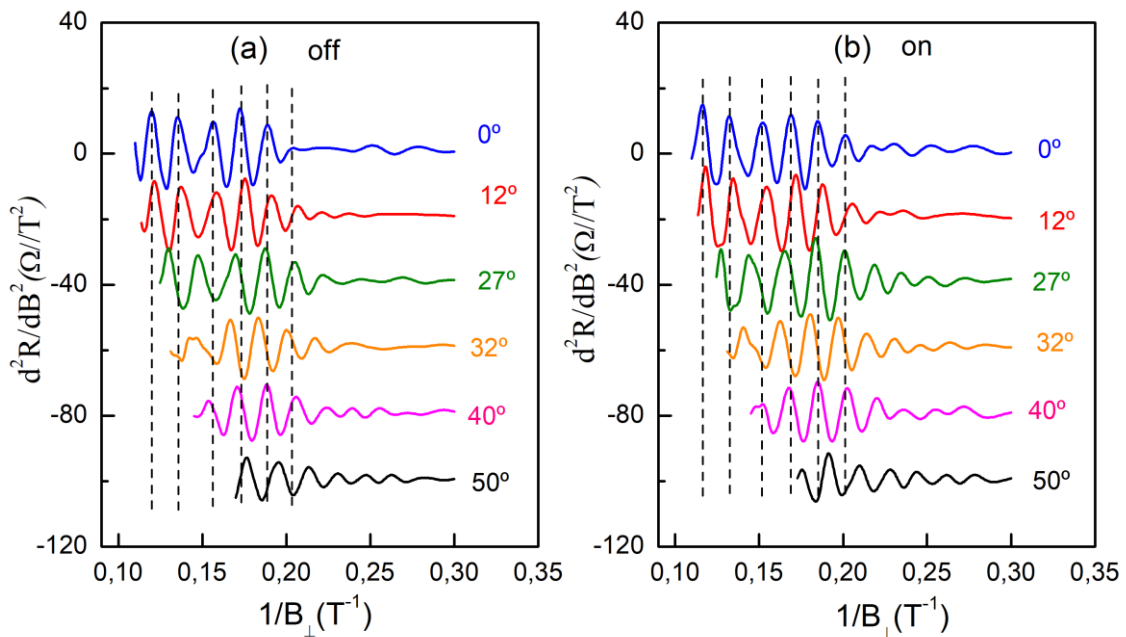


FIG.4.7. Segunda derivada da resistência longitudinal com relação ao inverso do campo magnético ($1/B_{\perp}$) aplicado perpendicular a superfície do poço de PbTe:BaF₂ com led *off* (a) e *on* (b) à temperatura de 4,2 K.

Das Figuras 4.7 as oscilações SdH são apresentadas mesmo com a mudança angular, no entanto as posições dos picos aparecem com ligeiros deslocamentos para luz *off* e *on*. A análise de FFT dessas oscilações em (a) e (b) da Figura 4.8 ocorreram pequenos deslocamentos para direita das frequências α e β , como indicado pelas setas. Esses

deslocamentos geraram a diminuição da distância entre os picos, na medida que os ângulos de inclinação são aumentados para 50° . Dessa forma é excluída a possibilidade de que f_β seja segundo harmônico da frequência α , pois a diferença entre as frequências deveria ser constante. Os picos α e β são devido ao *splitting* de Rashba, como indicado nos cálculos de discussão da Figura 4.6.

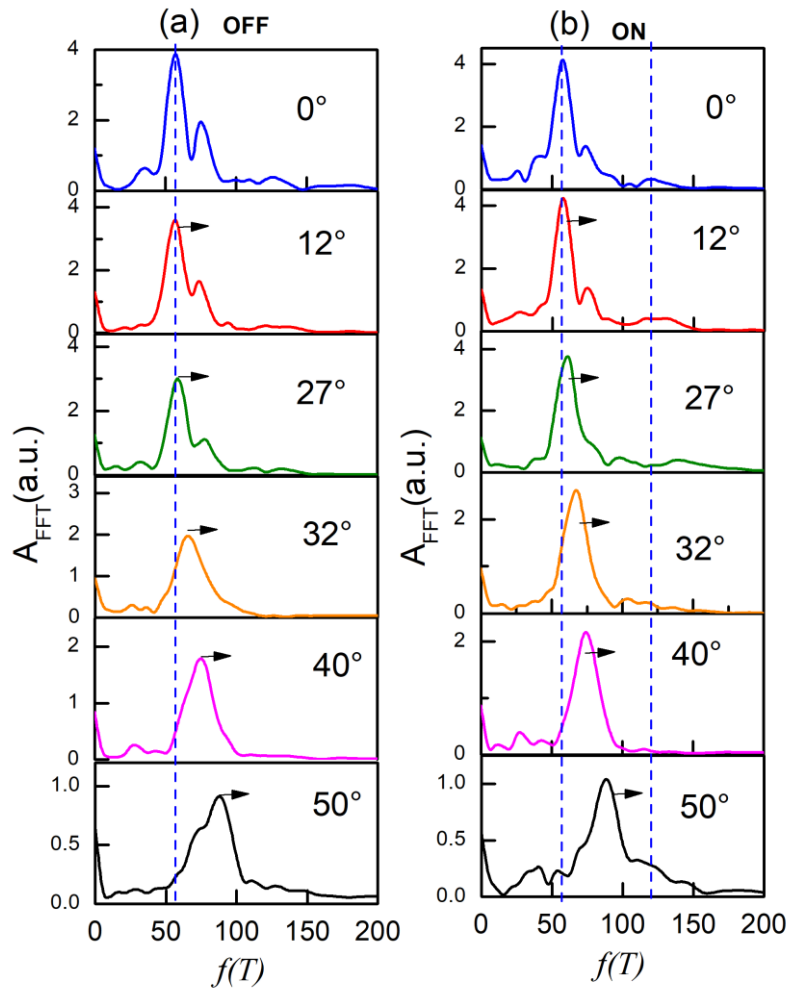


FIG.4.8. Curvas de FFT em função da frequência para vários ângulos de posição do poço PbTe:BaF₂ com relação a incidência do campo magnético aplicado na direção [111] para temperatura de 4,2 K.

Na Figura 4.9(a) está representada a curva da segunda derivada da resistência longitudinal em 4,2 K para o led *off*, em função do inverso do campo magnético aplicado sem inclinação angular. O objetivo com esse gráfico é calcular os valores efetivos dos fatores g de Landé (Equação 2.19) e verificar se a dopagem com BaF₂ tem influência neste parâmetro.³⁹

Para esse cálculo são identificadas as posições de $1/B$ dos picos de máximo e mínimo, correspondentes a separação dos níveis de Landau (*inset* Figura 4.9 (a)), como indicado por $n +$, $n -$, $(n - 1) +$ e $(n - 1) -$ nas linhas verticais pontilhadas da Figura 4.9 (a). Embora se apresente o gráfico da Figura 4.9 (a) para luz *off* os cálculos dos fatores g de Landé foram realizados para ambas condições de iluminação, como indicado pela Tabela 4.1, de acordo com os respectivos valores efetivos de $m_{\alpha,\beta,\gamma}^{cyc}$ calculados a partir das análises de FFT (Figura 4.4).

Os valores efetivos de g calculados (Tabela 4.1) estão na ordem do que são esperados para $Pb_{(1-x)}Eu_xTe$,⁷¹ além disso é notável a diminuição dos valores de g para os picos α e β quando se aplica luz IR. Além disso, a razão $m^{cyc}g(\epsilon_F)/2$ para ambas condições deram 0.58, que está de acordo com valores encontrados para $PbTe$.^{39,70}

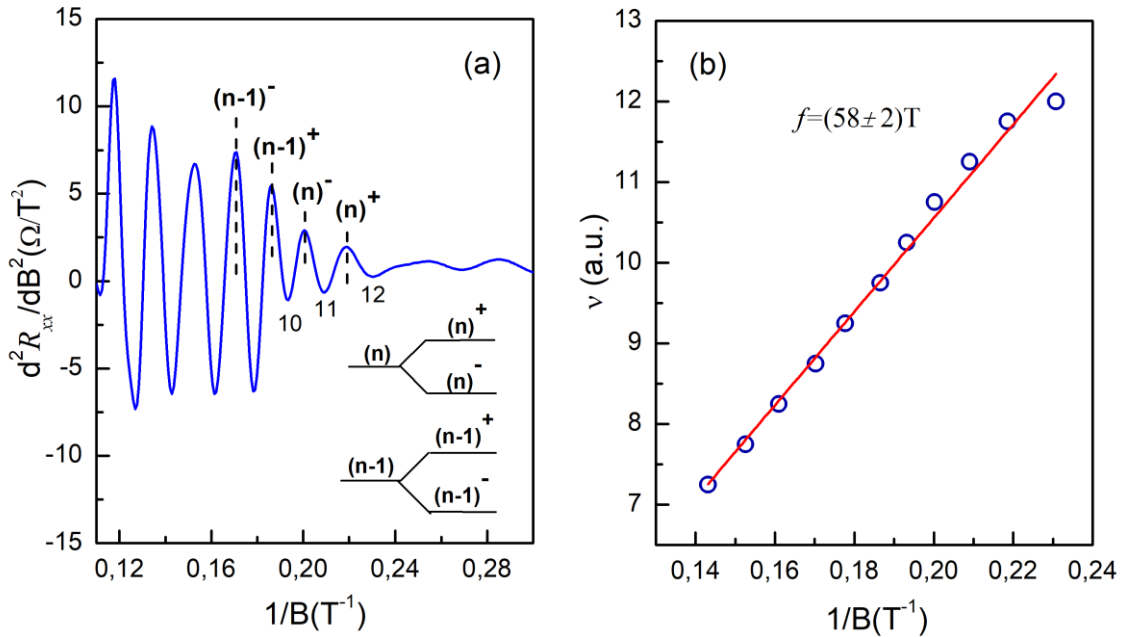


FIG.4.9. (a) Segunda derivada da resistência longitudinal em função de $1/B$ para temperatura de 4.2 K e com led *off*. As linhas verticais pontilhadas indicam os picos correspondentes aos subníveis gerados pelo Zeeman - *splitting* e esquematizados no *inset*. Em (b) está representado o diagrama dos níveis de Landau analisados em (a), considerando os picos de máximo e mínimo.

Na Figura 4.9(b) estão indicados os índices dos níveis de Landau com os respectivos valores de inverso do campo magnético para os picos de máximo e mínimo, representado pelos círculos azuis. Do ajuste linear o valor de inclinação deve corresponder a frequência de oscilação responsável pelo padrão de batimento SdH. Para

esse dado em 4,2 K, apenas encontramos f igual a 58 T. Em princípio, deveria aparecer a componente β , no entanto para campos mais baixos a frequência α aparece predominante nesse sistema.

Tabela.4.1. Massas ciclotrônicas efetivas normalizadas $m_{\alpha,\beta,\gamma}^{cyc}/m_e$, valores do g efetivo para o campo magnético aplicado na direção [111] e a razão de separação dos níveis de Landau calculados com led emissor luz infravermelha *off* e *on*.

Condição de Iluminação	$m_{\alpha,\beta,\gamma}^{cyc}$	$g(\varepsilon_F)$	$m^{cyc}g(\varepsilon_F)/2$
Escuro	$(0,041 \pm 0,001)_\alpha$	28 ± 1	0,58
	$(0,034 \pm 0,001)_\beta$	34 ± 1	
Luz Infravermelha	$(0,046 \pm 0,002)_\alpha$	25 ± 1	
	$(0,040 \pm 0,007)_\beta$	29 ± 5	
	$(0,061 \pm 0,019)_\gamma$	19 ± 6	

A análise das medidas de magnetorresistência para o poço do tipo- p de PbTe:BaF₂ proporcionou a compreensão dos mecanismos de transporte por multivales na superfície de Fermi. De acordo com cálculo dos níveis de energia confinado no poço (Equação 4.1, Figura 4.5), em ambas as condições de iluminação há contribuição para o transporte eletrônico de dois vales longitudinais e um oblíquo, embora não se tenha observado um terceiro pico na análise de FFT da Figura 4.3(b) (luz IR *off*). A presença de luz (*on*) adicionou a contribuição de um terceiro vale longitudinal (Figura 4.5). Além dessas considerações, a partir das análises das curvas de FFT, também pôde-se verificar a presença do efeito Rashba no poço do PbTe com um alto valor de energia dado por 8,4 meV. Esse efeito se mostrou responsável pela existência da componente oscilatória do pico β em ambas condições de iluminação.

Esses resultados das análises dos efeitos de magneto transporte do poço quântico de PbTe:BaF₂ foram publicados na revista *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* com título *Shubnikov - de Haas oscillations in p-type PbTe quantum well under dark and illuminated conditions* em 2021. Link de acesso: <https://doi.org/10.1016/j.physe.2020.114575>

4.2 Heteroestrutura SnTe/Sn_(1-x)Eu_xTe

Nesta segunda seção serão discutidas as análises para a heteroestrutura de isolante topológico de SnTe/Sn_(1-x)Eu_xTe. Do mesmo modo, como na análise do poço quântico de PbTe dopado com BaF₂, também, realizamos medidas de efeito Hall e de magnetorresistência. Nessa última medição investigamos o efeito da incidência luminosa de luz infravermelha (IR) sobre a amostra.

Na Figura 4.10(a) a resistência longitudinal (R_{xx}) decresce linearmente quando a temperatura varia de 300 K até 1,9 K, representando um comportamento metálico da heteroestruturas SnTe/Sn_(1-x)Eu_xTe. Um esquema representativo da heteroestrutura é apresentado esquematizada no *inset* que amostra as camadas crescidas sobre o substrato de BaF₂ clivado na direção [111] e indicando o campo magnético aplicado paralelamente a essa direção. Os parâmetros de concentração de portadores e mobilidade eletrônica do transporte elétrico são obtidos por meio de medições de efeito Hall na faixa entre 1,9 K e 50 K. Na Figura 4.10(b) observa-se a diminuição na concentração de portadores até 20 K, seguido de uma saturação e aumento na geração de portadores de carga abaixo de 6 K. Para a mobilidade, na Figura 4.10(c), há um aumento linear até 20 K com saturação das cargas geradas e para $T < 4$ K crescem abruptamente.

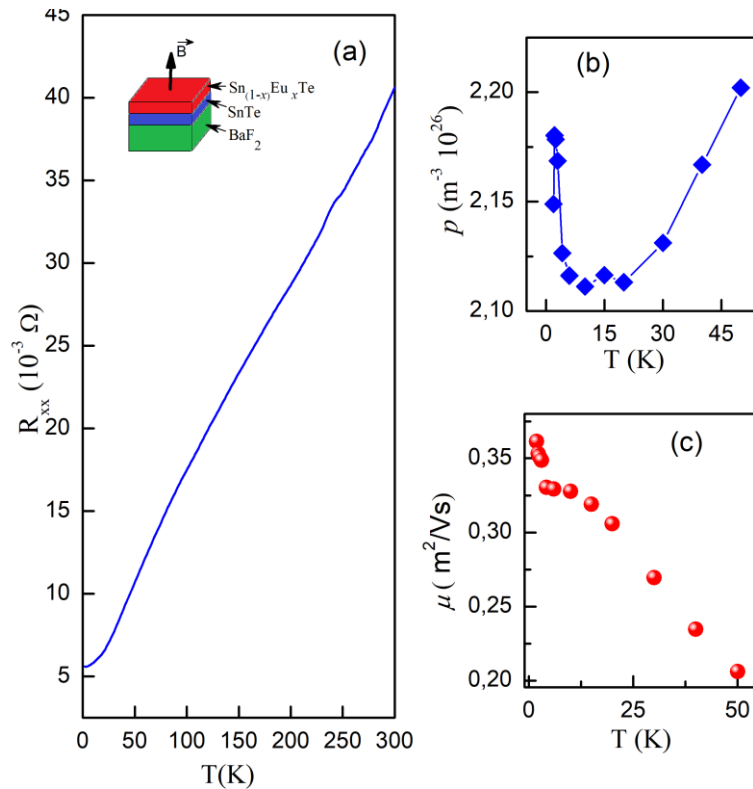


FIG.4.10. (a) Resistência longitudinal (R_{xx}) na faixa de temperatura entre 1,9 e 300 K. No *inset* está esquematizado as camadas de crescimento da heteroestruturas SnTe/Sn_(1-x)Eu_xTe sobre o substrato de BaF₂ clivado na direção [111], perpendicular a aplicação do campo magnético \mathbf{B} . A concentração de portadores, em (b), e a mobilidade eletrônica (c) são analisadas entre 1,9 e 50 K.

A Figura 4.11(a) apresenta em 4,2 K resistência longitudinal (R_{xx}) na presença de campo magnético até 9 T. Em campos mais baixos como observado em 0,6 T (indicado pela seta) há o aumento da resistência com diminuição do campo magnético aplicado, correspondendo ao efeito de localização fraca^{72,73}. Extraindo a curva da segunda derivada de R_{xx} verifica-se um padrão de batimento, Figura 4.11(b). A presença das oscilações de SdH a partir de 5 T indica que a mobilidade dessa heteroestrutura é alta. Nas medições do efeito Hall (Figura.4.10(c)) os valores dessas mobilidades foram obtidos acima de 3000 cm²(Vs)⁻¹ abaixo de 20 K. A condição para que ocorram oscilações quânticas é que $\mu B > 1$, logo, neste caso, deveríamos ver oscilações para $B > 3$ T, o que está de acordo com o dado experimental da figura 4.11(b).

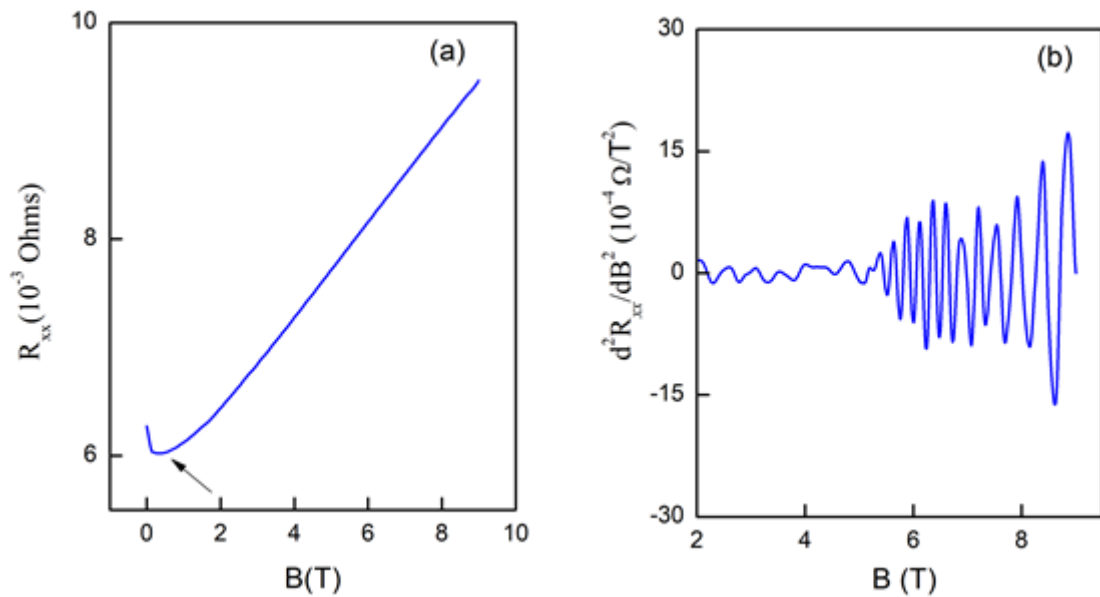


FIG.4.11. (a) Resistência longitudinal (R_{xx}) em função do campo magnético até 9 T em 4,2 K. (b) Segunda derivada de R_{xx} em função do campo magnético.

Para analisar em detalhes as oscilações de SdH, apresentadas na Figura 4.11(b) foram realizadas medidas de magnetorresistência na faixa de 1,9-30 K. Na Figura 4.12(a), as amplitudes das derivadas em função de $1/B$ são amortecidas com o aumento da

temperatura. Para temperaturas maiores que 30 K, as oscilações são suprimidas pela energia térmica. As análises de FFT realizadas para as oscilações da Figura 4.12(a) estão apresentadas na Figura 4.12(b). Para as transformadas de Fourier foi utilizado o intervalo entre $0,11 \text{ T}^{-1}$ (9 T) e $0,18 \text{ T}^{-1}$ (5,5 T), permitindo encontrar duas frequências f_α e f_β dadas por 155 T e 187 T, respectivamente. É possível observar que as amplitudes dos picos são atenuadas com o aumento da temperatura, obedecendo à componente termodinâmica da expressão de Lifshitz-Kosevich (LK) (Equação 2.7). Os demais picos não seguem uma dependência coerente com a temperatura e podem ser descartados como efeito do procedimento computacional.

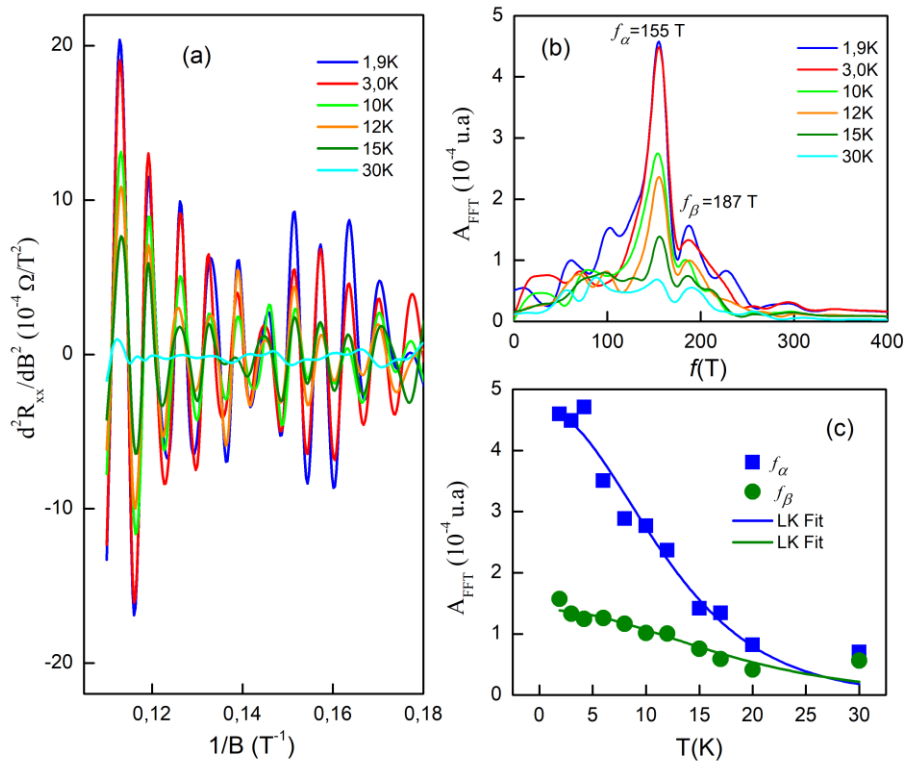


FIG.4.12. (a) Derivada segunda da resistência longitudinal (R_{xx}) em função do inverso do campo magnético e (b) as curvas das amplitudes da análise de FFT em razão das frequências de oscilação na faixa de temperatura de 1,9 – 30 K. Em (c) estão as amplitudes do FFT para f_α (quadrados azuis) e f_β (círculos verdes) e os respectivos ajustes LK (Equação 2.7) representados pelas linhas sólidas.

Para o cálculo da concentração de portadores na heteroestrutura SnTe/Sn $_{(1-x)}$ Eu $_x$ Te foi utilizada a relação $p_{3D} = k_{Fa}^2 k_{Fb} / 3\pi^2$ levando em conta a natureza tridimensional do sistema. A anisotropia é considerada levando em conta a relação entre os números de onda em que $k_{Fb}/k_{Fa} = 2,9$. Essa razão entre os vetores de onda de Fermi é retirado do

fator de anisotropia do volume do elipsoide de Fermi para o SnTe como descrito no capítulo de revisão bibliográfica (Figura 2.7, seção 2.2.1).²³ Os índices a e b indicam os semieixos menor e maior, respectivamente do elipsoide longitudinal visto anteriormente na Figura 2.7. Sendo vetor de onda de Fermi $k_{Fa}^2 = 2ef/\hbar$ e substituindo em p_{3D} , obtêm-se $p_{3D} = (2.9/3\pi^2)(2e/\hbar)^{3/2}f^{3/2}$.

Com isso, as concentrações de portadores para os picos da Figura 4.12(b) calculados foram $p_{3D}(f_\alpha) = 3,2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e $p_{3D}(f_\beta) = 4,2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. A concentração total de portadores dada por $p_{SdH} = p_{3D}(f_\alpha) + p_{3D}(f_\beta) + 3p_{3D}(f_o)$ resulta em $3,6 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. Esse valor está na mesma ordem dos valores de concentração encontrados pela medida Hall (Figura 4.10(b)) e, refazendo essas medidas Hall obteve-se o valor $p_{Hall} = (3.32 \pm 0.01) \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, para temperatura de 4,2 K. Esse último valor p_{Hall} está ainda mais próximo do valor da concentração para o volume dos elipsoides da superfície de Fermi.

O fator multiplicativo 3 para vale oblíquo na expressão para p_{SdH} é devido a presença de três vales oblíquos na direção [111]. Na literatura foi verificado que a razão entre as áreas de secção transversal do vale oblíquo e longitudinal nas estruturas de filmes epitaxiais de SnTe²³ é da ordem de 2,1. Essa razão, portanto, deve indicar que a frequência do vale oblíquo deve corresponder a $f_o = 2,1f_\alpha$. Embora f_o não tenha sido observado na análise de FFT (Figura 4.12 (b)), se o considerarmos no cálculo de p_{SdH} , o valor da concentração total é próximo do encontrado nas medidas Hall ($p_{Hall} = 3,32 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$).

A Figura 4.12(c) mostra os pontos referentes as amplitudes máximas dos valores de f_α e f_β em função da temperatura na faixa de 1.9 – 30 K. Utilizando a Equação de LK (Equação 2.7), é possível realizar um ajuste para as duas frequências, f_α e f_β , e obter as massas ciclotrônicas $m_\alpha^{cyc} = (0,089 \pm 0,005)m_e$ e $m_\beta^{cyc} = (0,061 \pm 0,006)m_e$ (ver linhas sólidas na Figura 4.12(c)). Esses valores são muito próximos dos valores encontrados na literatura para o SnTe,^{23,74,75} indicando que a dopagem com Eu na camada mais externa não altera significativamente os valores de massa efetiva.

Outro fator que pode ser investigado no comportamento das oscilações SdH da Figura 4.12(a) é divisão dos níveis de Landau em subníveis de estados eletrônicos de *spin* pelo Efeito Zeeman, que podem gerar a presença de harmônicos nas curvas das análises de FFT.^{76,77} Com isso, foram calculadas energia do efeito Zeeman (ϵ_Z) sobre o sistema e

comparadas a energia de separação dos níveis de Landau (Δ_{LL}). A energia de separação Zeeman pode ser calculada pela expressão $\varepsilon_Z = g\mu_B B_0$, onde μ_B é o magnéton de Bohr e g é o fator de Landé.

A Figura 4.13(a) representa as curvas do polinômio de terceiro grau extraídos das curvas de resistência longitudinal (R_{xx}) para uma faixa de temperatura (1,9 K - 30 K) em função do campo magnético a partir de 6 T. Indicado pela seta estão as amplitudes das resistências em 8,6 T. Na Figura 4.13(b), essas amplitudes foram ajustadas à expressão da Equação 2.7 substituindo a massa efetiva ciclotrônica $m^{cyc} = e\hbar B/\Delta_{LL}$, de modo que fosse extraído a separação entre os níveis de Landau (Δ_{LL}) para posterior cálculo das energias de Zeeman ($\varepsilon_Z = g\mu_B B$) (Equação 4.2). O valor resultante de Δ_{LL} foi de $(12,5 \pm 1)meV$, correspondendo a m^{cyc} de $0,08m_e$. A energia $\hbar\omega_c$ para esse valor de massa $m^{cyc} = 0,08m_e$ corresponde a $12,44 meV$ em $B = 8,6 T$.

$$A_{FFT} = A_0 \left(\frac{2\pi^2 k_B (e\hbar B/\Delta_{LL}) T}{e\hbar \bar{B}} \right) / \sinh \left(\frac{2\pi^2 k_B (e\hbar B/\Delta_{LL}) T}{e\hbar \bar{B}} \right) \quad 4.2$$

Para o cálculo das energias de Zeeman foram estimados os valores dos fatores g de Landé utilizando a Equação 2.19 para a curva de derivada segunda da resistência longitudinal (R_{xx}) em função do inverso do campo magnético em 4,2 K. Dessa maneira, dos dados experimentais foram calculados os valores de g para as respectivas massas dos picos α e β da Figura 4.12(b), $g_\alpha = (12 \pm 0,7)meV$ e $g_\beta = (17,3 \pm 0,1)meV$, obtendo as energias de Zeeman $\varepsilon_{z,\alpha} = 6 meV$ e $\varepsilon_{z,\beta} = 8,6 meV$. Os baixos valores dessas energias, comparado a Δ_{LL} indicam que não há contribuição pelo efeito Zeeman e, caso houvesse deveriam ser apresentados harmônicos na Figura 4.12(b). Ainda, os fatores g de Landé estimados são menores que os valores encontrados na literatura como $g \approx 30 - 57$ ^{78,79}.

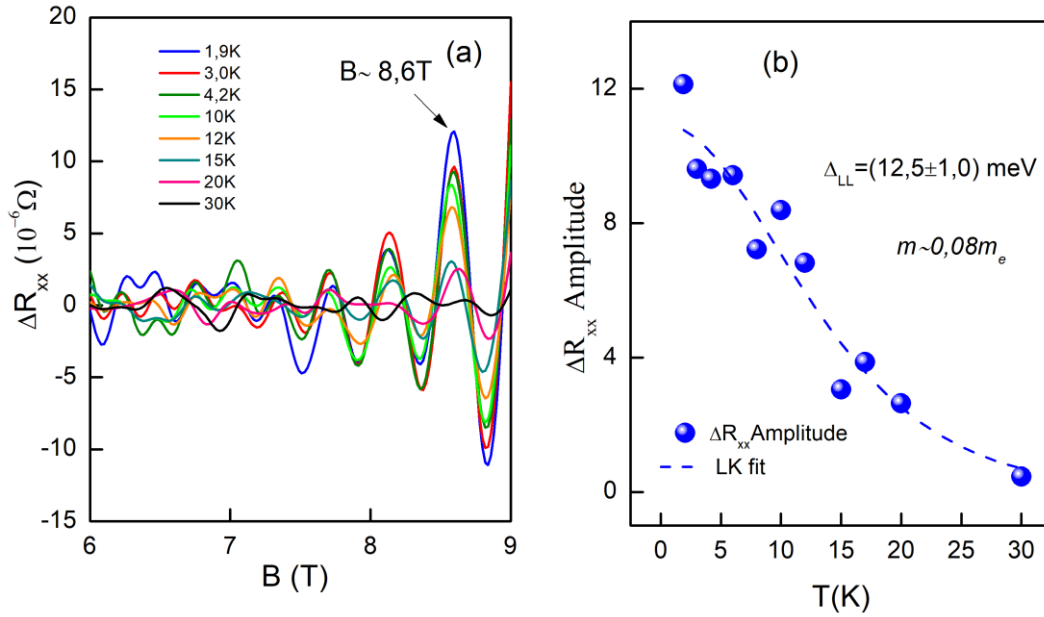


FIG.4.13. (a) Polinômio de terceiro grau retirado das curvas de magnetorresistência para temperaturas de 1,9 K a 30 K, em função do campo magnético externo aplicado. A seta indica o campo magnético externo, em que as amplitudes seguem a componente termodinâmica do ajuste LK. Essas amplitudes são evidenciadas em (b) e ajustadas pela Equação 2.7.

A princípio a contribuição para os parâmetros das componentes de oscilação SdH são de ambas as camadas da heteroestrutura, mas até o momento, não foi identificada a contribuição individual de cada camada. A fim de investigar o transporte separadamente através das camadas de SnTe e $\text{Sn}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$ foram realizadas medidas de magnetorresistência com incidência de luz sob a superfície da amostra. A exposição a luz deve promover a geração portadores de carga na camada em que há penetração da radiação. Na Figura 4.14(a) está esquematizada a profundidade de penetração da radiação infravermelha indicada por γ , comparada a espessura da heteroestrutura d de $5,11\mu\text{m}$. O comprimento de penetração da luz no material (γ) é dado pela Equação 3.2 (seção 3.3), com energia de $1,3\text{ eV}$ maior que o gap de energia de $0,19\text{ eV}$ do $\text{Sn}_{(1-x)}\text{Eu}_x\text{Te}$.

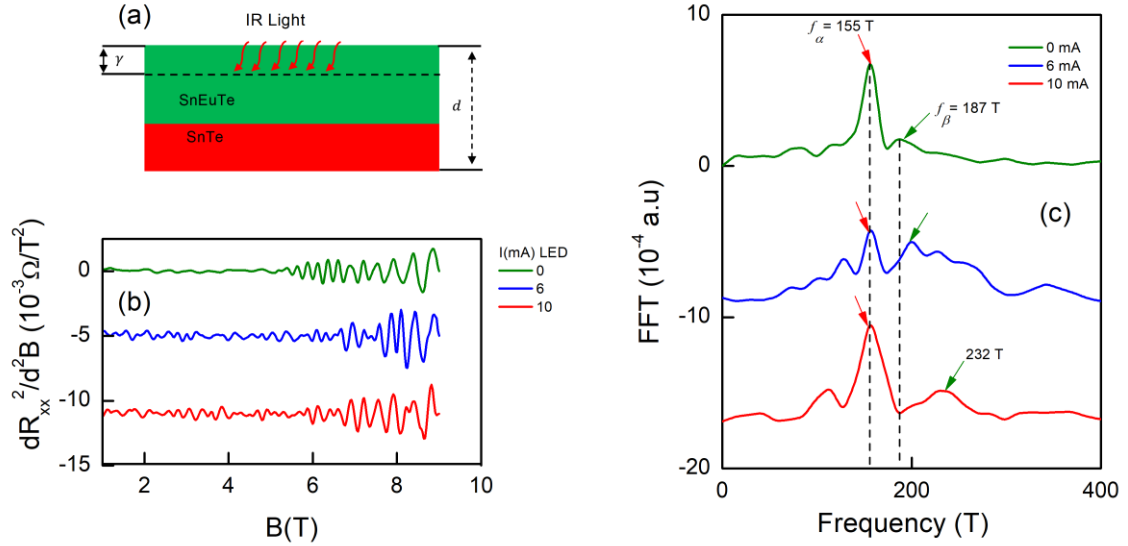


FIG.4.14. (a) Esquema representativo da penetração da radiação infravermelha na heteroestrutura SnTe/Sn_(1-x)Eu_xTe. Em (b) as curvas das segundas derivadas da resistência longitudinal em função do campo magnético são atenuadas com a incidência de luz em diferentes intensidades de corrente aplicada no led emissor de luz infravermelha (IR) em 4,2 K. As análises de FFT dessas derivadas são apresentadas em (c).

O comprimento γ resultante para essa heteroestrutura foi de 3.8nm para λ de 940nm . Assim a fotogeração de portadores ocorre apenas do Sn_(1-x)Eu_xTe já que a espessura dessa camada é de $3.1\ \mu\text{m}$. Na Figura 4.14(b) as oscilações presentes nas segundas derivadas da resistência longitudinal têm a resolução das curvas mal definidas quando se aumenta a intensidade da corrente aplicada no led emissor de luz IR. Na análise de FFT dessas oscilações, Figura 4.14(c), a frequência f_α não depende da variação da intensidade da luz incidente, enquanto f_β apresenta um deslocamento para a direita até 232 T, com a aplicação de 10 mA no led IR. Isso indica que a componente de frequência f_β é originada da camada de Sn_(1-x)Eu_xTe, uma vez que somente esta camada está sendo penetrada pela luz. Com isso, pode-se concluir que f_α é originada da camada do SnTe, visto que não se modifica com incidência de luz. Ainda, estudos da propriedade de magneto-transporte em filmes epitaxiais de SnTe verificaram o transporte pelo vale longitudinal com uma componente oscilatória dada por 154 T nas análises de FFT que é um valor muito próximo do encontrado neste trabalho.²³

Fazendo uso a mesma expressão utilizada para o cálculo da concentração de portadores no caso do poços quântico, analisado na secção anterior, ou seja, ($p_{3D} = k_{Fa}^2 k_{Fb} / 3\pi^2$) obtemos $p_{3D}(f_\alpha) = 3,2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e $p_{3D}(f_\beta) = 5,8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

com a aplicação de 10 mA no led IR. O valor para o pico β é maior comparado na condição de escuro com $p_{3D}(f_{\beta}) = 4,2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Como para α não houve mudança na frequência, em ambas condições de *on* e *off* a concentração de portadores permanece constante. Ainda, das medidas de efeito Hall em 4,2 K com luz (10 mA no led IR) obtemos para concentração $p_{Hall}^{on} = 3,4 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ e sem iluminação esse valor é dado por $p_{Hall}^{off} = 3,2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

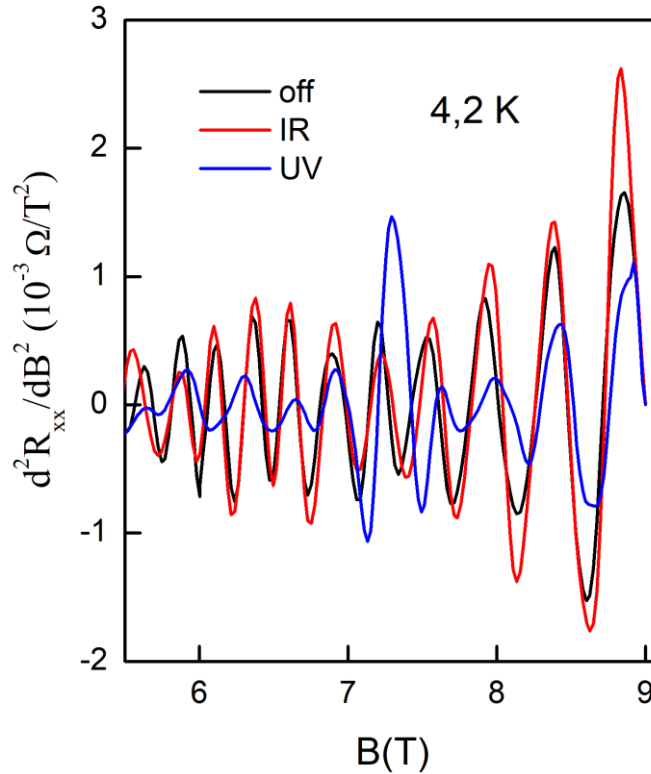


FIG.4.15. Curvas de derivada segunda das resistências longitudinais em função do campo magnético de 5,5 T até 9 T para condições de escuro (*off*) e iluminação com led emissor de luz infravermelha (IR) e ultravioleta (UV) na temperatura de 4,2 K.

Na análise com aplicação de luz na heteroestrutura também foi aplicado led emissor no espectro do ultravioleta. Com a incidência de uma radiação com comprimentos de onda menor espera-se a intensificação do efeito das oscilações SdH, pois seria transferido aos elétrons da heteroestrutura maior energia e, portanto, nas medidas de magnetorresistência a maior condutividade seria indicada nas curvas da segunda derivada de R_{xx} com maiores amplitudes em baixas temperaturas⁸⁰. Na Figura 4.15 é possível verificar que houve o efeito contrário, visto que as oscilações, com iluminação UV (395 nm, 32 mW/cm² e energia de 3,1 eV), apresentaram amplitudes menos intensas se comparadas com as curvas com o led *off*. As oscilações das derivadas

segundas em função de campos acima de 5,5 T permanecem presentes, com os picos nas mesmas posições, para as duas condições de iluminação com 2 mA de corrente aplicado nos led UV e IR, além da condição de escuro com o led *off*.

O estudo da origem das oscilações SdH auxiliam na investigação das propriedades de magneto-transporte e, também pode indicar a contribuição de transporte por estados de superfície (TSS) ou de *bulk*. A fim de verificar qual desses estados estão presentes no transporte eletrônico da heteroestrutura foram realizadas medidas de magnetorresistência variando o ângulo de inclinação da amostra com relação ao campo magnético aplicado na direção [111]. Na Figura 4.16(a) as posições dos picos máximos das oscilações da segunda derivada são preservadas da mudança angular com aplicação do campo (linhas verticais pontilhadas). Este comportamento pode indicar transporte por estados topológicos de superfície^{42,74}. Em conformidade com esse resultado, na Figura 4.16(b) a dependência angular ($1/\cos \theta$) das amplitudes das duas frequências principais (f_α e f_β) confirmam o transporte bidimensional (2D). Entretanto, os dois comportamentos observados nas Figuras 4.16(a-b) não são suficientes para confirmar a existência de transporte elétrico por estados topológicos de superfície. Isso se deve a natureza da geometria da superfície de Fermi do SnTe, de forma que as frequências obtidas do FFT também devem seguir o comportamento $f \sim 1/\cos \theta$. O *inset* da Figura 4.16(b) mostra como as áreas da seção transversal da superfície de Fermi aumentam, proporcionalmente ao aumento do ângulo entre o campo magnético e a direção [111] (*inset* Figura 4.16(b))⁷⁶.

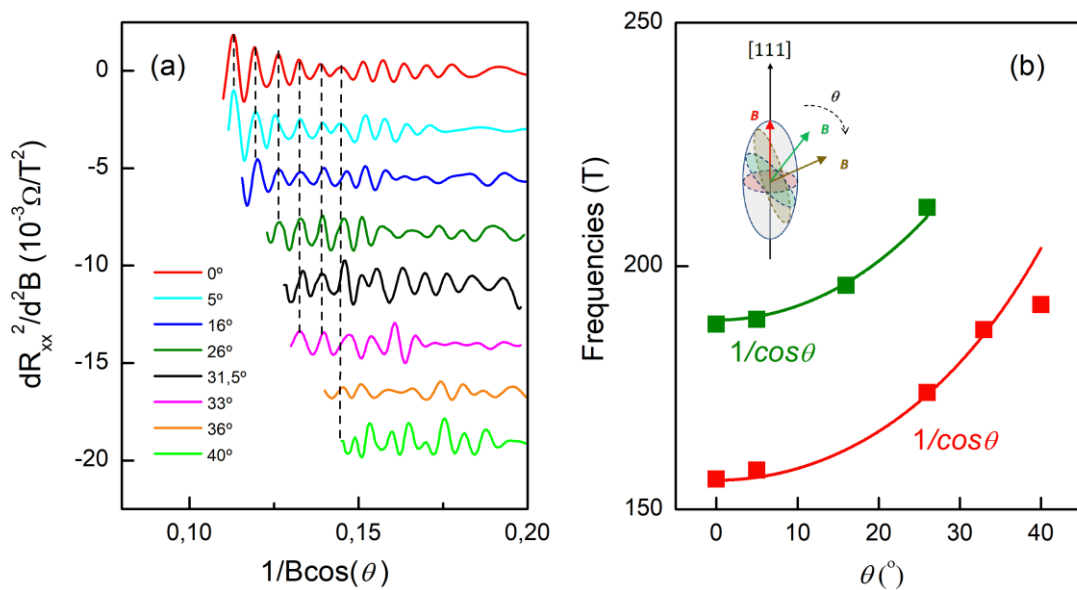


FIG.4.16. (a) Derivada segunda da resistência longitudinal para vários ângulos de inclinação (0° até 40°) em função do inverso do campo magnético ($1/B \cos \theta$) na

temperatura de 4,2 K. As amplitudes dos picos α e β das análises de FFT para as oscilações em (a) são ajustadas pela função $1/\cos \theta$ (linhas sólidas). O *inset* em (b) representa o elipsoide do vale longitudinal na direção [111], juntamente com as áreas seccionadas perpendiculares a aplicação do campo magnético.

Também é possível analisar se haveria a presença de estados topológicos de superfície por meio da análise do parâmetro de fase $\varphi = \beta - \delta$ do ajuste Lifshitz-Kosevich (LK) (Equação 2.6), assim como calcular outros parâmetros com esse ajuste, como a temperatura de Dingle (T_D) e a mobilidade eletrônica. Nas Figuras 4.17(a-b) as oscilações em linha sólida são o ajuste LK (Equação 2.6) simulado para os dados experimentais para led *off* e *on* com luz infravermelha. Utilizando as massas ciclotrônicas efetivas para o caso do led *off* (Figura 4.14(c)) e, considerando a soma de duas componentes oscilatórias, com suas respectivas frequências, temperaturas de Dingle e parâmetros de fase, as frequências obtidas foram $f_1 = 149$ T e $f_2 = 153$ T. A segunda frequência tem valor mais próximo do valor de f_α retirado das curvas de FFT (Figura 4.14(b)), indicando que f_β não pareceu contribuir para as oscilações.

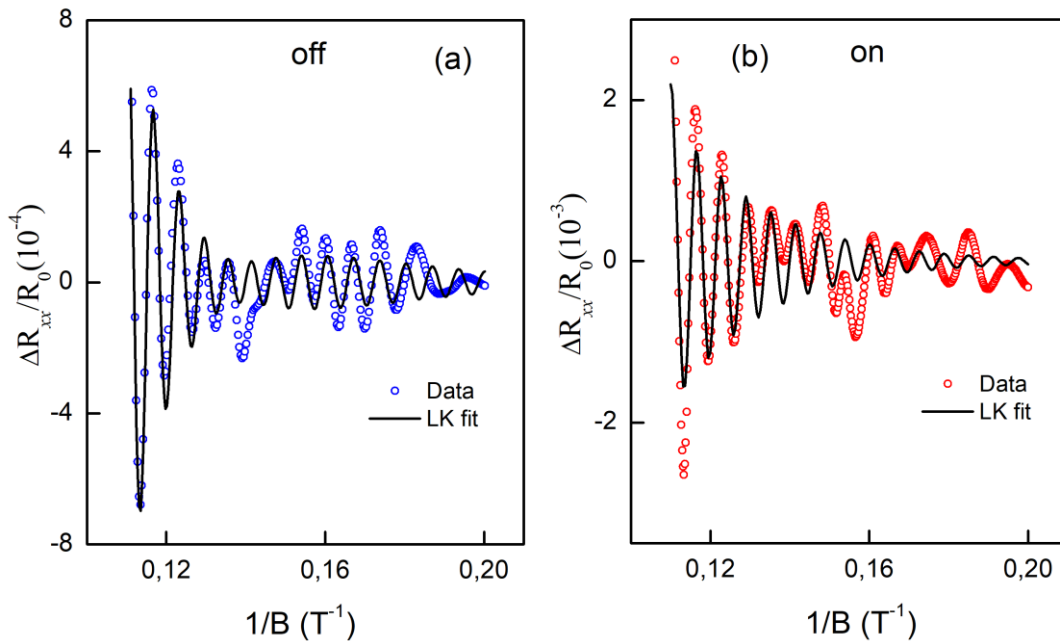


FIG.4.17. Oscilações da resistência longitudinal normalizada $\Delta R_{xx}/R_0$ do polinômio de terceira ordem retirado das curvas de magnetorresistência em 4,2 K para condições de escuro (a) (círculos azuis) e com iluminação infravermelha (círculos em vermelho) (b). As linhas sólidas representam o ajuste Lifshitz-Kosevich (LK) da Equação 4.8.

Do ajuste LK para condição de escuro (Figura 4.17(a)) as duas frequências encontradas f_1 e f_2 contribuíram para o cálculo das temperaturas de Dingle e dos valores das fases: $T_{D1} = 32,8$ K e $T_{D2} = 31,7$ K; $\beta_1 - \delta = 0,85 \pm 0,01$ e $\beta_2 - \delta = 0,80 \pm 0,01$. Se substituirmos o valor de δ por $\pm 1/8$, os valores de β_1 e β_2 são obtidos valores de β mais próximos de 1, que corresponde ao transporte por Fémions triviais, ou seja contribuição para o transporte por estados de *bulk*. Da estimativa dessas fases β pode-se afirmar a presença de Fémions triviais e, ainda, das temperaturas de Dingle obtêm-se as respectivas mobilidades $\mu_1 = 1512 \text{ cm}^2(\text{Vs})^{-1}$ e $\mu_2 = 1567,7 \text{ cm}^2(\text{Vs})^{-1}$.

Para o caso com aplicação de 2 mA no led IR (Figura 4.17(b)), o melhor ajuste LK teve contribuição de apenas uma frequência $f_{on} \sim 160,5$ T. A fase φ , temperatura de Dingle, mobilidade, além do valor da massa ciclotrônica efetiva foram dados por $\varphi_{on} = (0,796 \pm 0,005)$, também indicando valores de β mais próximos do esperado para transporte por *bulk*. Para outros parâmetros foram calculados: $T_{Don} = 31,9$ K, $\mu_{on} = 1558,4 \text{ cm}^2(\text{Vs})^{-1}$, $m_{on}^{cyc} = (0,082 \pm 0,001)m_e$.

A frequência $f_2 = 153$ T, para quando a luz é *off*, tem valor mais próxima da frequência encontrada na análise de FFT (Figura 4.12 (b)) de $f_\alpha = 155$ T, enquanto a frequência $f_1 = 149$ calculada do ajuste LK (Equação 2.6) não aparece nas curvas do FF da Figura 4.12 (b). Isso deve indicar que essas frequências são originadas do *splitting* Rashba do vale longitudinal. Com isso, foram calculados os vetores de onda de Fermi para f_1 e f_2 dados por: $k_{F1} = 0,067 \text{ \AA}^{-1}$ e $k_{F2} = 0,068 \text{ \AA}^{-1}$. Considerando $\Delta k_R \sim 0,001 \text{ \AA}^{-1}$, a energia de Rashba ($E_R = \hbar^2 \Delta k_R^2 / 2m_c$) calculada foi de $0,17 \text{ meV}$.

Das análises das medidas de magnetorresistência para a heteroestrutura SnTe/Sn_(1-x)Eu_xTe foi observado o transporte eletrônico ocorre por contribuição de estados de *bulk*. Das oscilações SdH não se pode observar transporte por multivales, tendo aparecido a contribuição nas análises de FFT apenas pelo vale longitudinal. E a partir das frequências retiradas do ajuste computacional pode-se concluir que o pico β observado na Figura 4.12 (b) não contribuiu para gerar o padrão de batimentos. Além disso, os parâmetros como mobilidade e temperatura Dingle calculados estão próximos dos valores para SnTe na literatura^{32,74}

Esses resultados das análises dos efeitos de magneto transporte na heteroestrutura de SnTe/Sn_(1-x)Eu_xTe foram publicados na revista Physical Review B com título Investigation of Shubnikov–de Haas oscillations in a crystalline topological insulator

SnTe/Sn $_{1-x}$ EuxTe heterostructure em 2021. Link de acesso:
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.125203>

5 Conclusão

Nas análises do poço quântico do tipo-*p* de PbTe:BaF₂/Pb_(1-x)Eu_xTe e da heteroestrutura de SnTe/ Sn_(1-x)Eu_xTe foram verificadas a presença das oscilações de Shubnikov-de Haas nas curvas das segundas derivadas da resistência longitudinal (R_{xx}). Essas medidas de magnetorresistência foram realizadas com condição de escuro e incidência de luz IR. A partir dessas oscilações foram identificadas por análises de FFT as componentes oscilatórias, assim como os valores das massas ciclotrônicas efetivas e concentração de portadores.

Para o poço quântico de PbTe:BaF₂ os picos α e β , presente nas análises de FFT, indicaram ser devido a presença do efeito Rashba, pelo *splitting* do vale longitudinal. Enquanto o terceiro pico γ , para quando há incidência de luz IR se mostrou ser contribuição do vale oblíquo. Embora, o transporte pelo vale oblíquo não tenha sido observado nas análises de FFT do poço de PbTe, nos cálculos das energias de confinamento para o poço pôde-se verificar que para ambas as condições de iluminação há transporte por dois vales longitudinais e um oblíquo. A adição de um terceiro vale longitudinal ocorreu apenas quando a amostra foi exposta a luz IR.

Nas medidas de magnetotransporte para a heteroestrutura SnTe/ Sn_(1-x)Eu_xTe as curvas de FFT apresentaram duas frequências α e β . Dentre tais componentes oscilatórias apenas a frequência α pode ser confirmada pelo ajuste Lifshitz-Kosevich (LK) da Equação 2.6 como causa das oscilações SdH, visto no ajuste teórico não foi obtido valores semelhantes ao da frequência β . Ainda, com método computacional verificou que o transporte ocorre por estados de *bulk*. Embora o SnTe seja isolante topológico cristalino, esses materiais são fortemente semicondutores do tipo-*p* e, com isso, o nível da energia de Fermi se localiza dentro da banda de valência, dificultando observar estados de superfície (TSS).

Essas medidas de magnetotransporte adicionaram informações relevantes no estudo das propriedades elétricas dos semicondutores IV-VI, tendo sido apresentado o transporte por multivales no poço quântico de PbTe:BaF₂, além dos altos valores de mobilidade encontrados das medidas de efeito Hall para a heteroestrutura SnTe/ Sn_(1-x)Eu_xTe, que permitiram observar as oscilações Shubnikov-de Haas.

6 Referências

1. Okoye, C. M. I. Electronic and optical properties of SnTe and GeTe. *J. Phys. Condens. Matter* **14**, 8625–8637 (2002).
2. Chitta, V. A. *et al.* Multivalley transport and the integer quantum Hall effect in a PbTe quantum well. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **72**, 1–6 (2005).
3. Hong, R. Di, Dow, J. D., Sankey, O. F. & Allgaier, R. S. Resonant impurity scattering contribution to the mobility of Pb 1-xSnxTe. *Appl. Phys. Lett.* **2696**, 2696 (1995).
4. Springholz, G. & Bauer, G. Molecular beam epitaxy of IV-VI semiconductor hetero- and nano-structures. *Phys. Status Solidi Basic Res.* **244**, 2752–2767 (2007).
5. Antunez, P. D., Buckley, J. J. & Brutchey, R. L. Tin and germanium monochalcogenide IV–VI semiconductor nanocrystals for use in solar cells. *Nanoscale* **3**, 2399–2411 (2011).
6. Shen, H., Liu, J., Chang, K. & Fu, L. In-Plane Ferroelectric Tunnel Junction. *Phys. Rev. Appl.* **11**, 1 (2019).
7. Hsieh, T. H. *et al.* Topological crystalline insulators in the SnTe material class. *Nat. Commun.* **3**, (2012).
8. Zou, K. *et al.* Revealing surface-state transport in ultrathin topological crystalline insulator SnTe films. *APL Mater.* **7**, (2019).
9. Ma, Y., Kou, L., Li, X., Dai, Y. & Heine, T. Room temperature quantum spin Hall states in two-dimensional crystals composed of pentagonal rings and their quantum wells. *NPG Asia Mater.* **8**, 1–7 (2016).
10. Peres, M. L. *et al.* Experimental investigation of spin-orbit coupling in n-type PbTe quantum wells. *J. Appl. Phys.* **115**, 1–6 (2014).
11. Mengui, U. . A. *et al.* Electrical properties of PbTe doped with BaF2. *J. Appl. Phys.* **105**, (2009).
12. Partin, D. L. Lead Salt Quantum Effect Structures. *IEEE J. Quantum Electron.* **24**, 1716–1726 (1988).
13. Springholz, G. *et al.* Modulation doping and observation of the integral quantum Hall effect in PbTe/Pb1-xEuxTe multiquantum wells. *Appl. Phys. Lett.* **63**, 2908–2910 (1993).
14. Khodr, M., Chakraborty, M. & McCann, P. J. PbSnSe/PbSrSe quantum well materials for thermophotovoltaic devices. *AIP Adv.* **9**, (2019).
15. Buczko, R. & Cywiński, Å. PbTe/PbSnTe heterostructures as analogs of topological insulators. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **85**, 1–6 (2012).
16. Yang, G., Liu, J., Fu, L., Duan, W. & Liu, C. Weak topological insulators in PbTe/SnTe superlattices. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **89**, 1–7 (2014).
17. Bisharat, D. J., Davis, R. J., Zhou, Y., Bandaru, P. R. & Sevenpiper, D. F. Photonic topological insulators a beginner’s introduction. *IEEE Antennas Propag.* **63**, 112–124 (2021).
18. Kane, C. & Moore, J. Topological insulators. *Phys. World* **24**, 32–36 (2011).
19. Moore, J. E. The birth of topological insulators. *Nature* **464**, 194–198 (2010).

20. Bernevig, B. A., Hughes, T. L. & Shou-Cheng Zhang. *Science*. *Science (80-.)*. **314**, 1757–1761 (2006).
21. Hsieh, D. *et al.* A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase. *Nature* **452**, 970–974 (2008).
22. Ando, Y. Topological insulator materials. *J. Phys. Soc. Japan* **82**, 1–32 (2013).
23. Okazaki, A. K. *et al.* Shubnikov-de Haas oscillations in topological crystalline insulator SnTe(111) epitaxial films. *Phys. Rev. B* **98**, 1–8 (2018).
24. Wang, W. *et al.* Large Linear Magnetoresistance and Shubnikov-de Haas Oscillations in Single Crystals of YPdBi Heusler Topological. *Sci. Rep.* **3**, 1–7 (2013).
25. Shen, J. & Cha, J. J. *Nanoscale*. *Nanoscale* **20** (2014) doi:10.1039/C4NR05124F.
26. Manasreh, O. *Semiconductors Heterojunctions and Nanostructures*. (McGraw-Hill Companies, 2005).
27. Hamaguchi, C. *Basic Semiconductor Physics. Lecture Notes in Physics* vol. 773 (Springer, 2017).
28. Potts, A. *et al.* Magnetization studies of Landau level broadening in two-dimensional electron system. *J. Phys. Condens. Matter* **8**, 5189–5207 (1996).
29. Knobel, R. & Samarth, N. Measurements of Landau-level crossings and extended states in magnetic two-dimensional electron gases. *Phys. Rev. B* **65**, 1–8 (2002).
30. Ren, Z., Taskin, A. A., Sasaki, S., Segawa, K. & Ando, Y. Large bulk resistivity and surface quantum oscillations in the topological insulator Bi₂Te₂Se. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **82**, 1–4 (2010).
31. Liu, X. *et al.* Quantum Transport of the 2D Surface State in a Nonsymmorphic Semimetal. *Nano Lett.* (2021) doi:10.1021/acs.nanolett.0c04946.
32. Ishida, A. *et al.* Electrical and optical properties of SnEuTe and SnSrTe films. *J. Appl. Phys.* **107**, (2010).
33. He, L. P. *et al.* Quantum transport evidence for the three-dimensional dirac semimetal phase in Cd₃As₂. *Phys. Rev. Lett.* **113**, 1–5 (2014).
34. Ganichev, S. D. *et al.* Experimental Separation of Rashba and Dresselhaus Spin Splittings in Semiconductor Quantum Wells. 1–4 (2004) doi:10.1103/PhysRevLett.92.256601.
35. Manchon, A., Koo, H. C., Nitta, J., Frolov, S. M. & Duine, R. A. New perspectives for Rashba spin-orbit coupling. *Nat. Mater.* **14**, 871–882 (2015).
36. Feng, Y. *et al.* Rashba-like spin splitting along three momentum directions in trigonal layered PtBi₂. *Nat. Commun.* 1–8 (2019) doi:10.1038/s41467-019-12805-2.
37. Jin, S. *et al.* Large Rashba splitting in highly asymmetric CdTe / PbTe / PbSrTe quantum well structures Large Rashba splitting in highly asymmetric CdTe / PbTe / PbSrTe quantum. *Appl. Phys. Lett.* **95**, (2009).
38. Rechciński, R. *et al.* Structure Inversion Asymmetry and Rashba Effect in Quantum Confined Topological Crystalline Insulator Heterostructures. *Adv. Funct. Mater.* **31**, 1–13 (2021).
39. Burke, J. R., Houston, B. & Savage, H. T. Anisotropy of the Fermi surface of p-type PbTe.

- Phys. Rev. B* **2**, 1977–1988 (1970).
40. Xu, S. Y. *et al.* Observation of a topological crystalline insulator phase and topological phase transition in Pb_{1-x}Sn_xTe. *Nat. Commun.* **3**, (2012).
 41. Dziawa, P. *et al.* Topological crystalline insulator states in Pb_{1-x}Sn_xSe. *Nat. Mater.* **11**, 1023–1027 (2012).
 42. Safdar, M. *et al.* Topological surface transport properties of single-crystalline snte nanowire. *Nano Lett.* **13**, 5344–5349 (2013).
 43. Assaf, B. A. *et al.* Quantum coherent transport in SnTe topological crystalline insulator thin films. *Appl. Phys. Lett.* **105**, 2–7 (2014).
 44. Lopes, G. R. F. *et al.* Photoconductivity effect in SnTe quantum well. *Appl. Phys. Lett.* **119**, 1–7 (2021).
 45. Ueta, A. Y. *et al.* MBE Growth and Characterization of Sn_{1-x}Eu_xTe. **34**, 672–674 (2004).
 46. Abramof, E., Rappl, P. H. O. & Ueta, A. Y. High-resolution X-ray diffraction analysis of SnTe/Sn_{1-x}Eu_xTe superlattices grown on (1 1 1) BaF₂ substrates. *Phys. E Low-Dimensional Syst. Nanostructures* **20**, 462–465 (2004).
 47. de Andrada e Silva, E. A. Optical transition energies for lead-salt semiconductor quantum wells. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **60**, 8859–8865 (1999).
 48. Grabecki, G. Quantum ballistic phenomena in nanostructures of paraelectric PbTe. *J. Appl. Phys.* **101**, (2007).
 49. Pena, F. S. *et al.* Quantum Hall effect and Shubnikov-de Haas oscillations in a high-mobility p-type PbTe quantum well. *Phys. Rev. B* **103**, 205305 (2021).
 50. Broido, D. A. & Reinecke, T. L. Theory of thermoelectric power factor in quantum well and quantum wire superlattices. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **64**, (2001).
 51. Bauer Pereira, P. *et al.* Lattice dynamics and structure of GeTe, SnTe and PbTe. *Phys. Status Solidi Basic Res.* **250**, 1300–1307 (2013).
 52. Piccioli, N., Besson, J. M. & Balkanski, M. OPTICAL CONSTANTS A N D BAND GAP OF PbTe FROM THIN FILM STUDIES BETWEEN 25 A N D 300 ° K. *J. Phys. Chemistry Solids* **35**, 971–977 (1974).
 53. Ridolfi, E., De Andrada E Silva, E. A. & La Rocca, G. C. Effective g-factor tensor for carriers in IV-VI semiconductor quantum wells. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **91**, 1–6 (2015).
 54. Schneider, J. M. *et al.* Systematic study of doping dependence on linear magnetoresistance in p-PbTe. *Appl. Phys. Lett.* **105**, (2014).
 55. Abramof, E., Rappl, P. H. O., Ueta, A. Y. & Motisuke, P. Strain determination in PbEuTe/PbTe multi-quantum wells. *J. Appl. Phys.* **88**, 725–729 (2000).
 56. Yuan, S., Springholz, G., Bauer, G. & Kriechbaum, M. Electronic and optical properties of PbTe/Pb_{1-x}Eu_xTe multiple-quantum-well structures. *Phys. Rev. B* **49**, 5476–5489 (1994).
 57. Hasegawa, M. M. & de Andrada e Silva, E. A. Spin-orbit-split subbands in IV-VI asymmetric quantum wells. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **68**, 1–6 (2003).

58. Sullivan, P. W., Farrow, R. F. C. & Jones, G. R. Insulating epitaxial films of BaF₂, CaF₂ and Ba_xCa_{1-x}F₂ grown by MBE on InP substrates. *J. Cryst. Growth* **60**, 403–413 (1982).
59. De Castro, S., Soares, D. A. W., Peres, M. L., Rappl, P. H. O. & Abramof, E. Room temperature persistent photoconductivity in p -PbTe and p -PbTe:BaF₂. *Appl. Phys. Lett.* **105**, (2014).
60. Pena, F. S. *et al.* Quantum Hall effect and Shubnikov-de Haas oscillations in a high-mobility p -type PbTe quantum well. *Phys. Rev. B* **103**, 1–8 (2021).
61. Hasegawa, M. M. & de Andrada e Silva, E. A. Spin-orbit-split subbands in IV-VI asymmetric quantum wells. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **68**, 2053091–2053096 (2003).
62. Peres, M. L. *et al.* Experimental investigation of spin-orbit coupling in n-type PbTe quantum wells. *J. Appl. Phys.* **115**, 093704 (2014).
63. Henini, M. *Molecular beam epitaxy: From research to mass production.* (Elsevier, USA, 2013).
64. Oura, K. *et al.* *Surface Science: an introduction.* (Springer, Germany, 2003).
65. Ohring, M. *The Materials Science of Thin Films.* (Academic Press, 1992).
66. Balestrieri, M. Transparent conductive oxides with photon converting properties in view of photovoltaic applications : the cases of rare earth-doped zinc oxide and cerium oxide. (2014).
67. Rietveld, G. *et al.* DC conductivity measurements in the Van Der Pauw geometry. *IEEE Trans. Instrum. Meas.* **52**, 449–453 (2003).
68. Pena, F. S. *et al.* Fast photoresponse and high parallel transport in n -type PbTe/PbEuTe quantum wells. *Appl. Phys. Lett.* **111**, (2017).
69. Abramof, E. *et al.* Optical spectra of PbTe/Pb_{1-x}Eu_xTe quantum wells. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **63**, 853041–853048 (2001).
70. Akiba, K. *et al.* Quantitative evaluation of Dirac physics in PbTe. *Phys. Rev. B* **98**, 1–11 (2018).
71. Patnaik, R. C. & Tripathi, G. S. Spin \pm orbit and sp-f hybridisation induced anisotropy of g -factors and effective masses in Pb_{1-x}Eu_xTe. **112**, (1999).
72. Müller, K. *et al.* Suppression and Revival of Weak Localization through Control of Time-Reversal Symmetry. *Phys. Rev. Lett.* **114**, 1–5 (2015).
73. Akiyama, R., Fujisawa, K., Sakurai, R. & Kuroda, S. Weak antilocalization in (111) thin films of a topological crystalline insulator SnTe. *J. Phys. Conf. Ser.* **568**, 0–5 (2014).
74. Taskin, A. A., Yang, F., Sasaki, S., Segawa, K. & Ando, Y. Topological surface transport in epitaxial SnTe thin films grown on Bi₂Te₃. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **89**, 1–5 (2014).
75. Zhang, C. *et al.* Electron and hole contributions to normal-state transport in the superconducting system Sn_{1-x}In_xTe. *Phys. Rev. B* **98**, 1–7 (2018).
76. Obata, Y., Kohama, Y., Matsuishi, S. & Hosono, H. Shubnikov-de Haas oscillations in the three-dimensional Dirac fermion system Ca₃PbO. *Phys. Rev. B* **99**, 1–6 (2019).

77. Tarasenko, S. A. The effect of Zeeman splitting on Shubnikov-de Haas oscillations in two-dimensional systems. *Phys. Solid State* **44**, 1769–1773 (2002).
78. Hayasaka, H. & Fuseya, Y. Crystalline spin-orbit interaction and the Zeeman splitting in $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$. *J. Phys. Condens. Matter* **28**, 31LT01 (2016).
79. Dybko, K. *et al.* Experimental evidence for topological surface states wrapping around a bulk SnTe crystal. *Phys. Rev. B* **96**, 205129 (2017).
80. Zudov, M. A., Du, R. R., Simmons, J. A. & Reno, J. L. Shubnikov–de Haas-like oscillations in millimeterwave photoconductivity in a high-mobility two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **64**, 3–6 (2001).