



Pedro Henrique Pereira

**Fotodetectores de infravermelho baseados em
superredes assimétricas com estados vazantes
no contínuo**

Tese de Doutorado

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica do Departamento de Engenharia Elétrica da PUC-Rio.

Orientador : Prof^a. Patrícia Lustoza de Souza
Co-orientador: Prof. Germano Maioli Penello

Rio de Janeiro
Setembro de 2019



Pedro Henrique Pereira

**Fotodetectores de infravermelho baseados em
superredes assimétricas com estados vazantes
no contínuo**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo.

Prof^a. Patrícia Lustoza de Souza

Orientador

Departamento de Engenharia Elétrica – PUC-Rio

Prof. Germano Maioli Penello

Co-orientador

Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ

Prof. Daniel Neves Micha

CEFET/RJ – Petrópolis

Prof. Gustavo Soares Vieira

Instituto de Estudos Avançados – IEAv/CTA

Prof. Marcos Henrique Degani

Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP

Prof. Mauricio Pamplona Pires

Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ

Rio de Janeiro, 17 de Setembro de 2019

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Pedro Henrique Pereira

Graduou-se em física pela Universidade Federal de Uberlândia. É mestre em física da matéria condensada pela Universidade Federal de São Carlos, especializando-se em simulação computacional de dispositivos optoeletrônicos.

Ficha Catalográfica

Pereira, Pedro Henrique

Fotodetectores de infravermelho baseados em superredes assimétricas com estados vazantes no contínuo / Pedro Henrique Pereira; orientador: Patrícia Lustoza de Souza; coorientador: Germano Maioli Penello. – Rio de Janeiro: PUC-Rio, Departamento de Engenharia Elétrica, 2019.

v., 115 f: il. color. ; 30 cm

Tese (doutorado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Elétrica.

Inclui bibliografia

1. Engenharia Elétrica – Teses. 2. Fotodetector de infravermelho;. 3. Poços quânticos;. 4. Superrede;. 5. Assimetria estrutural;. 6. Estados eletrônicos vazantes no contínuo.. I. Lustoza de Souza, Patrícia. II. Maioli Penello, Germano. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Elétrica. IV. Título.

CDD: 621.3

Agradecimentos

Agradeço,

aos meu pais por todos esses anos de apoio (emocional e financeiro) incondicional nesta caminhada acadêmica desde à graduação até o término do doutorado.

à Prof^a. Patrícia Lustoza pela orientação e pela paciência na minha jornada pelo mundo da física experimental. Nesse período sob a sua orientação, eu aprendi muito mais do que a física experimental, tais como a convivência em laboratório e também como trabalhar em equipe.

ao meu co-orientador Prof. Germano Maioli Penello por ter me introduzido ao fascinante mundo dos fotodetectores e por ter confiado em mim para dá continuidade à sua pesquisa. Obrigado pelas inúmeras reuniões para conversar sobre os resultados e sobre a escrita dos artigos.

À CAPES e à PUC-Rio, pelos auxílios concedidos, sem os quais este trabalho não poderia ter sido realizado.

aos amigos do LabSem: Rudy, Daniel, Marcelinho, Eliseu, Eleonora, Beatriz, Guilherme, Luciana, Edigar, Dr. Roberto, Marcelo e Dona Paulina. Muito obrigado por ter me ajudado na adaptação da vida experimental e também pela convivência descontraída.

aos Dr. Harald Schneider e Dr. Manfred Helm pela orientação durante o período sanduíche no Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf. Aos meus amigos de Dresden: Dr. Alexej Pashkin, Dr Stephan Winnerl, Ivan Fotev, Tamasso Venanzi, Malte Welsch, Diogo de Moura, Pedro Silva, Jiang Li, Zhao Yuchen e Zixuan Zhao. Obrigado por fazer a minha adaptação à essa nova cultura o mais agradável possível.

aos amigos que São Carlos me deu Cristian, Isabela, Mariana, Vitor e Ewelyn, mesmo não morando na mesma cidade a amizade prevaleceu.

aos amigos de Patos de Minas Ana, Andre, Arthur, Alan, Lays, Kerly, Julia, Henrique e Willian pela amizade e por me mostrar que a militância nunca dorme!

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Resumo

Pereira, Pedro Henrique; Lustoza de Souza, Patrícia; Maioli Penello, Germano. **Fotodetectores de infravermelho baseados em superredes assimétricas com estados vazantes no contínuo**. Rio de Janeiro, 2019. 115p. Tese de Doutorado – Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Nesta tese, apresento uma investigação teórica e experimental das propriedades eletro-ópticas de um fotodetector baseado em uma superrede assimétrica *InGaAs/InAlAs* com um defeito estrutural. Essa heteroestrutura apresenta duas importantes características: estados parcialmente localizados no contínuo, chamados de estados eletrônicos vazantes, e um aumento virtual do *band offset* na banda de condução. Devido à assimetria da superrede, a função de onda do estado eletrônico vazante é localizada numa direção e estendida na outra. Em consequência dessas características, o fotodetector apresenta modo dual de operação, fotocondutivo e fotovoltaico, e temperatura de operação ambiente. O modo fotovoltaico foi alcançado devido à direção preferencial de escape do fluxo de elétrons excitados para os estados eletrônicos vazantes no contínuo. A temperatura de operação elevada ocorre devido à diminuição da corrente de escuro térmica causada pelo aumento virtual do *band offset*. No modo fotovoltaico, o espectro de fotocorrente apresenta dois picos estreitos de energias em 300 meV e em torno 440 meV, sendo eles relacionados às transições ópticas do estado fundamental para o primeiro e o segundo estado vazante no contínuo, respectivamente. Para o modo fotocondutivo, a largura de linha do espectro de fotocorrente é fortemente dependente da direção do *bias* de voltagem aplicado. Para o *bias* positivo, o espectro de fotocorrente apresenta um pico em 300 meV e um ombro de energia em torno de 260 meV. Para o *bias* negativo, o espectro de fotocorrente mostra uma banda larga com dois picos em 300 meV e 260 meV. Esse comportamento está relacionado com a população dos estados na minibanda em função da direção do *bias* aplicado. As figuras de mérito do fotodetector, em ambos os modos de operação, apresentam resultados similares aos melhores fotodetectores encontrados na literatura.

Palavras-chave

Fotodetector de infravermelho; Poços quânticos; Superrede; Assimetria estrutural; Estados eletrônicos vazantes no contínuo.

Abstract

Pereira, Pedro Henrique; Lustoza de Souza, Patrícia (Advisor); Maioli Penello, Germano (Co-Advisor). **Infrared photodetectors based on asymmetric superlattices with leaky states in the continuum**. Rio de Janeiro, 2019. 115p. Tese de doutorado – Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

In this thesis, I present a theoretical and experimental investigation of the electro-optical properties of a photodetector based on an InGaAs/InAlAs asymmetric superlattice with a structural defect. This heterostructure has two important characteristics: partially localized states in the continuum, called by leaky electronic states, and a virtual increase in conduction band offset. Due to the asymmetry of the superlattice, the wavefunction of the leaky electronic state is located in one direction and extended in another one. As a result of these features, the photodetector presents a dual-mode operation, photoconductive and photovoltaic modes, and room temperature operating. The photovoltaic mode has reached due to the preferential direction for the flow of excited electrons in the leaky electronic state in the continuum. The high operating temperature occurs because of the decrease in thermal dark current due to the virtual increase of band offset. In photovoltaic mode, the photocurrent spectrum has two narrow energy peaks at 300 meV and around 440 meV, which are related to optical transitions from the ground state to the first and the second leaky electronic states, respectively. For photoconductive mode, the line width of the photocurrent spectrum is strongly dependent on the direction of the applied voltage bias. For the positive bias, the photocurrent spectrum has a peak at 300 meV and a power shoulder around 260 meV. For the negative bias, the photocurrent spectrum shows broadband with two peaks at 300 meV and 260 meV. This behavior is related to the population of the mini band states as a function of the applied bias direction. The figure of merits of the photodetector, in both operation modes, present results similar to the best photodetectors found in the literature.

Keywords

Infrared Photodetector; Quantum well; superlattice; Structural asymmetry; Leaky electronic states in the continuum;

Sumário

1	Introdução	16
2	Revisão teórica	25
2.1	Transições intersubbandas em poços quânticos	25
2.1.1	Aproximação massa efetiva	25
2.2	Interação elétron-radiação	27
2.3	Nível de Fermi em um poço quântico na aproximação da não parabolicidade	30
2.4	O efeito dos dopantes no <i>offset</i> da banda de condução da heteroestrutura	32
2.5	O cálculo autoconsistente	33
2.5.1	A solução da equação de Schrödinger via método do <i>Split-Operator</i>	34
2.5.2	Equação de Poisson	35
2.5.2.1	Solução via método dos elementos finitos	35
2.5.2.2	Solução via potencial eletroestático gerado por um plano infinito de cargas	36
2.6	Caracterizações elétricas e ópticas e as figuras de mérito dos fotodetectores	37
2.6.1	Espectro de absorção	37
2.6.2	Corrente de escuro	39
2.6.3	O Produto entre a resistência diferencial e a área do fotodetector (R_0A)	40
2.6.4	Responsividade	41
2.6.5	Detectividade	42
2.6.5.1	Corrente de ruído	43
2.6.5.2	Ruído térmico ou ruído Johnson	43
2.6.5.3	Ruído de geração-recombinação	43
3	Estado eletrônico vazante no contínuo	45
3.1	Estados ressonantes no contínuo	45
3.2	Estados localizados no contínuo	47
3.3	Estados vazantes no contínuo	48
3.4	Efeito dos dopantes tipo- n sobre o confinamento espacial dos estados vazantes no contínuo	49
3.5	Estrutura final - Superrede assimétrica com um defeito estrutural dopado	53
4	Resultados e discursões	55
4.1	Detalhamento da amostra crescida	55
4.2	Espectro de absorção	55
4.3	Fotodetector operado na modo fotovoltaico	60
4.3.1	Espectro de fotocorrente	61
4.3.2	Figuras de mérito	63
4.3.2.1	Corrente de escuro	63
4.3.2.2	O produto R_0A - A resistência diferencial vezes a área do fotodetector	64

4.3.2.3	Responsividade espectral	66
4.3.2.4	Detectividade espectral	69
4.4	Fotodetector operado na modo fotocondutivo	71
4.4.1	O espectro de fotocorrente	72
4.4.2	Responsividade espectral	77
4.4.3	Detectividade espectral	78
5	Conclusão e Trabalhos Futuros	81
	Referências bibliográficas	84
6	Apêndice I - Densidade de estados bidimensional na aproximação não-parabólica do vetor de onda do elétron	91
7	Apêndice II - Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR)	94
8	Apêndice III - O método da matriz transferência	97
9	Apêndice IV - Solução numérica da equação de Schrödinger via método do <i>Split-Operator</i>	101
9.1	Evolução temporal da função de onda no domínio real	101
9.1.1	Resolvendo a exponencial do operador <i>momentum</i> linear no espaço das posições	103
9.1.2	Resolvendo a exponencial do operador <i>momentum</i> linear no espaço dos <i>momenta</i>	108
9.2	Evolução temporal da função de onda no domínio imaginário	109
10	Apêndice V - Solução numérica da equação de Poisson	111
10.1	A solução via elementos finitos	111
10.2	Solução via potencial eletrostático gerado por um plano infinito carregado	114

Lista de figuras

- Figura 1.1 Os três tipos de transições intersubbanda; (a) transição ligado-ligado, (b) transição ligado-contínuo e (c) transição ligado-quasiligado 17
- Figura 1.2 (a) A região ativo do fotodetector processada entre duas nano-antenas. As nano-antenas otimizada na frequência ressonante do fotodetector aumenta a área de coleta de ftons. Com isso mais elétrons fotoexcitados são gerados com a corrente ruído baixa. (b) O espectro de fotocorrente desde temperatura 77 K até temperatura ambiente. (c) Comparação entre a responsividade do fotodetector processo em formato de *mesa* e no formato de nano-antenas. Figura extraída de artigo (Palaferrri, 2018). 19
- Figura 1.3 (a) Superrede semicondutora formada por dois semicondutores com *gaps* de energia diferentes. (b) Perfil de potencial da banda de condução na direção de crescimento da superrede sobreposta com o módulo quadrado das funções de onda. As funções de onda azuis representam as minibandas e as funções de onda vermelhas representam os *minigaps*. 20
- Figura 1.4 (a) Perfil de potencial em conjunto com o módulo ao quadrado das funções de onda, (b) espectro de transmissão teórica e (c) medida do espectro de absorção para a heteroestrutura proposta por Capasso, extraída de (Capasso, 1992). 22
- Figura 1.5 (a) Representação do perfil de potencial do QWIP com estado confinado no *minigap*. (b) espectro de fotocorrente medido para três amostras diferentes. Figura extraída de (Leavitt, 2001) 22
- Figura 1.6 (a) O perfil de potencial em conjunto com as funções de onda e (b) o espectro de fotocorrente medido pelo QWIP com estado localizado no contínuo por Penello. Neste trabalho, o estado localizado se encontra dentro da minibanda. Figura extraída da referencia (Penello, 2013) 23
- Figura 1.7 (a) O perfil de potencial em conjunto com as funções de onda e (b) o espectro de fotocorrente medido pelo QWIP com estado localizado no contínuo por Guerra. Neste trabalho, Guerra demonstrou a geração de fotocorrente com energia maior que o *bandoffset*. Figura extraída da referencia (Guerra, 2016) 24
- Figura 2.1 Efeito da não-parabolicidade no nível de Fermi num poço quântico com espessura de 2.5 nm e densidade planar dos elétrons de $7.1 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ a 77 K. O nível de Fermi considerando a dispersão parabólica está representado pela linha vermelha tracejada, enquanto o nível de Fermi considerando ela não-parabólica está representado pela linha vermelha contínua. Há uma redução no nível de Fermi quando é considerada a dispersão não-parabólica, neste caso esse redução foi 307 meV para 290 meV. 32

- Figura 2.2 Efeito da localização dos dopantes tipo- n em um poço quântico de $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ com espessura de 3.0 nm e densidade planar de $1.5 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$. (a-b) O perfil da densidade planar e o perfil de potencial eletrostático gerado no *offset* da banda de condução para o caso do poço quântico ser dopado. O potencial eletrostático apenas é observado com o *zoom* no fundo do poço. (c-d) O perfil de densidade planar de elétrons e o potencial criado por eles para o caso das barreiras em volta do poço quântico dopadas. O potencial eletrostático gerado é perceptível no *offset* da banda de condução 33
- Figura 2.3 Diagrama de blocos do método de interação autoconsistente 34
- Figura 2.4 (a) Campo elétrico gerado por um único plano de cargas infinito com espessura de δz . (b) Densidade de carga planar devido a diversos planos infinito empilhados. 36
- Figura 2.5 Representação da amostra processada na geometria guia de ondas 38
- Figura 2.6 Representação em diagrama de energias dos mecanismos responsáveis pela corrente de escuro em fotodetectores baseados em poços quânticos, que são: a emissão termiônica (i), o tunelamento termicamente assistido (ii) e o tunelamento entre os poços quânticos (iii). 40
- Figura 2.7 Energia de ativação em um poço quântico com 4.0 nm de espessura. A energia de ativação é definida como a diferença entre a energia de Fermi e o início do contínuo de estados. 41
- Figura 3.1 (a) Perfil de potencial de um poço quântico simples sobreposto com as probabilidades eletrônicas. A linha azul representa o estado fundamental e a linha verde representa o estado ressonante no contínuo. (b) Coeficiente de transmissão do elétron em função da sua energia. O coeficiente de transmissão é oscilatório para energias acima barreira e ele tende ao valor unitário. As regiões onde o coeficiente é próximo de um é conhecido como estados ressonantes. O primeiro estado ressonante é representado pela linha verde. 46
- Figura 3.2 Efeito do número de poços e barreiras no espelho de Bragg no confinamento dos estados localizados no contínuo em uma superrede simétrica com um defeito estrutural. (a) Estrutura de banda da superrede formada por um período de espelho de Bragg. (b) Estrutura de banda com o espelho Bragg formado por cinco poços e barreiras. (c) A força de oscilador da transição óptica do estado fundamental para o primeiro, linha preta, e o segundo, linha verde, estado localizado no contínuo em função do tamanho do espelho de Bragg. 48

- Figura 3.3 (a) Estrutura da banda de condução da superrede assimétrica e seus respectivos autoestados. A superrede é formada por um espelho de Bragg com cinco poços/barreiras quânticas, o poço quântico de defeito estrutural e um espelho de Bragg vazante formando apenas por um poço/barreira quântica. Os dois primeiros estados vazantes no contínuo são representados pelas linhas verde e preta, respectivamente. (b) Perfil de potencial da banda de condução da superrede simétrica com um defeito estrutural. (c) A força de oscilador em função do comprimento do espelho de Bragg à direita do poço quântico de defeito. A cruz negra e o quadrado cinza representam os valores experimentais. 50
- Figura 3.4 (a) Perfil de potencial da banda de condução da superrede simétrica com um defeito estrutural, dopado tipo- n , sobreposta com as probabilidades eletrônicas dos estados resolvido de modo autoconsistente. O potencial eletrostático gerado pelos dopantes é visto no *zoom* do fundo do poço de defeito estrutural. Ele decresce o poço quântico em aproximadamente 2 meV. (b) O espectro de absorção calculado através da regra de ouro de Fermi para a estrutura eletrônica resolvida de modo autoconsistente, linha preta, e para a estrutura de banda calculada apenas com o equação de Schrödinger. A diferença de energia do pico principalmente entre os dois métodos foi 1.25 meV. A força oscilador da transição óptica é 0.28, para ambos os métodos. 51
- Figura 3.5 O efeito da localização dos dopantes na superrede assimétrica na localização dos estados eletrônicos vazantes. A avaliação desse efeito foi feito calculando a força de oscilador da transição óptica do estado fundamental, linha azul, para o primeiro estado vazante no contínuo, linha preta. (a-b) Estrutura de banda e força de oscilador considerando que as barreiras quânticas em volta do poço quântico de defeito estão dopados. (c-d) Considerando que apenas que a barreira quântica à esquerda do poço quântico de defeito esteja dopado. (e-f) Caso apenas a barreira à esquerda do poço quântico de defeito está dopado. 52
- Figura 3.6 (a) Perfil de potencial da banda de condução na direção de crescimento da amostra sobreposta com as densidades de probabilidade dos elétrons. A linha pontilhada representa a energia de Fermi para a temperatura de 78 K. O estado fundamental está localizado no poço quântico de defeito, linha azul. Em destaque no contínuo de estados, os estados confinados com maior força de oscilador para as transições ópticas iniciadas no estado fundamental. (b) O espectro de transmissão do elétron ao atravessar a superrede em função da sua energia. (c) O espectro de absorção calculado, a partir da regra de ouro de Fermi, considerando o estado fundamental como o estado inicial para as transições ópticas 53
- Figura 4.1 Dimensões da amostra para as medidas de absorbância. 56

- Figura 4.2 (a) Espectro de absorção experimental da superrede assimétrica no intervalo entre 78 K a 300 K, com o incremento de 20 K. Dois picos de absorção, um principal em 300 meV e um secundário em torno de 430 meV, e um ombro em 260 meV são observados. (b) A comparação entre o espectro de absorção medido em 78 K e 300 K. Além do desvio para o azul no pico de absorção em 300 K, um aumento considerável na amplitude do ombro é observado. 57
- Figura 4.3 Comparação entre os espectros de absorção experimental e teórico normalizados. O resultado teórico considerando as dimensões nominais da superrede, linha vermelha, apresenta uma discrepância na energia do pico experimental em 290 meV em torno de 15 meV. A linha azul representa o espectro absorção teórico da superrede com o melhor ajuste com o espectro de absorção experimental. 58
- Figura 4.4 Ajuste do espectro de absorbância, medido em 78 K, com quatro curvas lorentzianas usando o software *Igor pro*. (a) As quatro curvas lorentzianas centralizadas nos picos de absorbância. (c) A comparação entre o espectro de absorbância experimental, quadros vermelhos, com a soma das curvas lorentzianas, linha azul. (c) O erro relativo entre o espectros de absorbância experimental e o ajuste estatístico. 59
- Figura 4.5 Comparação entre a força de oscilador experimental, em função da temperatura, e o valor teórico da força de oscilador das transições ópticas entre o estado fundamental no poço quântico de defeito estrutural e os dois primeiros estados vazantes no contínuo. 60
- Figura 4.6 Comparação entre os espectros de fotocorrente no ambiente com o gás carbônico, linha azul, e o ambiente sem a presença do gás carbônico, linha preta. 61
- Figura 4.7 (a) Espectros de fotocorrente normalizados, no modo fotovoltaico, em função da temperatura entre 80 K até 300 K. Os espectros foram empilhados para facilitar a análise do perfil da fotocorrente com o aumento da temperatura. (b) Espectros de fotocorrente normalizados em 78 K e 300 K. 62
- Figura 4.8 Comparação entre as medidas de absorção, bolas azuis, e de fotocorrente, triângulos pretos, em 80 K com o espectro de absorção teórico, linha vermelha. 63
- Figura 4.9 (a) Corrente de escuro em função do *bias* de tensão entre -5.0 V e +5.0 V para o intervalo de temperatura de 78 K até 300 K. A curva preta representa a corrente iluminada medida em 78 K. (b) Temperatura BLIP em função do *bias* de tensão. 65
- Figura 4.10 (a), O produto R_0A para os *bias*es -5.0 V, -3.0 V, 0 V, 3.0 V e 5.0 V em função do inverso da temperatura. (b) A energia de ativação em função do *bbias* de tensão. 67
- Figura 4.11 Representação esquemática da configuração experimental da medida da responsividade espectral. 68

- Figura 4.12 Responsividade de pico da superrede assimétrica no modo fotovoltaico em função da temperatura. As bolas pretas representam os resultados experimentais e a linha é apenas um guia aos olhos. 69
- Figura 4.13 Representação esquemática da configuração experimental utilizada na medida da corrente de ruído utilizando o amplificador *lock-in*. 70
- Figura 4.14 (a) Comparação entre a detectividade de pico limitada pelo ruído Johnson com a detectividade de pico determinada através da corrente de ruído medida com o amplificador *lock-in* em função da temperatura. A corrente de ruído medida com o amplificador *lock-in*. 71
- Figura 4.15 Espectros de fotocorrente normalizados da superrede assimétrica, no modo fotocondutivo, para o intervalo de *bias* de tensão aplicado entre -5.0 V e 5.0 V. Os espectros foram empilhados com o objetivo de facilitar a análise do perfil do espectro de fotocorrente em função do *bias* de tensão. 73
- Figura 4.16 (a) Perfil de potencial da banda de condução e a densidades de probabilidade eletrônicas para o *bias* de tensão de -3.0 V. (b) A probabilidade de população térmica dos estados confinados na superrede, considerando a energia de Fermi de 290 meV e a temperatura da rede cristalina de 80 K. Para *bias* negativo quase todos os estados da minibanda estão populados. (c) Comparação entre o espectro de fotocorrente experimental (quadrado vermelho) e o espectro de absorção teórico, no qual foi considerado as contribuições de todos os estados termicamente populados. 74
- Figura 4.17 (a) Perfil de potencial para a banda de condução e as densidades de probabilidade dos elétrons para o *bias* de +3.0 V. (b) A probabilidade de população térmica dos estados confinados na superrede, considerando a energia de Fermi de 290 meV e a temperatura de rede de 80 K. Para *bias* positivo, apenas um estado da minibanda está populado. (c) Comparação entre o espectro de fotocorrente (quadrado vermelho) e o espectro de absorção teórico (linha preta), considerando a contribuição de todos os estados termicamente populados (linhas azul e rosa). 75
- Figura 4.18 Comparação entre as energias do pico principal (triângulo preto) e do pico secundário/ombro (círculo preto) dos espectros de fotocorrente com os picos de energias dos espectros de absorção teórico (linhas rosa e azul) em função do *bias*. (a) Para *bias* negativo e (b) Para os *bias* positivo. 76
- Figura 4.19 Sobreposição dos espectros de fotocorrente, no modo fotocondutor, medidos na temperatura de 78 K (linha azul) e a maior temperatura possível (linha preta) para os *bias*es -5.0 V, -3.0 V, 3.0 V e 5.0 V. 77

- Figura 4.20 (a) Responsividade de pico medido nos *bias*es -5.0 V, -3.0 V, 3.0 V e 5.0 V em função da temperatura. (b) Relacionando a característica da função de onda do estado vazante no contínuo ser vazada numa direção com o maior valor da responsividade de pico para *bias* positivo. 78
- Figura 4.21 (a) A corrente de ruído em função do *bias* de tensão medida com o amplificador *lock-in* em função da temperatura. (b) Detectividade de pico calculada a partir da medida da corrente de ruído em função do *bias* e da temperatura. 80
- Figura 5.1 Estrutura de banda da superrede assimétrica acoplada em uma cascata quântica. A cascata quântica tem a função de tornar o decaimento do elétron no LES para o estado fundamental mais otimizado. 83
- Figura 6.1 Ilustração do preenchimento dos estados do elétron do poço quântico no espaço k bidimensional 92
- Figura 7.1 O espectrômetro por transformada de Fourier é baseado no interferômetro de Michelson com um espelho móvel. O sinal no detector vai ser uma composição de muitas frequências, em cada resulta da interferência de um comprimentos de onda diferente. 95
- Figura 7.2 Representação da relação entre o interferograma e a densidade espectral de energia de um feixe através da transformada de Fourier. 96
- Figura 8.1 (a) Representação do problema de ondas propagando através de um meio inhomogêneo pelo método matriz transferência. Este método relaciona o amplitude do campo de entrada com a amplitude do campo de saída por meio da matriz transferência. (b) No método matriz transferência o potencial é discretizado numa grande de N camadas com espaçamento, a e potencial V constantes. 98
- Figura 10.1 (a) Campo elétrico gerado por um único plano de cargas infinito com espessura de δz . (b) Densidade de carga planar devido a diversos planos infinito empilhados. 114

Work on something most of your colleagues think is boring or off track. You might be lucky and find an area where there isn't much competition.

Dr. Tomas Lindahl, *Nobel Price in Chemistry 2015.*

1

Introdução

As transições ópticas intersubbandas (do inglês ISBC) foram observadas primeiramente por Eglash e West em 1985 em uma heteroestrutura formada por arseneto de gálio e arseneto de gálio-alumínio (GaAs/AlGaAs) (West, 1985). Essas transições ocorrem entre dois estados eletrônicos dentro da banda de condução de uma heteroestrutura formada por dois semicondutores com *gaps* de energia diferentes, dando origem num potencial do tipo poço quântico na direção de crescimento da amostra. O poço quântico de Eglash e West foi formado por uma camada fina de GaAs (poço quântico) entre camadas de AlGaAs (barreira quântica). Eles chamaram esse fenômeno óptico de "transição entre estados envelopes no poço quântico". Esse nome é devido à aproximação da função envelope usada para descrever os estados eletrônicos dentro da banda de condução da heteroestrutura semicondutora (Bastard, 1990). Uma grande vantagem observada desde o início nas transições intersubbandas em comparação com as transições interbandas¹ é a maior facilidade para sintonizar a energia da transição, por meio da variação da largura (espessura do semicondutor poço) e/ou da profundidade (dopagem do semicondutor barreira) do poço. Essa descoberta abriu uma nova *era* para os dispositivos ópticos e optoeletrônicos baseados nas transições intersubbandas (Helm, 1999).

As transições intersubbandas foram extensivamente estudadas por Levine e Harris, dentre os diversos fenômenos observados por eles estão o forte pico de absorção e o efeito Stark nas transições intersubbandas em superredes de AlAs/GaAs (Levine, 1987, Harwit, 1987). Em 1987, Levine apresentou o primeiro fotodetector de infravermelho baseado em poços quânticos (do inglês QWIP) com detecção no comprimento de onda de 10 μm (Levine, 1987).

As transições intersubbandas são classificadas em três tipos, dependendo da localização do estado final da transição. Usualmente, o estado inicial da transição é o estado fundamental do poço. No primeiro caso, o estado final é outro estado ligado dentro do poço quântico, essa transição é conhecida como transição ligado-ligado Fig. 1.1(a). Sua principal característica é a alta seletividade na energia ressonante e sua desvantagem é a baixa taxa de

¹A transição interbanda ocorre entre a banda de valência e a banda de condução do semicondutor. A energia de transição nesta transição é o *gap* de energia do semicondutor.

extração dos elétrons fotoexcitados para o contínuo de estados. No segundo caso, o elétron é fotoexcitado diretamente para o contínuo de estados acima da barreira. Neste caso, o elétron fotoexcitado gera fotocorrente facilmente, mas a seletividade da energia é baixa. Essa transição é conhecida como transição ligado-contínuo de estados Fig. 1.1(b). Por ultimo, o estado final é localizado próximo ao topo do poço quântico, esse estado é conhecido como quasiligado e este estado é facilmente extraído para o contínuo de estados. Esse tipo de transição reúne as duas vantagens das outras transições, ou seja, alta seletividade na energia ressonante e fácil extração para o contínuo. Essa transição é conhecida como ligado-quasiligado Fig. 1.1(c).

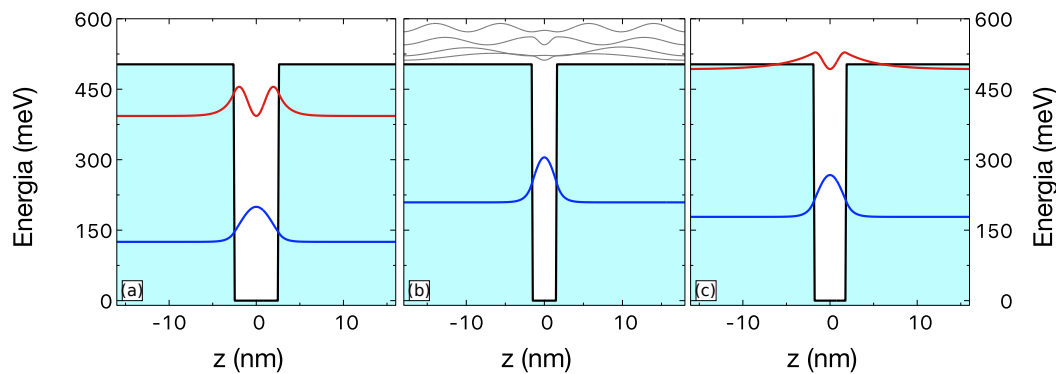


Figura 1.1: Os três tipos de transições intersubbanda; (a) transição ligado-ligado, (b) transição ligado-contínuo e (c) transição ligado-quasiligado

Nos três casos, para os elétrons fotoexcitados gerarem fotocorrente é necessário criar uma direção preferencial para guiar o fluxo dos elétrons fotoexcitados até um dos contatos elétricos. O método mais comum de guiar esse fluxo é por meio da aplicação de uma tensão elétrica nos contatos elétricos, esse modo de operação do fotodetector é conhecido como o modo fotocondutivo. No modo fotocondutivo, o *bias* de tensão aumenta a taxa dos elétrons fotoexcitados extraídos para o contínuo de estados, mas em contrapartida ele introduz uma corrente de escuro indesejada. Essa corrente de escuro é um dos principais fatores que limita o funcionamento dos QWIP's em baixas temperaturas (Levine,1993).

O outro modo de operação do fotodetector é o modo fotovoltaico, ou seja, sem a necessidade do *bias* de tensão aplicado nos contatos elétricos para gerar a fotocorrente. O fluxo de elétrons fotoexcitados é guiado através de um campo elétrico interno gerado por uma assimetria espacial na heteroestrutura. Neste modo de operação, a intensidade da corrente de escuro gerada é muito menor quando comparado com QWIP fotocondutivo, mas a taxa de extração dos elétrons fotoexcitados para o contínuo de estados é também baixa (Schneider, 1997). O primeiro QWIP fotovoltaico foi apresentado por Goossen

em 1988 (Goossen, 1988), ele utilizou uma estrutura composta de um poço quântico acoplado num poço parabólico. Outras estruturas com assimetria estrutural foram utilizadas em QWIP fotovoltáico, por exemplo duas barreiras finas entre um poço quântico (Schneider, 1993, Luna, 2003) e o poço quântico dopado assimetricamente (Schonbein, 1996). A detectividade, razão entre a fotocorrente e a corrente de ruído, de ambos os modos de operação do fotodetector apresenta valores similares (Schneider, 1997). Com isso, cada modo de operação é indicado dependendo das características requeridas pela aplicação. Por exemplo, o modo fotocondutivo é usado em situações onde a intensidade da fotocorrente necessita ser alta e o modo fotovoltáico é usado em situações onde o sinal a ser medido é fraco, logo a corrente de escuro precisa ser baixa.

Mesmo que o campo de pesquisa em QWIPs se encontra num estágio de desenvolvimento maduro o suficiente para haver dispositivos comerciais com aplicações em diversas áreas, desde militar (óculos de visão noturna) passando por áreas de interesse civil (saúde, infraestrutura, detecção de gases), ainda há alguns pontos em aberto para que essa tecnologia se torne amplamente difundida. Dentre esses pontos, a temperatura de operação do fotodetector é um fator crítico que a deixa com um custo operacional alto e com pouco grau de portabilidade. Geralmente, os QWIPs necessitam de temperaturas criogênicas, em torno de 77 K, para operarem corretamente. A corrente de escuro de origem térmica é um dos principais fatores que faz a sua temperatura de operação ser limitada. Essa corrente tem a característica de aumentar exponencialmente com a temperatura (Levine, 1993). Uma alternativa para aumentar a temperatura de operação dos fotodetectores é por meio do modo fotovoltáico. O fotodetector baseado em cascata quântica (do inglês QCD) é um bom candidato para fotodetector fotovoltáico operando em temperatura ambiente, esse tipo de heteroestrutura não apresenta corrente de escuro de origem térmica (Giorgetta, 2009). QCD's operando em temperatura ambiente já foram reportados, tanto para heteroestruturas da família III-V (Graf, 2006, Xuejiao, 2014, Harrer, 2016) quanto para heteroestruturas da família II-VI (Ravikumar, 2014, Ravikumar, 2015). As desvantagens dos QCD's são o menor grau de liberdade na sintonização da energia de detecção e a baixa resistência diferencial (Hofstetter, 2010).

Existem duas alternativas para aumentar a temperatura de operação do QWIP fotovoltáico, que são; aumentar a razão entre os elétrons fotoexcitados e os elétrons termicamente excitados ou diminuir a taxa dos elétrons termicamente excitados.

A primeira alternativa consiste em processar o fotodetector dentro de nano-antenas, de tal forma que a energia ressonante da antenna seja a mesma

energia de detecção do fotodetector (Palaferri, 2018, Rodriguez, 2018). O efeito antena faz com que a área de coleta dos fótons seja maior que a área elétrica do fotodetector, como é visto na Fig. 1.2(a). Com isso, um aumento no número de elétrons fotoexcitados é observado, mas mantendo a intensidade da corrente de escuro térmica no mesmo patamar observado no fotodetector processado no formato tradicional de *mesa*. Em 2018, Sirtori apresentou um QWIP de GaAs/AlGaAs processado dentro de nano-antenna com detecção em $9.0 \mu\text{m}$ operando em temperatura ambiente com uma responsividade de 0.2 A/W , Fig. 1.2(b-c).

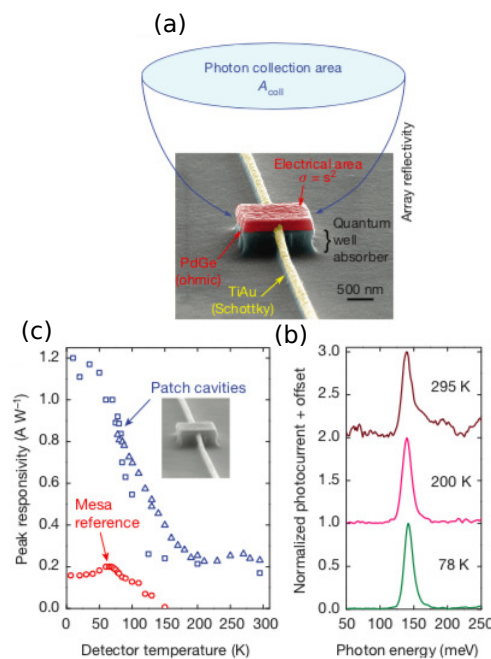


Figura 1.2: (a) A região ativo do fotodetector processada entre duas nano-antenas. As nano-antenas otimizada na frequência ressonante do fotodetector aumenta a área de coleta de fons. Com isso mais elétrons fotoexcitados são gerados com a corrente ruído baixa. (b) O espectro de fotocorrente desde temperatura 77 K até temperatura ambiente. (c) Comparação entre a responsividade do fotodetector processo em formato de *mesa* e no formato de nano-antenas. Figura extraída de artigo (Palaferri, 2018).

A segunda alternativa consiste em diminuir o número de elétrons termicamente excitados por meio do aumento do *offset* da banda de condução. Esse aumento pode ser feito de forma direta, usando heteroestrutura compensação de tensão elástica (Lai, 2005), ou de forma virtual, usando superrede semicondutora (Takagi, 1991). Um QWIP de barreiras duplas de AlAs entre um poço de $\text{In}_{0.84}\text{Ga}_{0.16}\text{As}$ com compensação de tensão com detecção em $2.09 \mu\text{m}$ com temperatura de operação de 270 K foi reportado por Lai em 2005 (Lai, 2005). O aumento virtual do *offset* da banda de condução foi a abordagem escolhida

para ser investigada nessa tese para aumentar a temperatura de operação de um fotodetector baseado em superrede assimétrica com detecção em $4.0 \mu\text{m}$.

Uma superrede semicondutora é formada por um crescimento periódico e alternado de camadas nanométricas de dois semicondutores de *gap* diferentes, por exemplo uma superrede formada por arseneto de índio e gálio (InGaAs) e arseneto de índio e alumínio (InAlAs) é apresentada na Fig. 1.3(a). Se a distância entre cada poço for suficientemente pequena ao ponto de haver sobreposição entre as funções de onda dos estados ligados de cada poço, os estados que antes eram discretos agora se sobrepõem dando origem em regiões com bandas permitidas (minibandas) e regiões com bandas proibidas (*minigaps*). A formação dessas bandas é observada no perfil de potencial da banda de condução na direção de crescimento de uma superrede de InGaAs/InAlAs formada por 10 poços quânticos (InGaAs) com espessura de 2.5 nm separados por barreiras quânticas (InAlAs) de 7.0 nm de espessura, Fig. 1.3(b). As minibandas estão representadas pelas linhas azuis, enquanto os *minigaps* são as linhas vermelhas. É interessante notar que, as minibandas e os *minigaps* não estão limitados apenas para os estados confinados na superrede. O contínuo de estados também é modulado pela superrede, dando origem as regiões de *minigaps* dentro do contínuo. O aumento virtual do *offset* na banda de condução acontece em consequência da presença da região de *minigap* no contínuo.

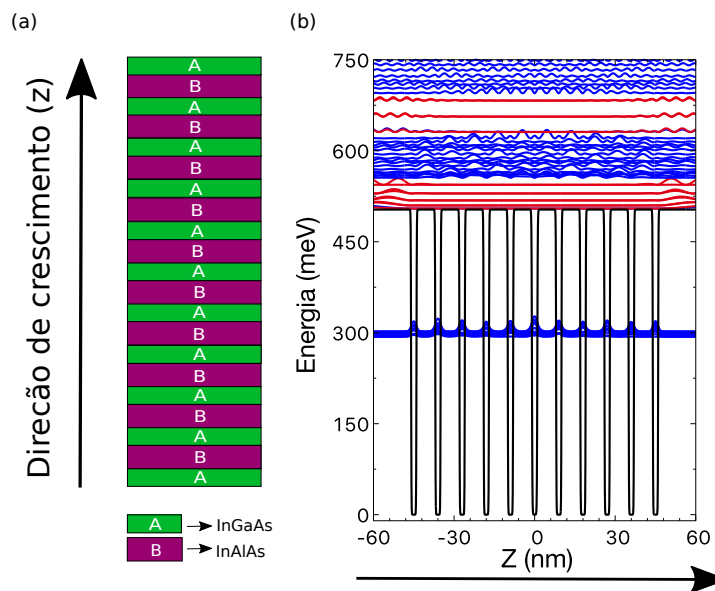


Figura 1.3: (a) Superrede semicondutora formada por dois semicondutores com *gaps* de energia diferentes. (b) Perfil de potencial da banda de condução na direção de crescimento da superrede sobreposta com o módulo quadrado das funções de onda. As funções de onda azuis representam as minibandas e as funções de onda vermelhas representam os *minigaps*.

Outra característica interessante das superredes é a possibilidade de criar estados localizados dentro do contínuo de estados. Esse estado é criado quando a largura de um único poço quântico da superrede é diferente dos demais poços. Esse poço atua como um defeito estrutural para a superrede e a superrede atua como um espelho de Bragg para o confinamento espacial da função de onda de um estado estendido no contínuo na região do defeito estrutural.

Esse estado foi primeiramente observado em 1992 por Capasso (Capasso, 1992). Ele utilizou uma superrede simétrica de InGaAs/InAlAs com um defeito estrutural para criar um estado localizado 60 meV acima da barreira. Para o confinamento espacial desse estado, a espessura de cada camada da superrede foi escolhida cuidadosamente para atuar como um espelho de Bragg no processo de localização espacial da função da onda do estado estendido através de interferências construtivas/destrutivas. O perfil de potencial dessa superrede em conjunto com as densidades de probabilidade eletrônicas, o coeficiente de transmissão eletrônico e o espectro de absorção medido são apresentados na Fig. 1.4. O estado confinado dentro do primeiro *minigap* no contínuo é representado pela linha azul, 1.4(a). Esse estado também é observado no coeficiente de transmissão na forma de um pico de energia estreito acima da barreira, 1.4(b). A medida do espectro de absorção da superrede pode ser vista na Fig. 1.4(c), um pico de absorção em 360 meV é observado. Esse valor está em perfeita concordância com a previsão teórica para a transição óptica entre o estado fundamental e o primeiro estado localizado no contínuo.

Capasso *et al.* utilizaram a transição óptica entre o estado ligado e o estado confinado no contínuo para criar uma nova classe de laser, o laser de cascata quântica (Faist, 1994). Essa transição também pode ser utilizada em fotodetectores. O primeiro fotodetector baseado em superrede com um defeito estrutural (do inglês SLIP) foi desenvolvido por Leavitt e Little em 2001 (Leavitt, 2001). A superrede apresentada por eles foi projetada de tal forma que uma parte da primeira minibanda estaria confinada dentro do potencial da superrede e a outra parte estaria estendida no contínuo, conforme observado na Fig. 1.5(a). Neste caso, os elétrons fotoexcitados para o estado confinado no *minigap* podem espalhar para dentro dos estados da minibanda e assim gerar fotocorrente. Eles aplicaram essa ideia em três amostras diferentes, em cada amostra a diferença de energia entre o estado localizado no *minigap* e o topo da minibanda foi reduzida. Todas as amostras apresentaram bandas estreitas de fotocorrente, Fig. 1.5(b). Para que a diferença de energia fosse reduzida em cada amostra, foi necessário o relaxamento da condição de espelho de Bragg na superrede.

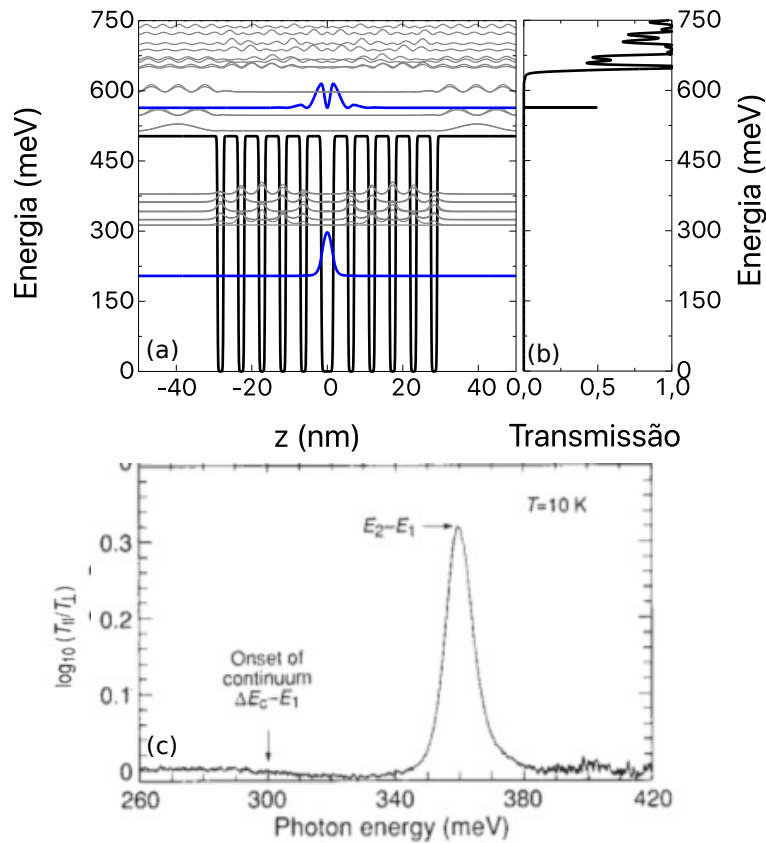


Figura 1.4: (a) Perfil de potencial em conjunto com o módulo ao quadrado das funções de onda, (b) espectro de transmissão teórica e (c) medida do espectro de absorção para a heteroestrutura proposta por Capasso, extraída de (Capasso, 1992).

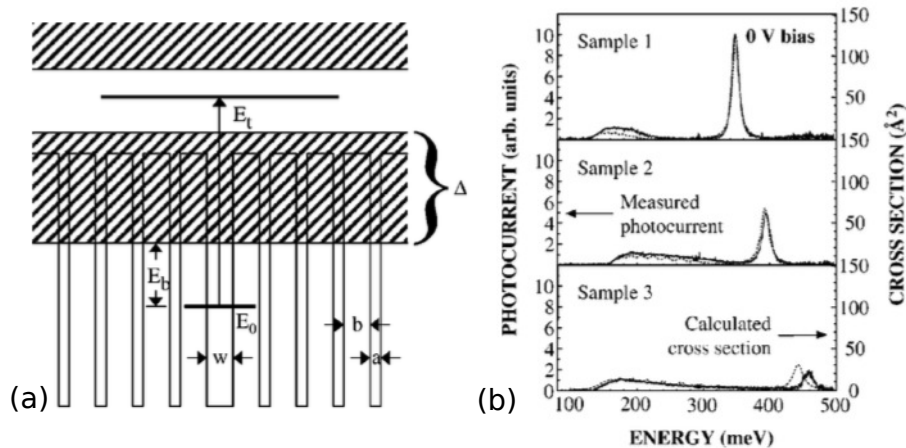


Figura 1.5: (a) Representação do perfil de potencial do QWIP com estado confinado no *minigap*. (b) espectro de fotocorrente medido para três amostras diferentes. Figura extraída de (Leavitt, 2001)

Após o trabalho de Leavitt e Little não houve mais avanços com os SLIPs. Até que em 2011, o doutorando, na época, Germano M. Penello deu início às investigações desse tipo de fotodetector no laboratório de semicondutores

(LabSem) na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio). Penello desenhou uma superrede onde o estado localizado estaria dentro da minibanda no contínuo (Penello, 2016), como visto na Fig. 1.6(a). Neste caso, o elétron no estado localizado no contínuo é facilmente espalhado para os estados estendidos da minibanda e com isso geraria fotocorrente mais facilmente do que o fotodetector desenvolvido por Leavitt e Little. Uma característica peculiar na superrede de Penello foi a paridade anômala nas funções de onda, com isso o espectro de fotocorrente medido mostrou dois picos próximos de fotocorrente nas energias 300 meV e 440 meV, Fig 1.6(b). Ambos os picos correspondem às transições ópticas entre o estado fundamental e os dois primeiros estados localizados no contínuo.

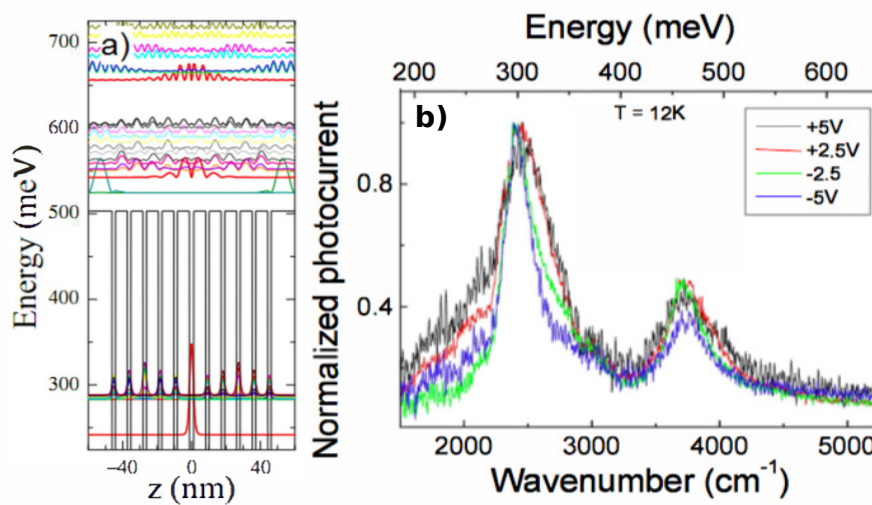


Figura 1.6: (a) O perfil de potencial em conjunto com as funções de onda e (b) o espectro de fotocorrente medido pelo QWIP com estado localizado no contínuo por Penello. Neste trabalho, o estado localizado se encontra dentro da minibanda. Figura extraída da referência (Penello, 2013)

Desde então, um grupo de pesquisa em SLIPs se formou no LabSem. O avanço seguinte veio em 2015 pela doutoranda Lesslie Guerra. Guerra demonstrou que os estados confinados no contínuo poderiam ser utilizados para gerar fotocorrente com energia de detecção superior ao *offset* da banda de condução da superrede semicondutora (Guerra, 2016, Pereira, 2020). Na Fig. 1.7(b), o espectro de fotocorrente com um pico em 600 meV referente à transição óptica entre o estado fundamental e o segundo estado localizado no contínuo é apresentado. Esses foram os avanços apresentados até o momento no uso dos estados localizados no contínuo em SLIPs no LabSem, um artigo de revisão sobre isso pode ser encontrado na referência (Penello, 2019).

Nesta tese será investigada uma superrede assimétrica com defeito estrutural com o objetivo da função de onda do estado localizado no contínuo

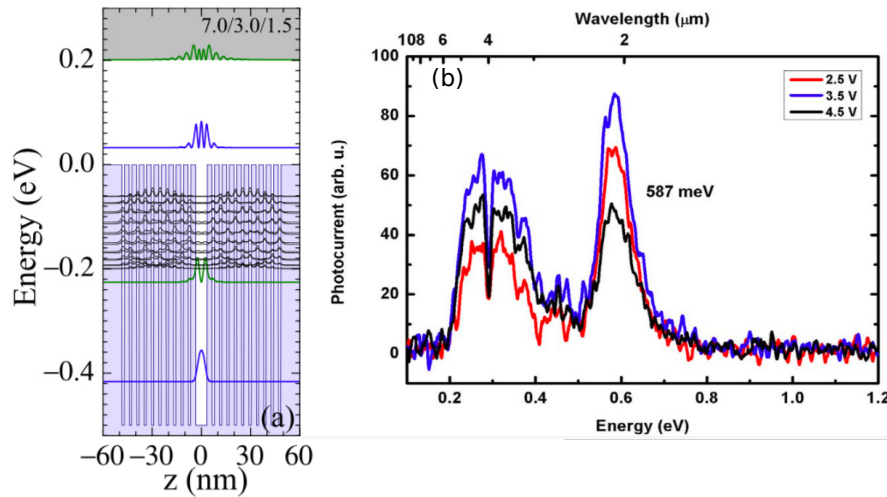


Figura 1.7: (a) O perfil de potencial em conjunto com as funções de onda e (b) o espectro de fotocorrente medido pelo QWIP com estado localizado no contínuo por Guerra. Neste trabalho, Guerra demonstrou a geração de fotocorrente com energia maior que o *bandoffset*. Figura extraída da referencia (Guerra, 2016)

ser completamente localizada num direção enquanto na outra direção ela é estendida. Esse estado recebeu o nome de estado eletrônico vazante no contínuo (Penello, 2018, Pereira, 2019). A grande vantagem desse tipo de estado em SLIPs é a possibilidade de obter fotocorrente sem a necessidade de *bias* de tensão aplicado e com isso aumentar a temperatura de operação do fotodetector.

A tese foi dividida em quatro capítulos, começando com a revisão teórica dos conceitos básicos da física dos fotodetectores, em seguida a construção dos estados vazantes no contínuo, os resultados e discussões do fotodetector com o estado vazantes no contínuo e por fim a conclusão e trabalhos futuros. Além disso, quatro apêndices foram adicionados: o cálculo da densidade de estados 2D para a aproximação não-parabólica, o método da matriz transferência usado no cálculo do coeficiente de transmissão eletrônico e por fim os métodos numéricos utilizados nas soluções das equações de Schrödinger e Poisson.

2

Revisão teórica

Os conceitos necessários sobre a física dos fotodetectores baseados em poços quânticos (QWIPs) para a compreensão e a análise dos resultados desta tese serão apresentados nesse capítulo. Dentre eles, as transições intersubbandas, os estados eletrônicos na banda de condução da heteroestrutura nas aproximações da massa efetiva e da não-parabolicidade, a interação elétron-fóton, o efeito dos dopantes no *offset* da banda de condução da heteroestrutura, os métodos numéricos usados nos cálculos da estrutura de banda de modo autoconsistente e as figuras de mérito do fotodetector serão apresentados. Esse capítulo foi baseado nos seguintes livros (Helm, 1999, Bastard, 1990, Schneider, 2007, Ashcroft, 2005).

2.1

Transições intersubbandas em poços quânticos

A radiação infravermelha é detectada no QWIP através da fotocorrente gerada quando um elétron aprisionado no estado fundamental do poço quântico é promovido para o *continuum* de estados ao absorver um fóton de energia maior que o potencial do poço. O mecanismo principal para a geração da fotocorrente é a transição intersubbanda, isto é, transição óptica entre estados dentro da banda de condução da heteroestrutura semicondutora. De modo geral, determinar as energias e as funções de onda desses estados na banda de condução da heteroestrutura não é uma tarefa simples, sendo necessário utilizar algum método aproximativo. Nesta tese, os estados eletrônicos serão calculados através das aproximações da função de envelope e da massa efetiva.

2.1.1

Aproximação massa efetiva

É conhecido que um cristal semicondutor é constituído por um grande número de átomos distribuídos periodicamente numa rede cristalina. Em primeiros princípios, a dinâmica dos portadores de cargas (elétrons e buracos) na rede cristalina é um problema de muitos corpos e a sua solução é complexa e, quase sempre, é necessário recorrer para algum método aproximativo. O método do $\mathbf{k.p}$ e o da massa efetiva são os dois métodos mais utilizados na

investigação da dinâmica dos portadores de carga na heteroestrutura semicondutora da família III-V. O método do $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ é o mais completo para estudar as dinâmicas dos portadores de carga nas bandas da heteroestrutura, em contrapartida, ela necessita de um processamento computacional considerável. A aproximação da massa efetiva é a aproximação mais simples de implementação para o estudo das propriedades elétricas e ópticas em heteroestruturas semicondutoras e outra vantagem dessa aproximação é o tempo de processamento ser consideravelmente menor quando comparado com o método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$. O método da massa efetiva consiste na alteração da massa de repouso do elétron (m_0) por um parâmetro empírico (m^*) no qual está embutido nele todas as interações que o elétron sofre da rede cristalina da heteroestrutura, por exemplo, as interações com os elétrons, as impurezas e os fônons. Esse parâmetro é conhecido como a massa efetiva do elétron no semicondutor.

A dinâmica do elétron, na aproximação massa efetiva, é governada pela equação de Schrödinger para um elétron na banda de condução. O teorema de Bloch para potenciais periódicos diz que a função de onda de um elétron na banda de condução no estado i ($\psi_i(\mathbf{r})$) pode ser fatorada em duas partes, uma função envelope que varia lentamente no período da rede ($f_i(\mathbf{r})$) e outra função periódica na rede ($u_i(\mathbf{r})$) na forma de

$$\psi_i(\mathbf{r}) = f_i(\mathbf{r}) \cdot u_i(\mathbf{r}). \quad (2-1)$$

Para o caso do elétron num semicondutor, a função envelope reduz numa função de onda plana $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, sendo \mathbf{k} o vetor de onda do elétron e \mathbf{r} o vetor posição na rede. Por outro lado, em uma heteroestrutura, a função envelope vai depender do parâmetro de rede de cada semicondutor. Assumindo que o parâmetro de rede é o mesmo em toda a heteroestrutura, a equação de Schrödinger na aproximação massa efetiva, se torna

$$\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \nabla f_i(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})f_i(\mathbf{r}) = E_i f_i(\mathbf{r}). \quad (2-2)$$

Neste caso $m^*(\mathbf{r})$ é a massa efetivada do elétron em cada semicondutor e $V(\mathbf{r})$ é o potencial devido ao *offset* da banda condução da heteroestrutura. Considerando que a heteroestrutura foi crescida de forma epitaxial, camada por camada, a função envelope pode ser fatorada novamente em uma função de onda plana no plano perpendicular ao crescimento (x, y) e uma função na direção do crescimento ($\phi(z)$), na forma de

$$f_{n,k_\perp}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{ik_\perp \cdot \mathbf{r}} \phi(z), \quad (2-3)$$

sendo $k_\perp = (k_x, k_y, 0)$ o vetor de onda no plano perpendicular ao crescimento, A a área da heteroestrutura. O potencial devido ao *offset* é constante em cada

semicondutor, logo o potencial é a uma função dependente apenas na direção de crescimento z , $V(\mathbf{r}) = V(z)$. A equação de Schrödinger pode ser dividida numa parte dependente do plano perpendicular e outra dependente da direção de crescimento, na forma de

$$\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \phi_n(z) + V(z) \phi_n(z) = E_n \phi_n(z). \quad (2-4)$$

A energia total é a soma da energia do elétron livre na direção perpendicular mais a autoenergia da solução da equação unidimensional

$$E_{n,k_\perp} = E_n + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m^*} \quad (2-5)$$

sendo E_n a energia da subbanda que depende do potencial $V(z)$.

Em geral, a massa efetiva do elétron m^* não é a mesma em toda a heteroestrutura. Levando em consideração que o operado d/dz não comuta com o operador $1/m(z)$, a eq. 2-4 requer que $\phi_n(z)$ e $(1/m^*)d\phi_n(z)/dz$ sejam iguais na interface entre os semicondutores (z_{AB}), na forma de

$$\phi_n^A(z_{AB}) = \phi_n^B(z_{AB}), \quad (2-6)$$

$$\frac{1}{m^{*A}} \left. \frac{d\phi_n^A(z)}{dz} \right|_{z=z_{AB}} = \frac{1}{m^{*B}} \left. \frac{d\phi_n^B(z)}{dz} \right|_{z=z_{AB}}. \quad (2-7)$$

Essas são as condições de contorno de BenDaniel-Duke (BenDaniel, 1966). Com isso, a continuidade da função de onda e a densidade de corrente são conservadas na interface.

Na próxima seção a interação elétron-fóton será apresentada.

2.2

Interação elétron-radiação

A interação entre o elétron confinado no poço quântico e a radiação infravermelha é o principal processo na geração da fotocorrente. Nesta tese, essa interação será abordada numa aproximação semi-clássica, ou seja, o elétron será abordado segundo às leis da mecânica quântica e o campo eletromagnético será tratado classicamente (Bastard, 1990).

O hamiltoniano do elétron com carga elétrica e na presença de um campo eletromagnético é dado por

$$H = \frac{(\mathbf{P} - e\mathbf{A})^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}), \quad (2-8)$$

sendo \mathbf{P} o momento conjugado e m^* a massa efetiva do elétron, \mathbf{A} o potencial vetor do campo eletromagnético e $V(\mathbf{r})$ o *offset* da banda de condução.

O hamiltoniano, eq. 2-8, pode ser escrito como

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m^*} - \frac{e}{2m^*} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} - \frac{e}{2m^*} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \frac{q^2 A^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}). \quad (2-9)$$

O termo quadrático do potencial vetor está relacionado com efeitos não-lineares e eles serão desconsiderados nessa tese. Considerando que os operadores momento e potencial vetor não comutam entre si, o hamiltoniano pode ser reorganizado em duas partes

$$H = H_0 - H_{e-r} \quad (2-10)$$

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}) \quad (2-11)$$

$$H_{e-r} = \frac{e}{2m^*} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}). \quad (2-12)$$

O termo H_0 é o hamiltoniano do elétron na heteroestrutura na ausência do campo eletromagnético e o segundo termo H_{e-r} é o hamiltoniano da interação radiação-elétron.

A parte elétrica da onda eletromagnética incidente na heteroestrutura pode ser escrita na forma de onda plana

$$\mathbf{E} = E_0 \mathbf{e} \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t), \quad (2-13)$$

sendo E_0 a amplitude da onda, \mathbf{q} o vetor propagação e \mathbf{e} o vetor de polarização linearmente perpendicular ao vetor \mathbf{q} . O campo eletromagnético será escrito no *gauge* de Coloumb, isto é, o potencial elétrico associado é nulo e o campo elétrico é escrito como $\mathbf{E} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$. Com isso, o potencial vetor é escrito

$$\mathbf{A} = \frac{E_0 \mathbf{e}}{\omega} \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t) = \frac{iE_0 \mathbf{e}}{2\omega} e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + c.c \quad (2-14)$$

sendo *c.c* o complexo conjugado.

Outra aproximação que pode ser aplicada ao potencial vetor é a aproximação de dipolo, isto é, aproximar o termo exponencial à unidade. Essa aproximação é usada quando o comprimento de onda da onda incidente é muito maior que a dimensão característica do sistema, neste caso, a espessura do poço quântico. Geralmente, a espessura do poço quântico é na ordem de alguns nanômetros e o comprimento de onda para a transição intersubbanda é na ordem de micrômetros. Com essa aproximação, os operadores momento linear e potencial vetor comutam entre si e o hamiltoniano da interação elétron-fóton se reduz num único termo, ou seja,

$$H_{e-r} = \frac{e}{m^*} \frac{iE_0}{2\omega} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}). \quad (2-15)$$

A probabilidade de transição entre o estado inicial, $|\psi_i\rangle$, e o estado final, $|\psi_f\rangle$, sobre a influência do campo eletromagnético é calculada via regra de ouro de Fermi, na forma de

$$P_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | H_{inter} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - E). \quad (2-16)$$

Sendo H_{inter} o hamiltoniano da interação. A probabilidade de transição para à interação elétron-fóton, eq. 2-15, é escrita como

$$P_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{e^2}{m^{*2}} \frac{E_0^2}{4\omega^2} |\langle \psi_f | (\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}) | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - E). \quad (2-17)$$

A função delta de Dirac diz que a transição ocorre apenas quando a energia da radiação incidente é igual a diferença de energia entre os dois autoestados.

O operador momento pode ser reescrito através da identidade de comutadores (Cohen, 1991)

$$\mathbf{p} = \frac{m^*}{i\hbar} [H, \mathbf{r}]. \quad (2-18)$$

A matriz de interação se torna

$$\langle \psi_f | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | \psi_i \rangle = \frac{m^*}{i\hbar} \langle \psi_f | \mathbf{e} \cdot [H, \mathbf{r}] | \psi_i \rangle = \frac{m^*}{i\hbar} (E_f - E_i) \langle \psi_f | \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} | \psi_i \rangle, \quad (2-19)$$

sendo $|\psi\rangle$ os autoestados do hamiltoniano H_0 . A probabilidade de transição é escrita como

$$P_{ij} = \frac{\pi e^2 E_0^2}{4\hbar^2 m^{*2} \omega^2} \left\{ \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_f - E_i)^2 |\langle \psi_f | (\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}) | \psi_i \rangle|^2 \right\} \delta(E_f - E_i - E). \quad (2-20)$$

A partir da matriz $\langle \psi_f | (\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}) | \psi_i \rangle$ é possível obter a regra de seleção da polarização da onda incidente para as transições intersubandas. Conforme visto, o autoestado $|\psi\rangle$ pode ser fatorado numa função de onda plana no plano perpendicular ao crescimento e outra função na direção de crescimento. Portanto a matriz se torna

$$\langle \psi_f | (\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}) | \psi_i \rangle = \int \int d_{\perp} dz e^{-ik_{\perp} \cdot \mathbf{r}} \phi_f^*(z) [e_{\perp} r_{\perp} + e_z r_z] e^{ik_{\perp} \cdot \mathbf{r}} \phi_i(z), \quad (2-21)$$

ou na forma,

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | (\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}) | \psi_f \rangle &= \frac{1}{A} \int \int \phi_f^*(z) [e_z z] \phi_i(z) e^{-i(k_{\perp} - k'_{\perp}) r_{\perp}} d_{\perp} dz + \\ &+ \frac{1}{A} \int [e_{\perp} r_{\perp}] e^{-i(k_{\perp} - k'_{\perp}) r_{\perp}} dr_{\perp} \int \phi_f^*(z) \phi_i(z) dz. \end{aligned} \quad (2-22)$$

Considerando que as autofunções são ortonormalizadas, o segundo termo, que depende apenas da polarização perpendicular ao plano de crescimento, apenas será diferente de zero se o estado inicial e final forem os mesmos, isto é, $i = f$ e $k_{\perp} = k'_{\perp}$. Portanto, a transição intersubbanda será dada por

$$\langle \psi_f | (\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}) | \psi_f \rangle = \frac{1}{A} \delta_{k_{\perp} k'_{\perp}} e_z \int \phi_f^*(z) z \phi_i(z) dz. \quad (2-23)$$

Com isso, a transição intersubbanda ocorre apenas quando a polarização da onda estiver na direção de crescimento da heteroestrutura e o vetor de onda perpendicular precisa ser conservado $k_{\perp} = k'_{\perp}$.

A eq. 2-20 se torna

$$P_{ij} = \frac{\pi e^2 E_0^2}{4\hbar^2 m^* \omega^2 A} \left\{ \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_f - E_i)^2 |\langle \phi_f | z | \phi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - E) \right\}. \quad (2-24)$$

O termo entre parênteses é conhecido como a força de oscilador. Essa grandeza mede o quão forte é a transição entre dois estados eletrônicos por meio de um campo oscilante, ou seja,

$$f_{fi} = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_f - E_i) |\langle \phi_i | \hat{z} | \phi_f \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - E). \quad (2-25)$$

Na implementação numérica, o espectro de absorção é calculado a partir dos autoestados da heteroestrutura e a função delta de Dirac é aproximada por uma função lorentziana (Sakurai, 1995) na forma de

$$\delta(E_f - E_i - E) = \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \left(\frac{\Gamma}{2\pi} \right) \frac{1}{(E - (E_f - E_i))^2 + \Gamma^2/4} \quad (2-26)$$

sendo Γ a largura de meia altura da lorentziana. O espectro de absorção entre o estado inicial e todos os demais estados excitados da banda de condução será dado por

$$\alpha_n(E) = \sum_n \frac{1}{2\pi} \frac{f_{ni} \Gamma}{(E - (E_n - E_i))^2 + \Gamma^2/4}. \quad (2-27)$$

Outra importante informação física sobre a banda de condução da heteroestrutura é a posição do nível de Fermi, ou seja, quais estados eletrônicos estão inicialmente populados. Na próxima seção será apresentado o método usado calcular o nível de Fermi num poço quântico na aproximação não-parabólica do vetor de onda do elétron.

2.3

Nível de Fermi em um poço quântico na aproximação da não parabolicidade

A definição do nível de Fermi, na teoria de bandas, é a energia hipotética de um nível eletrônico tal que, em equilíbrio termodinâmico, a probabilidade dele está populado é de 50%. O nível de Fermi pode alterar as propriedades elétricas e ópticas dos semicondutores, pois ele indica quais estados estão ocupados. Por exemplo, o perfil do espectro de absorção depende diretamente dos estados inicialmente populados.

O nível de Fermi em heteroestruturas unidimensionais (poço quântico semiconductor) pode ser determinado através do cálculo da densidade planar dos elétrons na subbanda ocupada. A densidade planar dos elétrons é dada pela integral do produto entre a densidade de estados bidimensional ($\rho^{2D}(E)$) e a distribuição de Fermi-Dirac ($f^{FD}(E)$), na forma de

$$N = \int_{subbanda} f^{FD}(E) \rho^{2D}(E) dE. \quad (2-28)$$

No qual

$$\begin{aligned} f^{2D}(E) &= \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} \\ \rho^{2D}(E) &= \frac{m_d^*(E)}{\pi \hbar^2} \\ m_d^*(E) &= m^*(0)[1 + 2\alpha E]. \end{aligned} \quad (2-29)$$

Onde E_F é o nível de Fermi, $m_d^*(E)$ a massa efetiva da densidade de estados bidimensional, $m^*(0)$ é a massa efetiva do elétron no fundo da subbanda e α é o coeficiente da não-parabolicidade. A densidade de estados foi obtida considerando a não-parabolicidade na relação de dispersão do vetor de onda do elétron no poço quântico. Essa aproximação foi modelada fazendo a massa efetiva do elétron ser dependente da energia (no apêndice I é apresentada a dedução matemática dessa densidade planar não-parabólica). Usando a eq. 2-29, o número de elétrons se torna

$$N = \frac{m^*(0)}{\pi \hbar^2} \int_{E_{min}}^{E_{max}} \frac{1 + 2\alpha E}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} dE, \quad (2-30)$$

sendo E_{min} a energia do estado fundamental e E_{max} a energia da altura do poço quântico. Geralmente, o número de elétrons é uma grandeza conhecida, sendo o nível de Fermi é a única variável desconhecida na equação 2-30. Portanto, o nível de Fermi pode ser determinado através de algum método numérico para encontrar as raízes dessa função.

O efeito da dispersão não-parabólica no nível de Fermi num poço quântico de $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ com espessura de 2.5 nm, densidade planar de $7.1 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ e o coeficiente da não-parabolicidade do $InGaAs$ sendo $\alpha = 1.14 \times 10^{-3} \text{ meV}^{-1}$ pode ser observado na Fig. 2.1. Nela é observado o perfil de potencial na direção de crescimento (linha preta) sobreposto com o estado fundamental do poço quântico (linha azul). As linhas vermelhas, contínua e tracejada, representam os níveis de Fermi considerando a dispersão não-parabólica (linha contínua) e parabólica (linha tracejada) do vetor de onda do elétron no poço quântico. O nível de Fermi considerando a dispersão parabólica é 307 meV enquanto o nível de Fermi considerando ela não-

parabolicidade é de 290 meV. Portanto, a não-parabolicidade na dispersão reduz o nível de Fermi, neste exemplo foi de 17 meV.

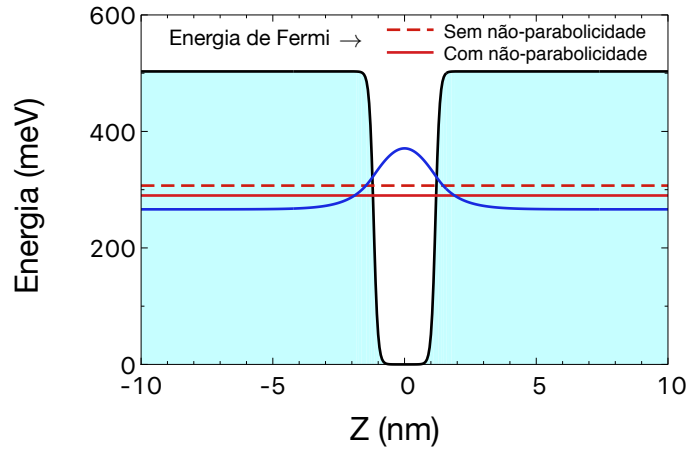


Figura 2.1: Efeito da não-parabolicidade no nível de Fermi num poço quântico com espessura de 2.5 nm e densidade planar dos elétrons de $7.1 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ a 77 K. O nível de Fermi considerando a dispersão parabólica está representado pela linha vermelha tracejada, enquanto o nível de Fermi considerando ela não-parabólica está representado pela linha vermelha contínua. Há uma redução no nível de Fermi quando é considerada a dispersão não-parabólica, neste caso esse redução foi 307 meV para 290 meV.

Além do nível de Fermi, os dopantes na heteroestrutura dão origem num campo eletrostático e para algumas aplicações é necessário conhecer o seu efeito no perfil do *offset* na banda de condução.

2.4

O efeito dos dopantes no *offset* da banda de condução da heteroestrutura

Até o momento, a dinâmica do elétron foi investigada apenas sob a influência do potencial devido ao *offset* da banda de condução. Para fotodetectores, algumas camadas da heteroestrutura são dopadas com impurezas tipo-*n* com o objetivo de popular o estado fundamental do poço quântico com elétrons. Dependendo do número de camadas dopadas e/ou o nível dos dopantes, o potencial eletrostático ($V_e(z)$) gerado por esse acúmulo de elétrons pode alterar o perfil de potencial da heteroestrutura. Como exemplo, o potencial eletrostático (linha vermelha) gerado pelos dopantes tipo-*n* quando eles estão localizados no poço quântico ou nas barreiras entre o poço quântico pode ser observado na Fig. 2.2. A concentração planar e a espessura dos dopantes são $1.5 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$ e 3.0 nm, respectivamente. Para o caso do poço quântico dopado Fig. 2.2(a-b), o potencial eletrostático gerado é pouco perceptível quando comparado com o potencial gerado pelo *offset* da banda de condução, ele é apenas observado com *zoom* no fundo do poço. Enquanto no caso das barreiras dopadas Fig. 2.2(c-d),

uma perturbação considerável é observada no perfil de potencial em volta do poço quântico.

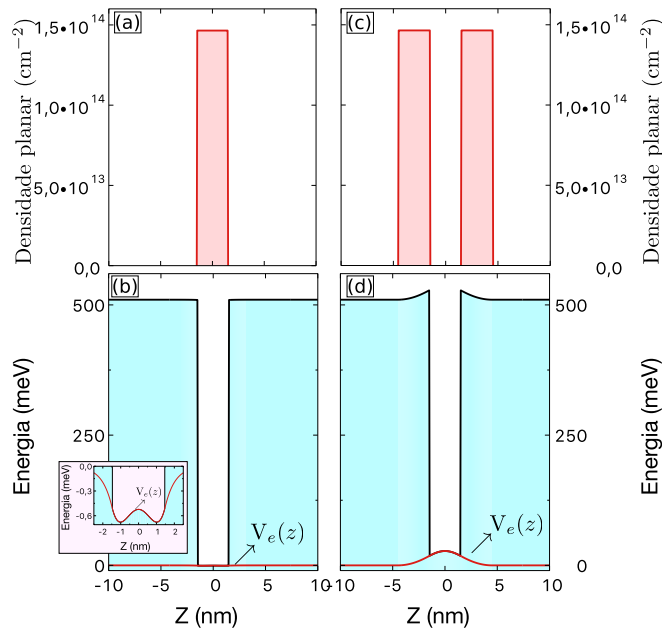


Figura 2.2: Efeito da localização dos dopantes tipo- n em um poço quântico de $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ com espessura de 3.0 nm e densidade planar de $1.5 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$. (a-b) O perfil da densidade planar e o perfil de potencial eletrostático gerado no *offset* da banda de condução para o caso do poço quântico ser dopado. O potencial eletrostático apenas é observado com o *zoom* no fundo do poço. (c-d) O perfil de densidade planar de elétrons e o potencial criado por eles para o caso das barreiras em volta do poço quântico dopadas. O potencial eletrostático gerado é perceptível no *offset* da banda de condução

2.5

O cálculo autoconsistente

Como verificado na seção anterior, para uma melhor compreensão da dinâmica do elétron na banda de condução da heteroestrutura é necessário levar em consideração o efeito gerado pelos dopantes ionizados na heteroestrutura. Esse efeito pode ser representado pela adição de um termo referente ao potencial eletrostático ($V_e(z)$) no hamiltoniano do elétron na banda de condução, eq. 2-4. A intensidade e o formato do potencial eletrostático depende da concentração e da espessura dos dopantes, e ele é determinado através da solução da equação de Poisson. Neste caso, a estrutura eletrônica precisa ser determinada de modo autoconsistente, isto é, a função de onda do elétron precisa satisfazer as equações de Schrödinger e de Poisson simultaneamente.

O método autoconsistente em forma de diagrama de blocos é apresentado na Fig. 2.3. Em resumo, o cálculo autoconsistente é iniciado com a solução da equação de Schrödinger considerando apenas o potencial devido ao *offset* da

banda de condução da heteroestrutura. Com a função de onda do elétron, a densidade eletrônica é calculada e a equação de Poisson pode ser resolvida para determinar o potencial eletrostático gerado pelos dopantes ionizados. O próximo passo é adicionar esse potencial eletrostático ao potencial do *offset* e resolver a equação de Schrödinger novamente para obter a nova função de onda do elétron. Para verificar se a solução autoconsistente convergiu, o desvio padrão das energias é calculado e comparado com o valor de tolerância, neste tese foi usado uma tolerância de 10^{-8} . Caso o desvio padrão for menor que a tolerância, o problema foi resolvido de modo autoconsistente. Caso contrário, o cálculo é refeito até que o desvio padrão seja menor que a tolerância.

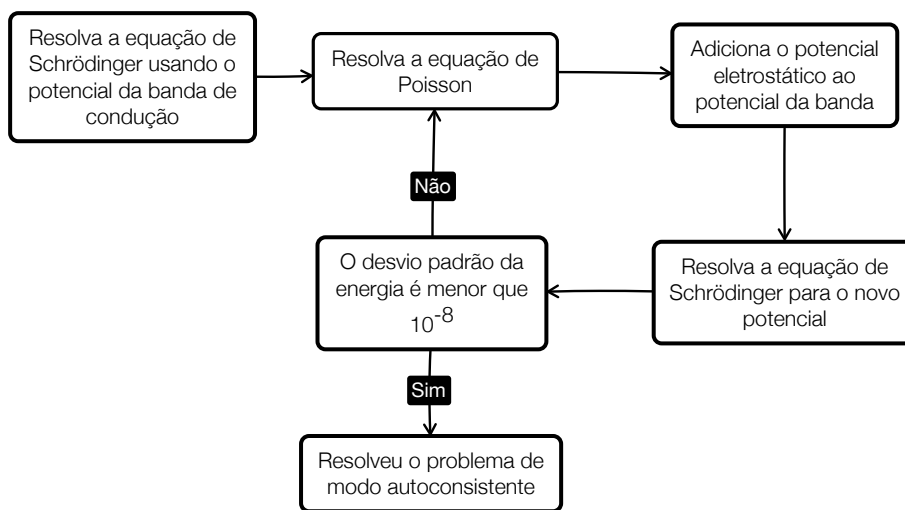


Figura 2.3: Diagrama de blocos do método de interação autoconsistente

Os métodos numéricos utilizados nas soluções das equações de Schrödinger e Poisson serão apresentados na próxima seção.

2.5.1

A solução da equação de Schrödinger via método do *Split-Operator*

A equação de Schrödinger será resolvida numericamente através do método do *Split-Operator* (Degani, 2010). Esse método consiste em calcular a evolução temporal da função de onda através da fatorização do operador evolução temporal em diversas exponenciais para cada operador do hamiltoniano, esse método está mais detalhado no apêndice II. A evolução de uma função de onda no tempo t até $t + \Delta t$ é governada pelo operador evolução temporal na forma de

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} \hat{H} dt} \psi(x, t), \quad (2-31)$$

sendo \widehat{H} o hamiltoniano dado pela eq. 2-4. A equação 2-31 não pode ser resolvida exatamente, sendo necessário o uso de algum método numérico para calcular a evolução da função de onda. O método do *Split-Operator* consiste na fatorização do operador temporal em diversas exponenciais na seguinte forma

$$\psi(z, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(z)\Delta t}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \widehat{P} \frac{1}{2m^*(z)} \widehat{P} \Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(z)\Delta t}{2}} \psi(z, \Delta t) + O(\Delta t^3), \quad (2-32)$$

onde o erro associado nessa aproximação é da ordem de (Δt^3) . Esse erro é devido a não comutatividade entre os operadores \widehat{P} e \widehat{x} do Hamiltoniano.

Esse método também pode ser utilizado para calcular os autoestados (autofunções e as autoenergias) da heteroestrutura. Neste caso, a autofunção é obtida através da evolução de uma função arbitraria dentro no domínio do tempo imaginário ($t = -i\tau$). A grande vantagem do método do *Split-Operator* é a sua flexibilidade de aplicação, desde para evoluir temporalmente uma função de onda até para determinar os autoestados da heteroestrutura.

2.5.2

Equação de Poisson

A equação de Poisson será resolvida numericamente por dois métodos diferentes: via elementos finitos (Tan, 1990) ou através da aproximação desse problema ao cálculo do potencial eletrostático gerado por um plano infinito de cargas (Harrison, 2016). No apêndice III, esses dois métodos numéricos são apresentados com mais detalhes.

2.5.2.1

Solução via método dos elementos finitos

O primeiro método é a solução da equação de Poisson unidimensional na aproximação dos elementos finitos. A equação de Poisson é escrita como

$$\frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{d}{dz} V_e(z) = -e^2 \rho(z), \quad (2-33)$$

sendo $V_e(z)$ o potencial eletrostático gerado pelos dopantes, $\epsilon(z)$ a constante dielétrica na direção de crescimento e $\rho(z)$ a densidade de carga. A densidade de carga é dada por

$$\rho(z) = (n(z) - N_d^+), \quad (2-34)$$

no qual N_d^+ é a densidades dos dopantes doadores ionizados e $n(z)$ é a densidade eletrônica. A densidade é escrita como

$$n(z) = \sum_i N_i |\psi_i(z)|^2, \quad (2-35)$$

onde N_i é o número total de portadores por seção transversal na i -ésima subbanda, dada por

$$N_i = \frac{k_B T m^*}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + e^{(E_F - E_i)/k_B T} \right], \quad (2-36)$$

no qual E_i é a energia da subbanda, T é a temperatura da heteroestrutura, k_B é a constante de Boltzmann, \hbar é a constante de Planck reduzida, m^* é a massa efetiva do elétron dentro do poço quântico e E_F é a energia de Fermi.

2.5.2.2

Solução via potencial eletrostático gerado por um plano infinito de cargas

O segundo método consiste em usar a simetria planar dos poços para reduzir o problema no cálculo do potencial elétrico gerado por um plano infinito de cargas. Em geral, o potencial eletrostático em um ponto z ($V_e(z)$) é calculado a partir do campo elétrico ($E(z)$) gerado por uma densidade de carga ($\sigma(z)$) na forma de

$$V_e(z) = - \int_{-\infty}^z E(z) \cdot dz. \quad (2-37)$$

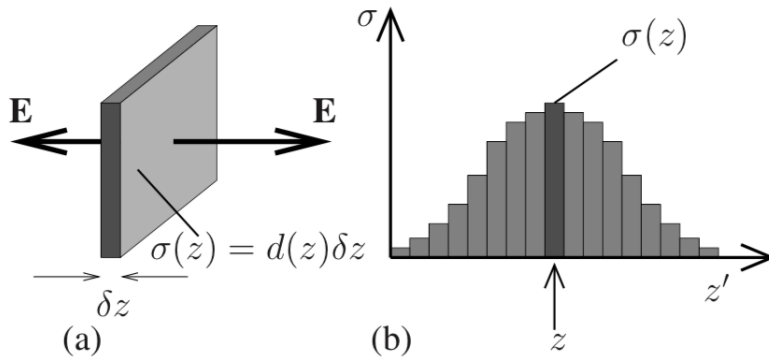


Figura 2.4: (a) Campo elétrico gerado por um único plano de cargas infinito com espessura de δz . (b) Densidade de carga planar devido a diversos planos infinito empilhados.

O campo elétrico gerado por um plano infinito de espessura δz com densidade de carga σ e permissibilidade ϵ , Fig. 10.1(a), é dado por

$$E(z) = \frac{\sigma(z)}{2\epsilon(z)}. \quad (2-38)$$

onde a densidade de carga é escrita como

$$\sigma(z) = q [N_i \psi^*(z) \psi(z) - d(z)] \delta z, \quad (2-39)$$

sendo $\psi(z)$ a função de onda do elétron, $d(z)$ a densidade volumétrica dos elétrons na posição z e N_i o número de elétrons por seção transversal em cada subbanda do poço quântico, dada por

$$N_i = \frac{k_B T m^*}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + e^{(E_F - E_i)/k_B T} \right]. \quad (2-40)$$

O segundo método é mais simples, estável e rápido do que o primeiro método para o cálculo do potencial eletrostático unidimensional. A sua única desvantagem é que ele é apenas aplicado em problemas unidimensionais.

2.6

Caracterizações elétricas e ópticas e as figuras de mérito dos fotodetectores

A qualidade do fotodetector é verificada através das medidas elétricas e ópticas, tais como os espectros de absorção e fotocorrente. Com essas medidas é possível avaliar o crescimento da amostra e o seu processamento em fotodetectores através dos picos de energias do espectro de absorção e do perfil do espectro de fotocorrente. Essas medidas fornecem informações qualitativas sobre o fotodetector, mas elas não podem ser usadas para avaliar o seu desempenho e compará-lo com outros fotodetectores. A comparação do desempenho entre os diversos fotodetectores é feita através das figuras de mérito, tais figuras são as medidas de corrente de escuro, temperatura BLIP, responsividade, corrente de ruído e detectividade. Nesta seção essas grandezas físicas serão apresentadas.

2.6.1

Espectro de absorção

Geralmente, o espectro de absorção é a primeira caracterização óptica realizada na amostra, com ela é possível verificar a qualidade do crescimento através dos picos de energias no espectro de absorção. Experimentalmente, o coeficiente de absorção da heteroestrutura pode ser determinado através da lei de Beer-Lambert, essa lei relaciona a intensidade do feixe I após ele atravessar um material de largura L e com coeficiente de absorção α_0 . A lei de Beer-Lambert é escrita como

$$I = I_0 e^{-\alpha_0 L}, \quad (2-41)$$

sendo I_0 a intensidade do feixe antes de incidir na amostra. A absorbância é definida como o logaritmo da razão entre as intensidades, na forma de

$$\text{Absorbância} \equiv -\log_{10} \left[\frac{I}{I_0} \right] = -\log_{10} \left[e^{-\alpha_0 L} \right]. \quad (2-42)$$

Com isso, é possível determinar o coeficiente de absorção da heteroestrutura a partir do espectro de absorbância.

A absorbância é medida com o espectrômetro de radiação infravermelha por transformada de Fourier (do inglês FTIR). Este equipamento é formado

por um interferômetro de Michelson e uma fonte de radiação infravermelha de espectro largo. Um detector MCT (Cádmio Mercúrio Telureto ou HgCdTe) é usado para determinar a intensidade do espectro da fonte após a interação com a amostra (no apêndice II é apresentado o funcionamento do FTIR com mais detalhe).

Conforme apresentado na seção 2.2, as transições intersubbandas apenas ocorrem quando a polarização da radiação infravermelha está na direção do crescimento da amostra. A intensidade do feixe com polarização na direção de crescimento é dita como I_{TM} e a intensidade do feixe com polarização no plano perpendicular ao crescimento é chamada de I_{TE} . A intensidade com a polarização TM fornece informações não apenas das absorções intersubbandas, mas também de todas as outras absorções ópticas do sistema, por exemplo pelo caminho óptico, pelo substrato e pelos portadores livres. Por outro lado, a intensidade com a polarização TE fornece informações sobre todas essas absorções exceto das absorções intersubbandas. Portanto, a absorbância devido apenas das transições intersubbandas é obtida pela razão entre as intensidades TM e TE, ou seja,

$$A = -\log_{10} \left(\frac{I_{TM}}{I_{TE}} \right). \quad (2-43)$$

No geral, a transição intersubbanda apresenta uma baixa probabilidade de ocorrência, na ordem de 1-10%, dificultando assim a medida da absorbância. Uma maneira de aumentar a taxa de absorção dos fótons pelos elétrons confinados nos poços quânticos da região ativa da amostra é através do processamento da amostra na geometria guia de ondas. O guia de onda é formado com o polimento das bordas da amostra com ângulo de 45° . Neste caso, a radiação infravermelha incide normalmente em uma das bordas da amostra e ela atravessa diversas vezes a região ativa até sair pela outra extremidade da amostra, conforme esquematizada na Fig. 2.5.

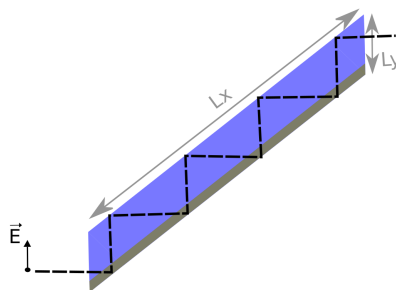


Figura 2.5: Representação da amostra processada na geometria guia de ondas

Considerando a geometria da amostra e a lei de Beer-Lambert, o coeficiente de absorção pode ser calculado através da relação

$$\alpha_0(\text{cm}^{-1}) = \frac{\ln(10^{\text{Absorbância}})}{\sqrt{2} \cdot n_r \cdot r_{at}}, \quad (2-44)$$

sendo r_{at} o comprimento da região ativa e n_r o número de reflexões que a radiação sofre ao atravessar a amostra na configuração guia de ondas. O número de reflexões na configuração guia de ondas é dado por

$$n_r = \frac{Lx}{2Ly}, \quad (2-45)$$

sendo Lx e Ly o comprimento e a espessura da amostra, respectivamente.

A partir do coeficiente de absorção experimental é possível calcular a eficiência quântica do pico de absorção da amostra, através da equação

$$\eta_{abs} = \frac{(1 - e^{-2 \cdot \alpha_0 \cdot r_{at}})}{2}. \quad (2-46)$$

A eficiência quântica interna fornece a taxa de absorção dos fótons pelos elétrons confinados nos poços quânticos. Vale ressaltar que o valor máximo para a eficiência quântica interna é $1/2$, por causa da regra de seleção da polarização da radiação incidente nas transições intersubbandas.

2.6.2

Corrente de escuro

Um dos primeiros testes de qualidade após o processamento da amostra no formato de *mesa* é a medida de corrente de escuro *versus* tensão elétrica em função da temperatura ($I-V$). As curvas de $I-V$ fornecem varias informações sobre o dispositivo, tais como: a uniformidade do crescimento da amostra, a qualidade do processamento e a intensidade da corrente de escuro. No caso da corrente de escuro, a curva $I-V$ fornece informações sobre a quantidade de corrente indesejada que o fotodetector está gerando e os mecanismos físicos responsáveis por ela. A medida da corrente de escuro é feita com o fotodetector dentro de um escudo de calor para eliminar a corrente gerada pela radiação de fundo do ambiente. Para o funcionamento do fotodetector, a fotocorrente gerada pela radiação incidente a ser detectada precisa ser maior que a corrente de escuro intrínseca do fotodetector.

A origem dessa corrente de escuro parasita pode ser atribuída à três tipos de mecanismos: a emissão termiônica (i), o tunelamento termicamente assistido (ii) e o tunelamento entre os estados ligados dos poços (iii). Esses três mecanismos estão esquematizados na Fig. 2.6. A emissão termiônica acontece quando o elétron no estado fundamental absorve energia térmica da rede cristalina suficiente para vencer a barreira de potencial ($E > E_B$). O tunelamento termicamente assistido ocorre quando a energia térmica absorvida pelo elétron não é maior que a barreira de potencial ($E < E_B$), mas existe uma probabilidade finita do elétron tunelar através do potencial triangular

formado no *offset* da banda condução quando *bias* de tensão é aplicado sobre o fotodetector. Por fim, o tunelamento quântico entre os estados fundamentais dos poços quânticos. Os dois primeiros mecanismos têm forte dependência com a temperatura, enquanto o ultimo mecanismo tem a característica de ser independente da temperatura e é mais evidente em baixas temperaturas.

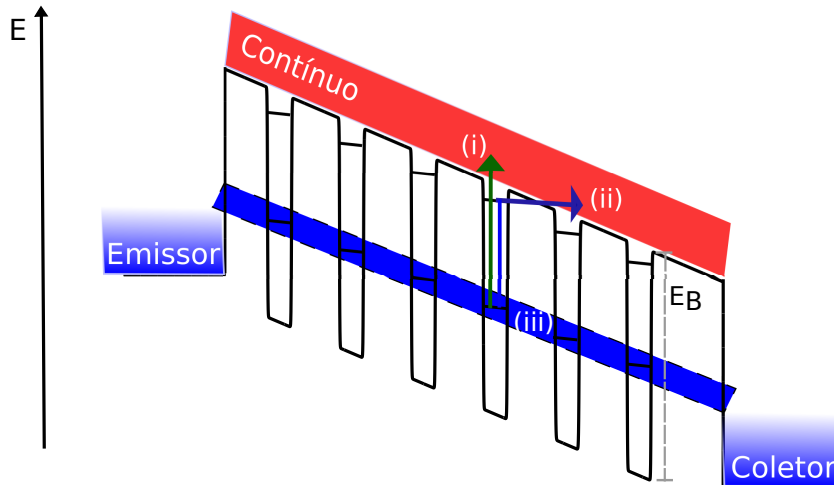


Figura 2.6: Representação em diagrama de energias dos mecanismos responsáveis pela corrente de escuro em fotodetectores baseados em poços quânticos, que são: a emissão termiônica (i), o tunelamento termicamente assistido (ii) e o tunelamento entre os poços quânticos (iii).

2.6.3

O Produto entre a resistência diferencial e a área do fotodetector (R_0A)

O produto entre a resistência diferencial a zero *bias* e a área do detector (R_0A) é uma figura de mérito importante para os fotodetectores fotovoltaicos. A resistência diferencial pode ser determinada a partir das curvas $I-V$ do fotodetector. O produto R_0A é inversamente proporcional a corrente de escuro, indicando que maior resistência diferencial menor será a corrente de escuro.

O produto $\log(R_0A)$ em função do inverso da temperatura apresenta dois comportamentos distintos. Um comportamento constante em baixas temperaturas, devido à corrente de escuro gerada pelo tunelamento quântico entre os estados fundamentais dos poços quânticos da heteroestrutura. Por outro lado, o produto $\log(R_0A)$ decresce exponencialmente com o aumento da temperatura, em função do aumento da corrente de escuro de origem térmica. Para altas temperaturas, o produto R_0A em função da temperatura pode ser modelado com a lei de Arrhenius (Levine,1993). Essa lei relaciona a dependência com a temperatura de uma constante cinética. Neste caso, a lei de Arrhenius para fotodetector baseado em poços quânticos diz que a dependência da temperatura do produto R_0A é na forma de

$$R_0A = Be^{-E_a/(k_B T)}, \quad (2-47)$$

sendo B um fator pre-exponencial, E_a a energia de ativação, k_B a constante de Boltzmann. A Energia de ativação pode ser obtida experimentalmente através da linearização da eq. 2-47, na forma de

$$\ln(R_0A) = \frac{-E_a}{k_B} \frac{1}{T} + \ln B. \quad (2-48)$$

Sendo a energia de ativação igual ao coeficiente linear da reta multiplicado pela constante de Boltzmann.

Para o poço quântico, a energia de ativação (E_a) é definida como a diferença entre o nível de Fermi (E_F) e o início do contínuo de estados. O início do contínuo de estados para um poço quântico simples é dado pela altura da barreira quântica. Então, a energia de Fermi pode ser determinada experimentalmente a partir da energia de ativação. A energia de ativação de um poço quântico com espessura de 4.0 nm é exemplificada na Fig. 2.7.

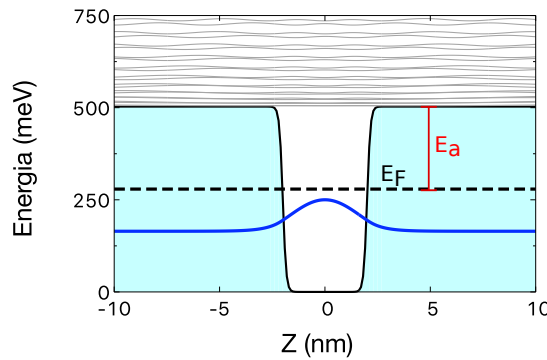


Figura 2.7: Energia de ativação em um poço quântico com 4.0 nm de espessura. A energia de ativação é definida como a diferença entre a energia de Fermi e o início do contínuo de estados.

2.6.4 Responsividade

O objetivo do fotodetector é transformar a radiação infravermelha incidente em uma corrente elétrica. A grandeza física que mede a taxa de fotocorrente, I_f , gerada pela potência de radiação incidente, P_{IR} , no fotodetector é a responsividade (\mathfrak{R}), que é dada por

$$\mathfrak{R} = \frac{I_f}{P_{IR}(\lambda)} \equiv \frac{[A]}{[W]}. \quad (2-49)$$

A responsividade e a potência incidente podem ser expressas com as características microscópicas do fotodetector na forma de

$$\begin{aligned} I_f &= e\Phi_s\eta g \\ P_{IR} &= \Phi_s ch/\lambda, \end{aligned} \quad (2-50)$$

sendo Φ_s o fluxo da radiação incidente, η a eficiência quântica interna, g o ganho fotocondutivo, c a velocidade da luz no vácuo, h a constante de Planck e λ o comprimento de onda da radiação. A eficiência quântica está relacionada com os elétrons fotoexcitados por fótons incidentes e o ganho está relacionado com os elétrons fotoexcitados coletados pelos contatos elétricos do fotodetector com os elétrons fotoexcitados. Com isso, a responsividade é escrita em função das características do fotodetector na forma de

$$\mathfrak{R} = \frac{e\eta}{hc} \lambda g. \quad (2-51)$$

A responsividade não é a melhor figura de mérito para comparar o desempenho entre diversos fotodetectores, pois ela é uma grandeza que depende do tamanho do fotodetector e não leva em conta o ruído gerado pelo fotodetector. Sendo necessário o uso de uma figura de mérito mais universal.

2.6.5 Detectividade

A detectividade é a figura de mérito mais importante para os detectores, pois com ela é possível fazer a comparação do desempenho entre eles. A detectividade é definida como o inverso da potência equivalente ao ruído (do inglês *Noise-equivalent power* (NEP))

$$D = \frac{1}{NEP}. \quad (2-52)$$

sendo NEP o menor nível de radiação detectável no detector e ela é definida como a razão entre a responsividade e a corrente de ruído do fotodetector,

$$NEP = \frac{\mathfrak{R}}{I_{ruído}}. \quad (2-53)$$

A detectividade normalizada (D^*) é a melhor grandeza para comparar detectores de diferentes tamanhos e largura de banda utilizada na medida do ruído. A detectividade normalizada (D^*) é escrita como

$$D^* = \frac{\sqrt{A_d \Delta f}}{I_{ruído}} \mathfrak{R}. \quad (2-54)$$

Na próxima seção serão discutidos os mecanismos físicos responsáveis pela corrente de ruído gerada pelo fotodetector.

2.6.5.1

Corrente de ruído

O termo ruído refere-se as flutuações espontâneas que ocorrem na corrente elétrica, ou na tensão, em dispositivos elétricos. No contexto dos fotodetectores, a corrente de ruído gerada está, principalmente, relacionada com três mecanismos distintos: o ruído térmico (ou ruído Johnson), o ruído de corrente de escuro e o ruído $1/f$. O ruído estabelece um limite inferior para o funcionamento do fotodetector, pois a corrente elétrica gerada pelas transições intersubbandas precisa ser maior ou igual a corrente de ruído gerada no fotodetector. O conhecimento dos fatores que contribuem para esse limite é crucial no processo de otimização dos fotodetectores.

Embora o ruído $1/f$ seja inerente à maioria dos processos físicos e eletrônicos, raramente ele é a contribuição principal para a corrente de ruído limitante. Geralmente, a corrente de ruído é medida no regime de altas frequências para suprimir suficientemente o ruído $1/f$. Portanto, esse ruído será negligenciado na discussão a seguir.

2.6.5.2

Ruído térmico ou ruído Johnson

O ruído térmico ocorre em qualquer dispositivo resistivo e é causado pelo movimento Browniano dos elétrons em equilíbrio térmico. A corrente devido ao ruído térmico é dada por

$$i_{\text{ruído},J}^2 = \frac{4k_B T \Delta f}{R}, \quad (2-55)$$

sendo k_B a constante de Boltzmann, T a temperatura, Δf a largura de banda da medida e R a resistência diferencial do dispositivo. O ruído térmico também é chamado de ruído branco pois o seu nível é o mesmo em todas as frequências.

O ruído térmico é o mecanismo de ruído dominante para os fotodetectores fotovoltaicos. logo, o seu desempenho é descrito pela detectividade de ruído Johnson

$$D_J^* = \Re \sqrt{\frac{R_0 A}{4k_B T}}. \quad (2-56)$$

2.6.5.3

Ruído de geração-recombinação

O ruído de geração-recombinação é causado pela flutuação no número de elétrons disponíveis para o transporte da corrente por causa da emissão e da captura aleatória dos elétrons nas armadilhas existentes na amostra. A corrente de ruído de geração-recombinação é dada por

$$i_{\text{ruído},G-R}^2 = 4eg_{\text{ruído}}I_{\text{escuro}}\Delta f \quad (2-57)$$

sendo e a carga elétrica, $g_{\text{ruído}}$ o ganho de ruído e I_{escuro} a corrente de escuro. O desempenho do fotodetector devido apenas ao ruído de corrente de geração-recombinação é descrito pela detectividade de ruído de geração-recombinação

$$D_{G-R}^* = \frac{\mathfrak{R}}{\sqrt{4eg_{\text{ruído}}I_{\text{escuro}}\Delta f}}. \quad (2-58)$$

3

Estado eletrônico vazante no contínuo

Neste capítulo será apresentada uma investigação teórica de como o estado eletrônico vazante no contínuo é construído numa superrede semicondutora assimétrica com um defeito estrutural. A relação entre o comprimento da superrede e a localização das funções de onda dos dois primeiros estados vazantes no contínuo será investigada. Outro ponto de interesse é o potencial eletrostático gerado pelos dopantes ionizados tipo- n e o seu efeito na localização das funções de onda dos estados vazantes. Todos esses casos serão avaliados através da intensidade da força de oscilador entre o estado fundamental do poço quântico de defeito e os dois primeiros estados vazantes no contínuo. As equações de Schrödinger e Poisson serão resolvidas numericamente com os métodos do *Split-Operator* e dos elementos finitos, respectivamente. O coeficiente de transmissão do elétron será calculado com o algoritmo da matriz transferência. Os parâmetros das ligas semicondutoras $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ utilizados nas simulações foram (Vurgaftman, 2001): a massa efetiva do InGaAs é $m_{\text{InGaAs}}^* = 0.0446m_0$, a constante dielétrica do InGaAs é $\epsilon_{\text{InGaAs}} = 14.3$, a massa efetiva do InAlAs é $m_{\text{InAlAs}}^* = 0.0836m_0$, a constante dielétrica do InGaAs é $\epsilon_{\text{InAlAs}} = 14.3$, o *offset* da banda de condução é $V_0 = 503 \text{ meV}$ e a constante de não-parabolicidade é $\gamma = 1.03 \times 10^{-18} \text{ m}^{-2}$.

3.1

Estados ressonantes no contínuo

É conhecido que o contínuo de estados acima de um poço quântico é formado por estados estendidos e que neste contínuo há regiões onde o coeficiente de transmissão eletrônica é aproximadamente unitário (Bastard, 1990). Na Fig. 3.1(a) é apresentado o perfil de potencial da banda de condução sobreposta com as densidades de probabilidade eletrônicas de um poço quântico simples de $\text{InGaAs}/\text{InAlAs}$ com 2.5 nm de largura e o seu coeficiente de transmissão eletrônica pode ser visto na Fig. 3.1(b). O poço quântico apresenta dois estados ligados e diversos estados estendidos no contínuo. O coeficiente de transmissão é praticamente nulo para as energias abaixo da altura da barreira (503 meV) e um comportamento oscilatório aproximando-se de um para as energias maiores que a barreira de potencial. As regiões onde o coeficiente de

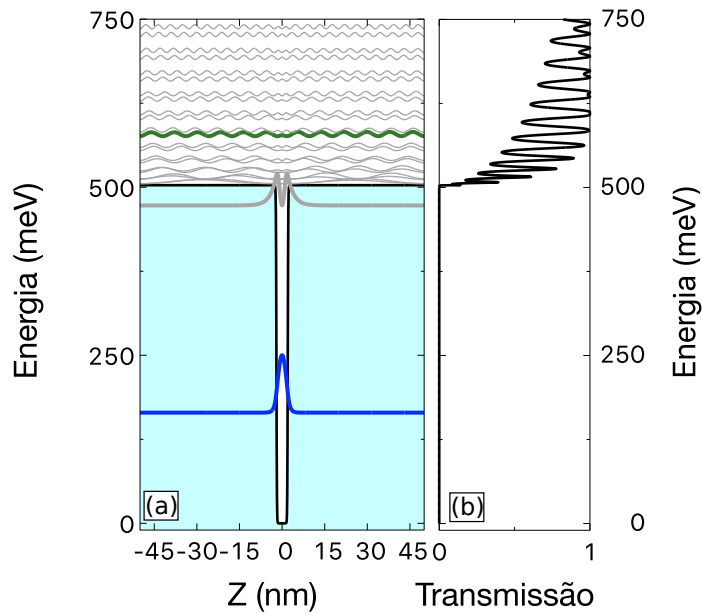


Figura 3.1: (a) Perfil de potencial de um poço quântico simples sobreposto com as probabilidades eletrônicas. A linha azul representa o estado fundamental e a linha verde representa o estado ressonante no contínuo. (b) Coeficiente de transmissão do elétron em função da sua energia. O coeficiente de transmissão é oscilatório para energias acima barreira e ele tende ao valor unitário. As regiões onde o coeficiente é próximo de um é conhecido como estados ressonantes. O primeiro estado ressonante é representado pela linha verde.

transmissão é próximo da unidade são conhecidas como bandas ressonantes. As bandas ressonantes são regiões onde o elétron não sofre qualquer espalhamento devido ao potencial do poço quântico. A energia de cada banda ressonante para o poço quântico simples pode ser determinada através da equação de transmissão eletrônica. No regime da energia do elétron maior que o potencial da barreira ($E > V_0$), a transmissão é dada por (Cohen, 1991)

$$T(E) = \left[1 + \frac{4E(E - V_0)}{V_0^2 \sin^2(k_w L_w)} \right]^{-1}, \quad (3-1)$$

onde k_w é o vetor de onda do elétron, L_w e V_0 são a largura e a profundidade do poço quântico, respectivamente. As bandas ressonantes ($T = 1$) ocorrem quando o argumento da função seno for zero, ou seja,

$$k_w L_{w,l} = n\pi. \quad (3-2)$$

Essas bandas têm grande interesse de aplicação em fotodetectores, pois elas são bons canais de escape para os elétrons fotoexcitados. O único problema desse canais é que as funções de onda desses estados são estendidas, levando à uma força de oscilador para a transição óptica iniciada do estado fundamental baixa e com isso uma baixa seletividade na energia de detecção.

Uma alternativa para o uso desse estado ressonante em fotodetectores é

fazer o confinamento espacial da sua função de onda através das interferências destrutivas e construtivas criadas por um espelho de Bragg na configuração um quarto de comprimento de onda. Esse confinamento espacial ocorre quando as espessuras do poço (L_w) e da barreira (L_b) do espelho de Bragg satisfazem, aproximadamente, a condição um quarto de comprimento de onda de Broglie para a energia do estado ressonante, ou seja,

$$\begin{aligned} K_w L_w &= \frac{\pi}{2} \\ K_b L_b &= \frac{\pi}{2}. \end{aligned} \quad (3-3)$$

As eqs. 3-2 e 3-2 são as condições necessárias para o confinamento espacial da função de onda do estado ressonante no contínuo. Na próxima seção será investigado o comprimento do espelho de Bragg necessário para o confinamento espacial do estado estendido.

3.2

Estados localizados no contínuo

O primeiro passo para a criação do estado vazante no contínuo consiste em investigar qual é o comprimento necessário da superrede para confinar a função de onda do estado ressonante. Para isso, simulações autoconsistentes serão implementadas em função do comprimento da superrede. A superrede é formada por um número inteiro de espelho Bragg, cada espelho é formado por um poço e uma barreira com espessuras de 2.0 nm e 7.0 nm, respectivamente. A espessura do poço quântico de defeito estrutural é 2.5 nm. As estruturas de bandas de uma superrede simétrica formada por um período de espelho de Bragg e outra superrede formada por cinco períodos de espelho de Bragg sobrepostas com as densidades de probabilidade eletrônicas podem ser observadas nas Fig. 3.2(a-b). Para a superrede com um período de espelho de Bragg, os dois primeiros estados localizados no contínuo (linhas verde e preta) estão parcialmente localizados na região do poço quântico de defeito. Enquanto para a superrede com cinco períodos de espelho de Bragg, as funções de onda estão completamente localizadas. Na Fig. 3.2(c) é apresentada a força de oscilador para as transições ópticas entre o estado fundamental e os dois primeiros estados confinados em função do número de período de espelho de Bragg. A amplitude da força de oscilador do primeiro estado confinado, linha verde, satura em 0.28 para uma superrede com dois ou mais períodos de espelho de Bragg. Enquanto a amplitude da força de oscilador do segundo estado localizado, linha preta, se aproxima da saturação em 0.11 com uma superrede formada por cinco períodos de espelho de Bragg. Em conclusão, para ter os

dois primeiros estados ressonantes localizados espacialmente são necessários, no mínimo, uma superrede formada por cinco períodos de espelho de Bragg.

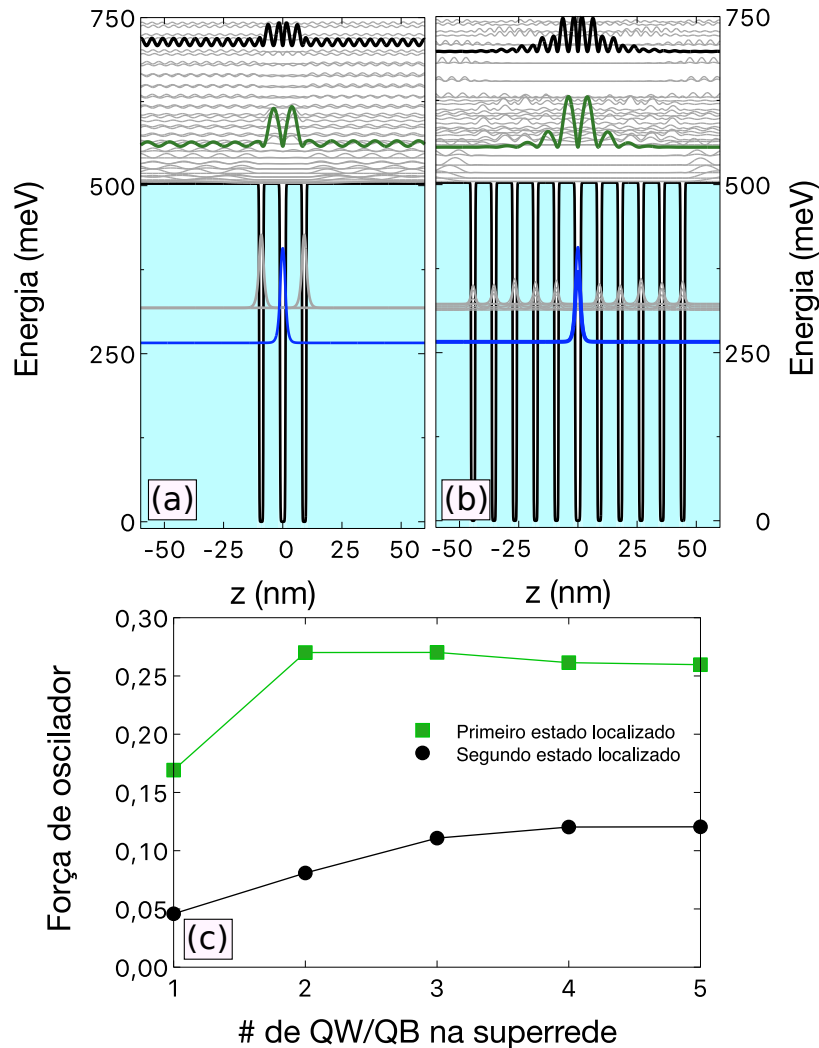


Figura 3.2: Efeito do número de poços e barreiras no espelho de Bragg no confinamento dos estados localizados no contínuo em uma superrede simétrica com um defeito estrutural. (a) Estrutura de banda da superrede formada por um período de espelho de Bragg. (b) Estrutura de banda com o espelho Bragg formado por cinco poços e barreiras. (c) A força de oscilador da transição óptica do estado fundamental para o primeiro, linha preta, e o segundo, linha verde, estado localizado no contínuo em função do tamanho do espelho de Bragg.

3.3

Estados vazantes no contínuo

O passo seguinte é a construção do estado vazante no contínuo, ou seja, um estado cuja função de onda é completamente localizada numa direção do crescimento e na outra direção ela é estendida.

Nesta simulação, o comprimento da superrede à esquerda do poço quântico de defeito foi fixado em cinco períodos de espelho de Bragg e o número de

períodos de espelho de Bragg à direita será variado de um até cinco períodos. As estruturas de bandas para a superrede formada por um e cinco períodos de espelho Bragg estão representadas nas Fig. 3.3(a-b). A superrede assimétrica, com um período à esquerda, apresenta as características desejadas para o estado vazante no contínuo. Na Fig. 3.3(c) é apresentada a força de oscilador em função do número de períodos de espelho de Bragg à direita. O estado vazante apresenta uma força de oscilador de 0.22, esse valor é 21% menor quando comparado com a força de oscilador do estado localizado no contínuo. A cruz e o quadrado cinza na Fig. 3.3(c) representam os valores experimentais da força de oscilador para as transições ópticas para o primeiro estado vazante no contínuo (Penello, 2018) e para o primeiro estado confinado no contínuo (Penello, 2016), respectivamente. Os valores apresentam bom acordo entre a teoria e o experimento.

Com isso, a configuração da superrede com um defeito estrutural para criar dois estados vazantes no contínuo foi determinada. A superrede é formada por um poço quântico de defeito com 2.5 nm de largura, à esquerda desse poço uma superrede com cinco períodos de espelho de Bragg e uma superrede com apenas um período de espelho de Bragg, o espelho de Bragg vazante, à direita dele. As espessuras do poço e da barreira de cada período do espelho de Bragg são 2.0 nm e 7.0 nm, respectivamente. O passo seguinte é determinar a melhor posição para os dopantes tipo- n na superrede, de tal forma que o efeito do potencial eletrostático gerado pelos dopantes seja mínimo para manter a condição de espelho de Bragg para o confinamento espacial das funções de onda dos estados vazantes no contínuo.

3.4

Efeito dos dopantes tipo- n sobre o confinamento espacial dos estados vazantes no contínuo

A investigação desse efeito sobre o confinamento espacial dos estados vazantes será realizada numa superrede assimétrica com um defeito estrutural e a densidade dos dopantes ionizados tipo- n é fixado em $3.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ em todas as situações investigadas. Essa concentração de dopantes leva a um nível de Fermi localizado em 31 meV acima do estado fundamental do poço quântico de defeito e 27 meV abaixo da primeira minibanda de estados.

O primeiro caso investigado é a superrede assimétrica com um poço quântico de defeito dopado. Na Fig. 3.4(a) é apresentada a estrutura de banda autoconsistente da superrede em conjunto com as densidades de probabilidade eletrônicas. Como a espessura da região dopada é muito pequena (2.5 nm), o potencial eletrostático gerado é apenas com o *zoom* no fundo do poço quântico

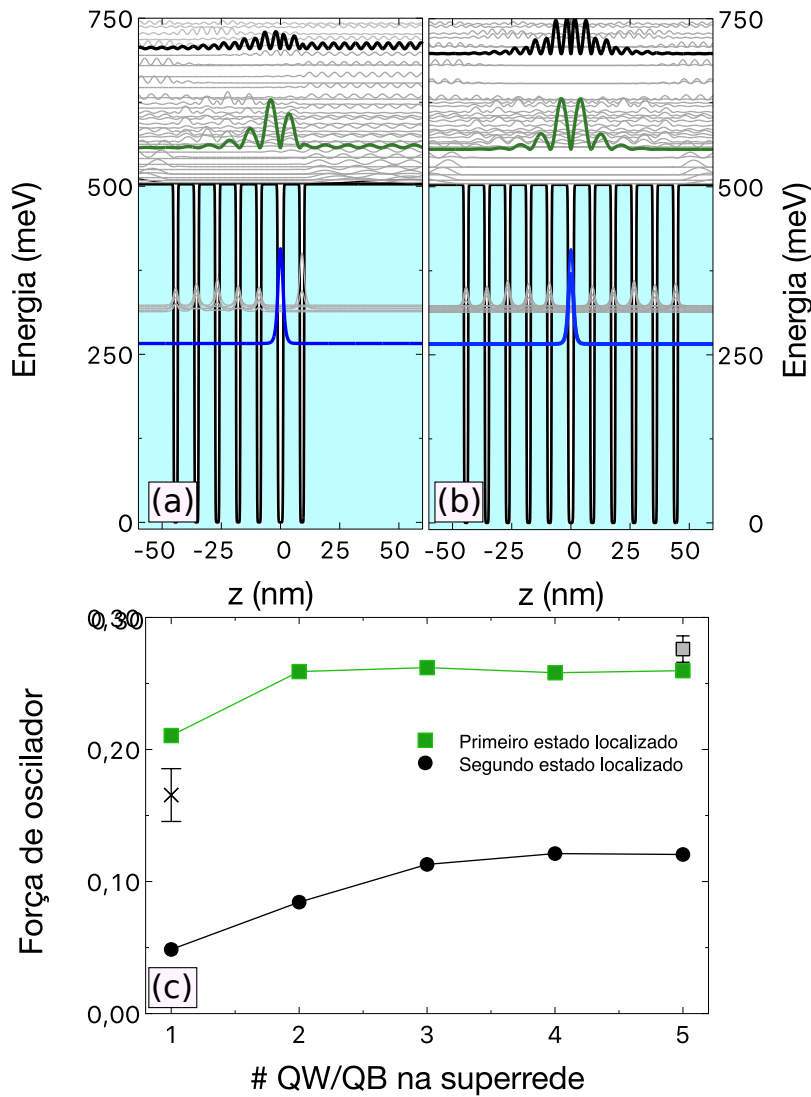


Figura 3.3: (a) Estrutura da banda de condução da superrede assimétrica e seus respectivos autoestados. A superrede é formada por um espelho de Bragg com cinco poços/barreiras quânticas, o poço quântico de defeito estrutural e um espelho de Bragg vazante formando apenas por um poço/barreira quântica. Os dois primeiros estados vazantes no contínuo são representados pelas linhas verde e preta, respectivamente. (b) Perfil de potencial da banda de condução da superrede simétrica com um defeito estrutural. (c) A força de oscilador em função do comprimento do espelho de Bragg à direita do poço quântico de defeito. A cruz negra e o quadrado cinza representam os valores experimentais.

de defeito estrutural, linha vermelha. O potencial eletrostático devido à dopagem aumenta a profundidade do poço quântico aproximadamente em 2.0 meV, ou seja, um efeito atrativo para os elétrons. Na Fig. 3.4(b) são apresentados os espectros de absorção para a superrede calculada de modo autoconsistente e para a superrede calculada apenas com a equação de Schrödinger, linhas preta e azul, respectivamente. Como o perfil de potencial quase não alterou com a presença dos dopantes no poço quântico de defeito, os espectros de absorção

dos dois métodos são similares, apenas foi observado um decréscimo na energia do primeiro pico de absorção de 1.25 meV para o cálculo autoconsistente.

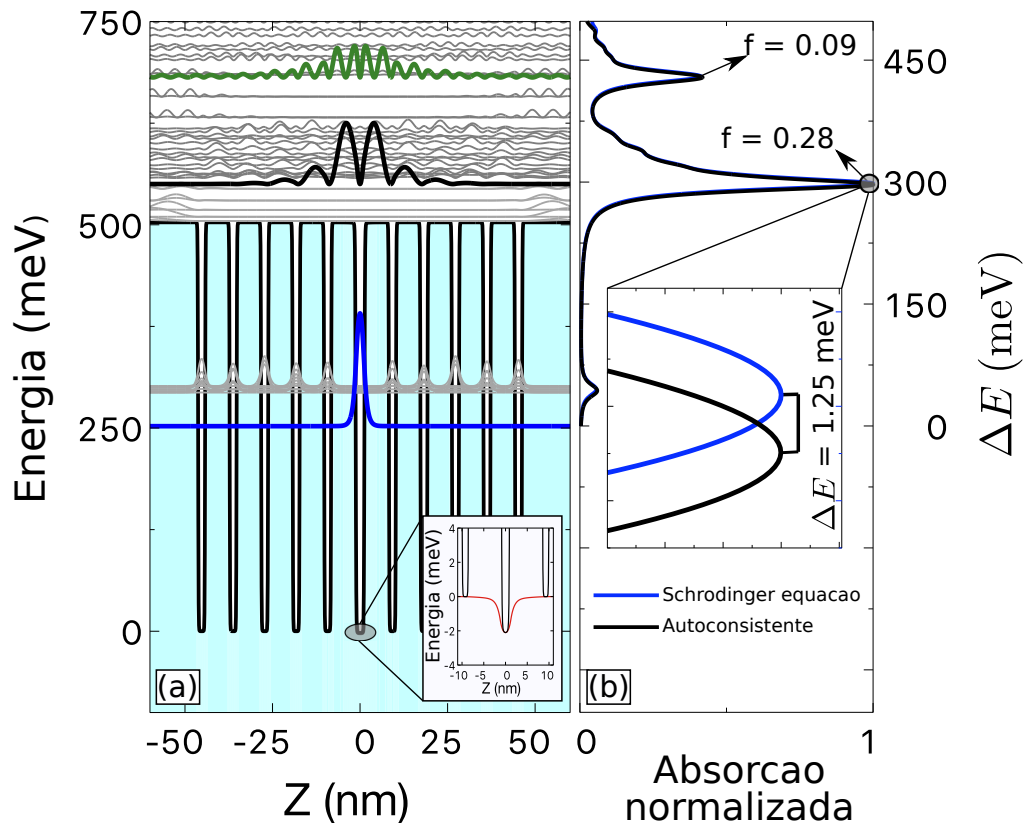


Figura 3.4: (a) Perfil de potencial da banda de condução da superrede simétrica com um defeito estrutural, dopado tipo- n , sobreposta com as probabilidades eletrônicas dos estados resolvido de modo autoconsistente. O potencial eletrostático gerado pelos dopantes é visto no *zoom* do fundo do poço de defeito estrutural. Ele decresce o poço quântico em aproximadamente 2 meV. (b) O espectro de absorção calculado através da regra de ouro de Fermi para a estrutura eletrônica resolvida de modo autoconsistente, linha preta, e para a estrutura de banda calculada apenas com o equação de Schrödinger. A diferença de energia do pico principalmente entre os dois métodos foi 1.25 meV. A força oscilador da transição óptica é 0.28, para ambos os métodos.

Uma segunda possibilidade para a posição dos dopantes na superrede seria nas barreiras quânticas em volta do poço quântico de defeito estrutural. Neste caso, a barreira quântica é considerada completamente dopada, ou seja, 7.0 nm de dopagem. Três possíveis locais para os dopantes foram investigados: nas duas barreiras, Fig. 3.5(a), na barreira à esquerda do poço quântico de defeito, Fig. 3.5(c), e na barreira à direita dele, Fig. 3.5(d). Em todos os casos, o potencial eletrostático gerado pelos dopantes alterou por completo a periodicidade do perfil de potencial, e com isso a condição de espelho de Bragg da superrede foi prejudicada. Isso é confirmado com o baixo valor da força de oscilador da transição para o primeiro estado vazante de cada caso investigado,

Figs. 3.5(b)(d)(f). Esses resultados negativos não implicam, necessariamente, que a dopagem nas barreiras da superrede seja ruim e mereça ser descartada. Neste caso foi estudado apenas a situação da barreira completamente dopada, talvez uma investigação com a barreira parcialmente dopada mostre um resultado mais interessante.

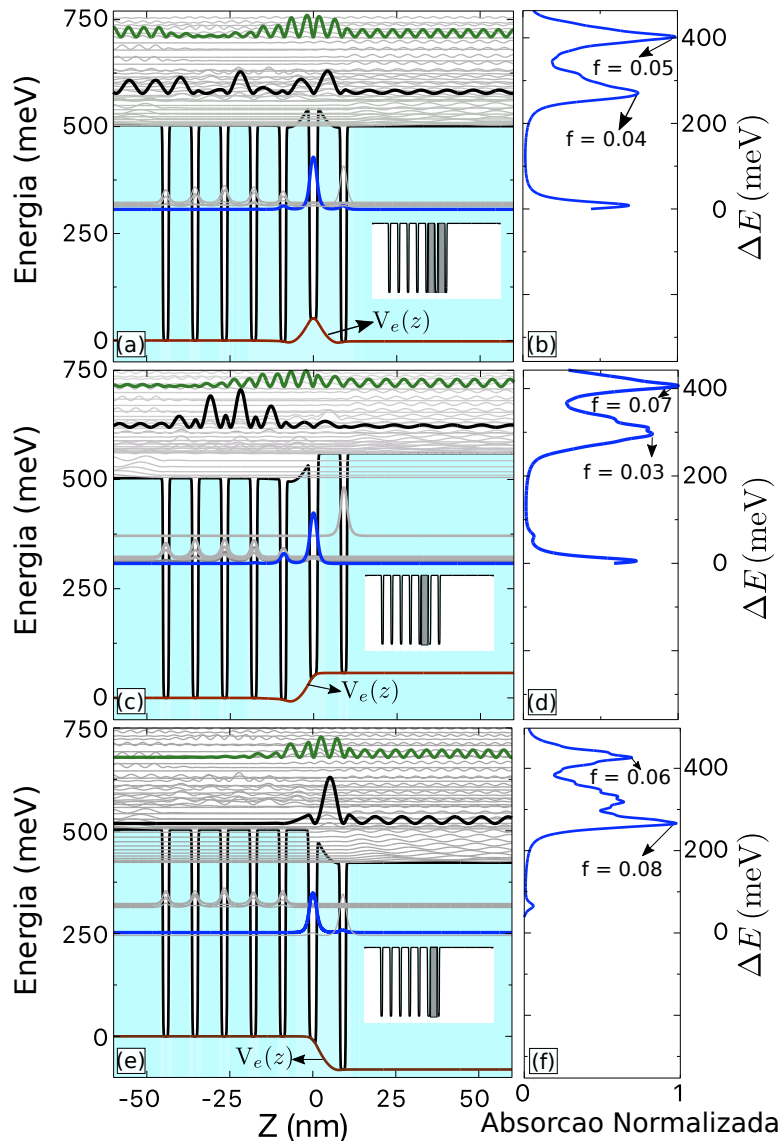


Figura 3.5: O efeito da localização dos dopantes na superrede assimétrica na localização dos estados eletrônicos vazantes. A avaliação desse efeito foi feito calculando a força de oscilador da transição óptica do estado fundamental, linha azul, para o primeiro estado vazante no contínuo, linha preta. (a-b) Estrutura de banda e força de oscilador considerando que as barreiras quânticas em volta do poço quântico de defeito estão dopados. (c-d) Considerando que apenas que a barreira quântica à esquerda do poço quântico de defeito esteja dopado. (e-f) Caso apenas a barreira à esquerda do poço quântico de defeito está dopado.

3.5

Estrutura final - Superrede assimétrica com um defeito estrutural dopado

Após todas essas investigações, a melhor heteroestrutura para criar os estados vazantes no contínuo é uma superrede assimétrica com um poço quântico de defeito estrutural dopado tipo- n . A heteroestrutura é formada, na direção de crescimento, por uma superrede com cinco períodos de espelho de Bragg, um poço quântico de defeito e um período de espelho de Bragg. A espessura do poço quântico de defeito estrutural é 2.5 nm e as espessuras do poço e da barreira do espelho de Bragg são 2.0 nm e 7.0 nm, respectivamente.

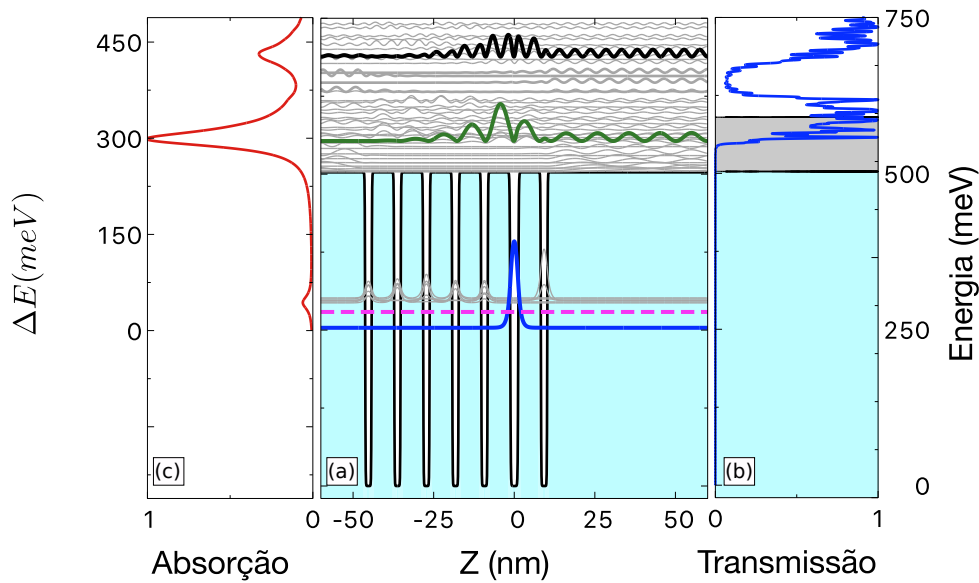


Figura 3.6: (a) Perfil de potencial da banda de condução na direção de crescimento da amostra sobreposta com as densidades de probabilidade dos elétrons. A linha pontilhada representa a energia de Fermi para a temperatura de 78 K. O estado fundamental está localizado no poço quântico de defeito, linha azul. Em destaque no contínuo de estados, os estados confinados com maior força de oscilador para as transições ópticas iniciadas no estado fundamental. (b) O espectro de transmissão do elétron ao atravessar a superrede em função da sua energia. (c) O espectro de absorção calculado, a partir da regra de ouro de Fermi, considerando o estado fundamental como o estado inicial para as transições ópticas

O perfil da banda de condução na direção de crescimento da amostra com as densidades de probabilidade eletrônicas para *bias* de tensão nulo, modo fotovoltaico, é apresentado na Fig. 3.6(a). O espectro de transmissão do elétron ao atravessar a heteroestrutura da esquerda para a direita em função da sua energia é apresentado na Fig. 3.6(b). O espectro de absorção calculado, via regra de ouro de Fermi, considerando o estado fundamental como o único estado populado pode ser visto na Fig. 3.6(c). O estado fundamental (linha

azul) está localizado no poço quântico de defeito estrutural e a minibanda de estados (linhas cinzas) se encontra com energia acima do estado fundamental. Os dois primeiros estados vazantes no contínuo estão representados pelas linhas preta e verde, respectivamente. A presença da superrede altera a distribuição dos estados tanto para os estados ligados quanto para os estados estendidos no contínuo, conforme observado no coeficiente de transmissão. É observado a formação de regiões de *minigaps* ($T = 0$) e regiões de minibandas ($T = 1$) no contínuo de estados. A primeira região minibanda no contínuo tem início em, aproximadamente, 590 meV acima do fundo do poço quântico. Considerando que o *offset* da banda de condução da liga $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ é aproximadamente 503 meV. Portanto, a modulação devido ao potencial periódico criado pela superrede faz o *offset* aumentar virtualmente em 90 meV. Esse aumento virtual é crucial para a fotocorrente em altas temperaturas, conforme será apresentado no próximo capítulo. A energia de Fermi devido às impurezas ionizadas na temperatura de 77 K é 31 meV acima do estado fundamental e 27 meV abaixo do início da primeira minibanda. Portanto, o estado fundamental é o único estado termicamente populado na temperatura de nitrogênio líquido. O espectro de absorção calculado, considerando apenas o estado fundamental ocupado, apresenta três picos de absorção em 60 meV, 300 meV e 430 meV. Cada pico de absorção corresponde à transição óptica entre o estado fundamental e a primeira minibanda e os dois primeiros estados vazantes no contínuo, respectivamente.

No próximo capítulo, os resultados experimentais dessa heteroestrutura serão apresentados.

4

Resultados e discussões

Neste capítulo, serão apresentados os resultados das caracterizações eletro-ópticas da amostra e as figuras de mérito do fotodetector. Devido às características do estado vazante no contínuo, o fotodetector apresenta modo de operação dual, ou seja, o modo fotovoltaico e o modo fotocondutivo. Na primeira parte do capítulo, a qualidade de crescimento da amostra será avaliada através do espectro de absorção em função da temperatura. Em seguida, as caracterizações eletro-ópticas e as figuras de mérito do fotodetector serão apresentadas. Os resultados foram divididos em duas partes, cada parte dedicada a um modo de operação do fotodetector. Os resultados apresentados neste capítulo foram publicados nestes dois artigos (Penello, 2018, Pereira, 2019).

4.1

Detalhamento da amostra crescida

A heteroestrutura consiste de um poço quântico com espessura de 2.5 nm dopado tipo-*n* (Si) com concentração de $3.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. À esquerda desse poço foi inserida uma superrede formada por 5 repetições do espelho de Bragg, sendo ele formado por uma barreira e um poço com as espessuras de 7.0 nm e 2.0 nm, respectivamente. À direita do poço, foi inserida apenas uma repetição do espelho de Bragg. Esta heteroestrutura foi repetida 20 vezes com uma barreira de espessura de 36.0 nm entre elas, essa barreira larga foi colocada para evitar o tunelamento entre os estados localizados de cada repetição da superrede.

Essa amostra foi crescida via epitaxia por feixe molecular (do inglês MBE) e processada no formato de *mesas* retangulares de $250 \times 320 \mu\text{m}^2$ por fotolitografia durante o pós-doutorado do Professor Dr. Germano Maioli Penello na universidade de Princeton.

4.2

Espectro de absorção

A primeira caracterização realizada na amostra foi o espectro de absorbância, com essa medida é possível verificar as energias dos picos de absorbância da amostra e conseqüentemente a qualidade do crescimento da amostra.

As medidas de absorvância foram realizadas em um espectrômetro de infravermelho por transformada de Fourier (do inglês FTIR) da marca Bruker Vertex 80v. As bordas da amostra foram polidas com ângulo de 45° no formato guias de ondas para as medidas de absorvância e as suas dimensões podem ser conferidas na Fig. 4.1. O número das reflexões que o feixe sofre dentro da amostra, n_r , e o comprimento da região ativa, r_{at} , são 5 e $1.8 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$, respectivamente. A amostra foi posicionada dentro de um porta amostra especialmente desenhado para a geometria guia de ondas. Um criostato da marca Janis e um controlador de temperatura da Keythley modelo 331 foram usados nas medidas de absorvância em função da temperatura. O espectro de absorvância foi determinado através das intensidades do feixe após atravessar a amostra com as polarizações perpendicular (I_{TE}) e paralelo (I_{TM}) ao crescimento da amostra por meio da relação

$$\text{Absorvância} = -\log_{10} \left(\frac{I_{TM}}{I_{TE}} \right). \quad (4-1)$$

Com isso, o coeficiente de absorção foi determinado através da equação que relaciona o coeficiente de absorção com a absorvância,

$$\alpha_0 (\text{cm}^{-1}) = \frac{\ln(10^{\text{Absorvância}})}{\sqrt{2} \cdot n_r \cdot r_{at}}. \quad (4-2)$$

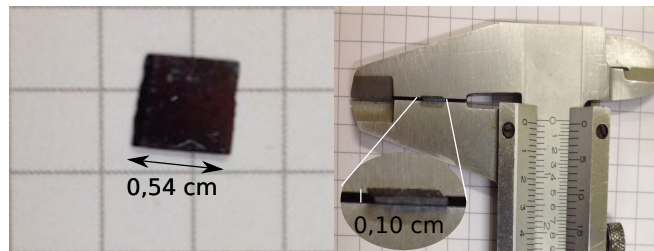


Figura 4.1: Dimensões da amostra para as medidas de absorvância.

Na Fig. 4.2(a) é apresentado o espectro de absorção da amostra em função da temperatura, começando na temperatura de nitrogênio líquido (77 K) e indo até a temperatura ambiente, com incremento na temperatura de 20 K. Independente da temperatura, o espectro de absorção apresenta dois picos de absorção, um localizado próximo de 300 meV e o outro em torno de 430 meV. Conforme observado no espectro de absorção teórico, Fig. 3.6(c), esses dois picos correspondem às transições ópticas entre o estado fundamental e os dois estados vazantes no contínuo, respectivamente. Um ombro de menor energia é observado no primeiro pico, próximo de 260 meV, e a sua amplitude aumenta com a temperatura. Esse ombro está relacionado com a transição óptica entre os estados da minibanda e o primeiro estado vazante no contínuo. O aumento da amplitude do ombro ocorre devido à maior probabilidade dos estados da

minibanda serem populados termicamente com o aumento da temperatura. Outra característica observada com o aumento da temperatura é o desvio para o vermelho nas energias dos picos, conforme visto na Fig. 4.2(b). Esse desvio ocorre por causa da diminuição do *gap* de energia das ligas semicondutoras com o aumento da temperatura.

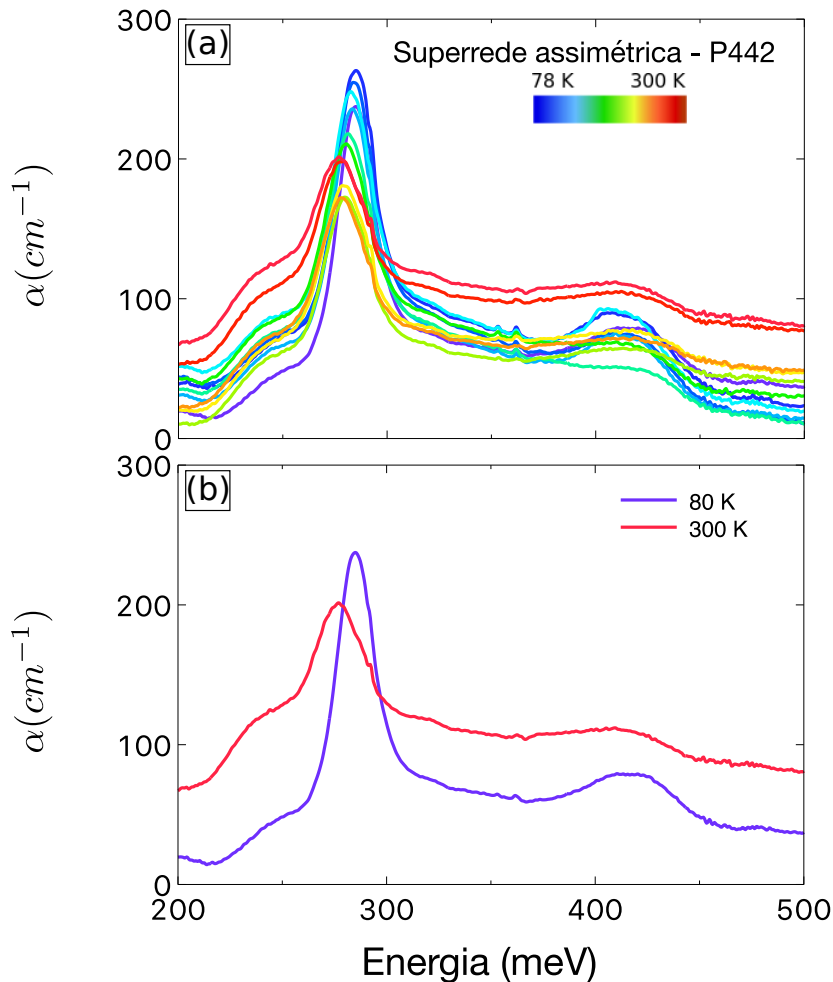


Figura 4.2: (a) Espectro de absorção experimental da superrede assimétrica no intervalo entre 78 K a 300 K, com o incremento de 20 K. Dois picos de absorção, um principal em 300 meV e um secundário em torno de 430 meV, e um ombro em 260 meV são observados. (b) A comparação entre o espectro de absorção medido em 78 K e 300 K. Além do desvio para o azul no pico de absorção em 300 K, um aumento considerável na amplitude do ombro é observado.

Geralmente, o espectro de absorção calculado com as espessuras nominais da heteroestrutura crescida não corresponde ao espectro de absorção experimental, isso ocorre em consequência do processo de crescimento epitaxial introduzir pequenas variações nas espessuras das camadas na heteroestrutura. Na Fig. 4.3 é feita a comparação entre o espectro de absorção experimental (círculo branco) com o espectro de absorção teórico (linha vermelha), con-

siderando as espessuras nominais da superrede. A energia do pico principal teórico é maior que o valor experimental e, além disso, a amplitude do ombro é maior do que foi observado no espectro de absorção experimental. Com isso, diversas simulações foram realizadas variando as espessuras das camadas da heteroestrutura até que o melhor ajuste entre o espectro absorção teórico com o espectro de absorção experimental fosse obtido. O espectro de absorção teórico (linha azul) que melhor ajusta com o resultado experimental foi obtido com uma superrede com as seguintes espessuras: poço quântico de defeito de 2.30 nm, poços quânticos laterais de 1.87 nm e barreiras quânticas de 7.16 nm.

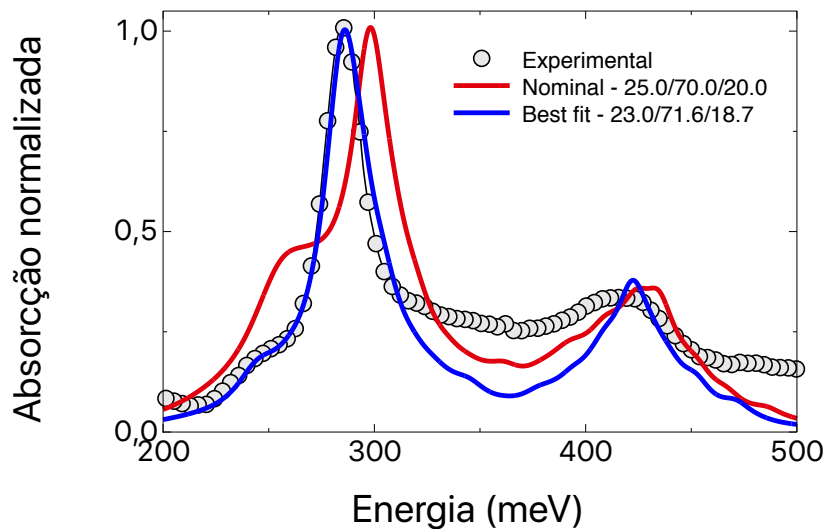


Figura 4.3: Comparação entre os espectros de absorção experimental e teórico normalizados. O resultado teórico considerando as dimensões nominais da superrede, linha vermelha, apresenta uma discrepância na energia do pico experimental em 290 meV em torno de 15 meV. A linha azul representa o espectro absorção teórico da superrede com o melhor ajuste com o espectro de absorção experimental.

Além de verificar a qualidade do crescimento da amostra, o espectro de absorção pode ser usado para extrair o valor experimental da força de oscilador das transições ópticas. A força de oscilador experimental (f) pode ser obtida através da integral do espectro de absorção (Levine,1993), dada por

$$\int_0^{\infty} \alpha(\nu) d\nu = \left(\frac{\rho_c N_w e^2 h f}{4\epsilon_0 m^* c n_r} \right) \left(\frac{\sin^2 \theta}{\cos \theta} \right), \quad (4-3)$$

sendo ρ_c a densidade planar do poço quântico, N_w o número de poços quânticos dopados, e a carga elétrica, h a constante de Planck, f a força de oscilador da transição óptica, ϵ_0 a permissibilidade do vácuo, m^* a massa efetiva do elétron, c a velocidade da luz, n_r o número de reflexões que o feixe sofre ao atravessar a região ativa e θ é o ângulo entre a direção do feixe óptico e a normal da superfície da amostra. A área abaixo da curva de absorção é obtida

através do ajuste de curvas lorentzianas, conforme é observado na Fig. 4.4(a). Dentro desse intervalo de energia, o espectro de absorção experimental é melhor reproduzido com quatro lorentzianas, Fig 4.4(b): uma lorentziana centralizada em 250 meV para as transições partindo dos estados da minibanda para o primeiro estado vazante, duas lorentzianas em 290 meV e 430 meV para as transições do estado fundamental para os dois primeiros estados vazantes no contínuo e, por fim, uma lorentziana em torno de 350 meV para as transições dos estados da minibanda para o contínuo.

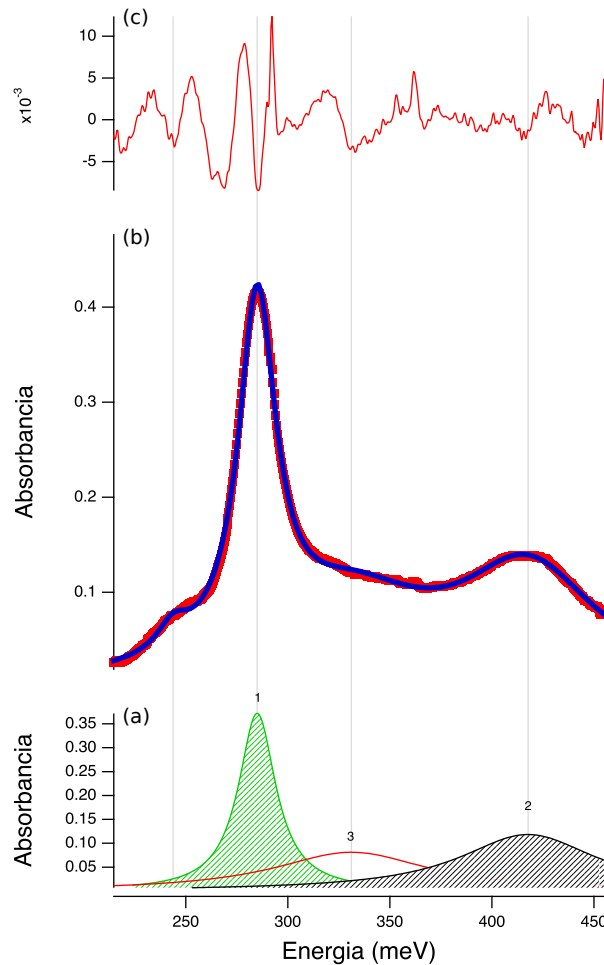


Figura 4.4: Ajuste do espectro de absorbância, medido em 78 K, com quatro curvas lorentzianas usando o software *Igor pro*. (a) As quatro curvas lorentzianas centralizadas nos picos de absorbância. (b) A comparação entre o espectro de absorbância experimental, quadros vermelhos, com a soma das curvas lorentzianas, linha azul. (c) O erro relativo entre o espectros de absorbância experimental e o ajuste estatístico.

No cálculo da força de oscilador experimental foi utilizado os seguintes valores: $3.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ para a densidade eletrônica volumétrica, 20 poços quânticos dopados, 5 reflexões internas do feixe na amostra e o ângulo de incidência entre o feixe e a superfície normal foi 45° . Na Fig. 4.5 a força de

oscilador experimental em diversas temperaturas é comparada com a força de oscilador teórica. A força de oscilador do primeiro pico mostrou pouca variação em função da temperatura, com um valor médio de 0.164 ± 0.016 , valor próximo do valor teórico, 0.17. Já a força de oscilador do segundo pico de energia mostrou grande variação com o aumento da temperatura, sendo o seu valor médio de 0.182 ± 0.103 . Uma discrepância entre o valor teórico da força de experimental, 0.05, e o valor experimental foi observada. Esse maior valor na força de oscilador do segundo pico experimental pode indicar que mais de um estado eletrônico está contribuindo para a formação desse segundo pico. O excelente acordo entre os os valores da força de oscilador experimental e teórica do primeiro pico de absorção comprova uma boa qualidade do crescimento da amostra e a confiabilidade da simulação computacional.

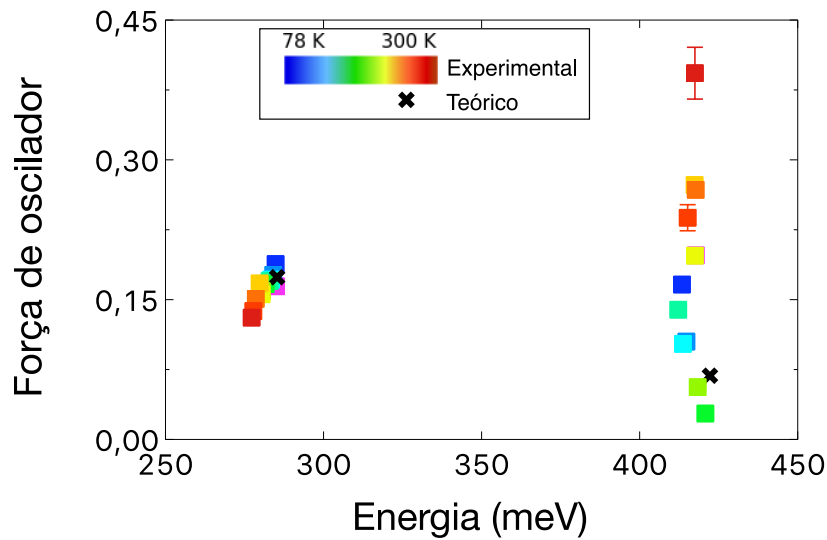


Figura 4.5: Comparação entre a força de oscilador experimental, em função da temperatura, e o valor teórico da força de oscilador das transições ópticas entre o estado fundamental no poço quântico de defeito estrutural e os dois primeiros estados vazantes no contínuo.

Nas próximas seções serão apresentadas as caracterizações eletro-ópticas e as figuras de mérito do fotodetector. Começando com os resultados do fotodetector operando no modo fotovoltaico e, por fim, os resultados do fotodetector no modo fotocondutor.

4.3

Fotodetector operado na modo fotovoltaico

Nesta seção serão apresentadas as caracterizações eletro-ópticas (espectro de fotocorrente e corrente de escuro) e as figuras de mérito (produto R_0A , energia de ativação, responsividade espectral e detectividade espectral) do fotodetector sem *bias* de tensão aplicado.

4.3.1

Espectro de fotocorrente

O espectro de fotocorrente do fotodetector foi medido com o FTIR, mas agora usando o fotodetector como o detector da fonte infravermelha do FTIR. As medidas foram realizadas com o fotodetector dentro do criostato em temperatura de nitrogênio líquido.

O fotodetector foi projetado de tal modo que o seu pico de fotocorrente principal fosse na mesma energia do pico de absorção do gás carbônico (CO_2), em torno de $4.0 \mu\text{m}$ (300 meV). Então, para uma caracterização real do fotodetector foi necessária a criação de um ambiente livre desse gás. A solução encontrada para removê-lo foi cobrir o caminho óptico da saída do FTIR até o criostato com um tubo de PVC conectado com um fluxo constante de gás seco. O gás seco tem a propriedade de expulsar a umidade e o gás carbônico do caminho óptico.

Na Fig. 4.6 é feita a comparação entre o espectro de fotocorrente gerado pelo fotodetector, no modo fotovoltaico, medido na temperatura de 80 K no ambiente com o gás carbônico (linha azul) e o ambiente sem a presença do gás (linha preta). Nota-se que há um decréscimo no pico da fotocorrente em 300 meV para o ambiente com a presença do gás carbônico. Quando a purga do gás carbônico ocorre, o pico da fotocorrente tem a forma de uma lorentziana semelhante ao que foi observado no espectro de absorção, Fig. 4.2. Fora da região da absorção do gás carbônico, os espectros de fotocorrente seguem o mesmo comportamento.

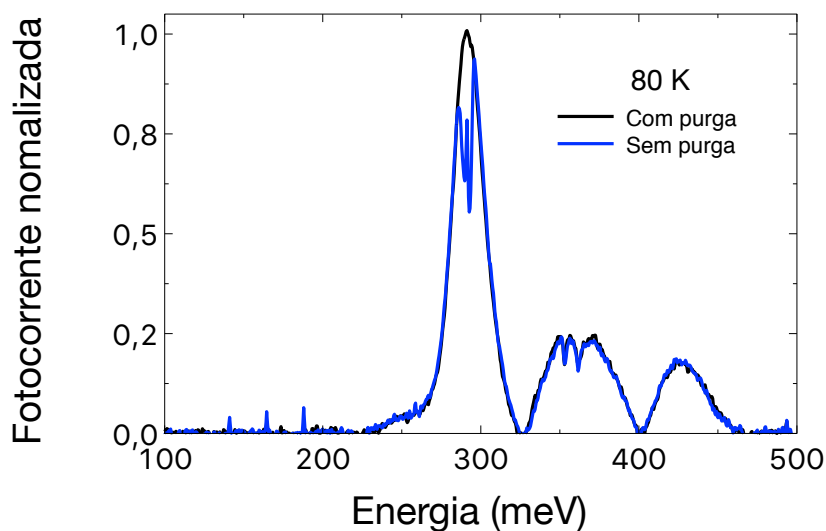


Figura 4.6: Comparação entre os espectros de fotocorrente no ambiente com o gás carbônico, linha azul, e o ambiente sem a presença do gás carbônico, linha preta.

O fotodetector apresenta espectro de fotocorrente até a temperatura ambiente, conforme observado nos espectros de fotocorrente normalizados em função da temperatura na Fig. 4.7(a). O espectro de fotocorrente apresenta dois picos em 300 meV e 430 meV que estão em perfeita concordância com o espectro de absorção. É observado o aumento do ruído intrínseco no espectro de fotocorrente em função da temperatura, indiciando que esse ruído tem origem térmica. Mesmo com esse ruído, foi possível medir o espectro de fotocorrente até temperatura ambiente. Na Fig. 4.7(b) é feita a comparação entre os espectros de fotocorrente normalizados medidos nas temperaturas 80 K e 300 K. Em 300 K, apenas o pico de fotocorrente em 300 meV é observado. A energia desse pico diminuiu em comparação com o pico de fotocorrente em 80 K devido à mudança da energia do *gap* das ligas semicondutoras.

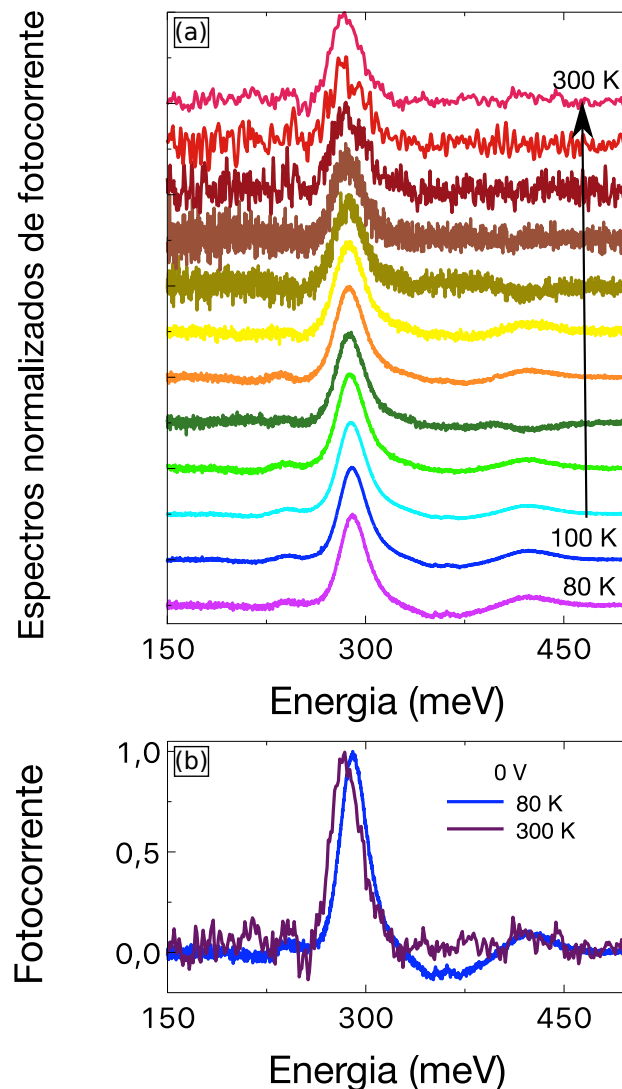


Figura 4.7: (a) Espectros de fotocorrente normalizados, no modo fotovoltaico, em função da temperatura entre 80 K até 300 K. Os espectros foram empilhados para facilitar a análise do perfil da fotocorrente com o aumento da temperatura. (b) Espectros de fotocorrente normalizados em 78 K e 300 K.

Por fim, na Fig. 4.8 é feita a comparação entre os espectros de absorção e de fotocorrente medidos em 80 K com o espectro de absorção teórico. Pode-se observar um excelente acordo entre as medidas experimentais com a previsão teórica.

Esses resultados comprovaram que os estados vazantes no contínuo na superrede assimétrica podem ser usados na detecção de radiação infravermelha em temperatura ambiente no modo fotovoltaico. Na próxima seção serão apresentadas as figuras de mérito do fotodetector operando no modo fotovoltaico.

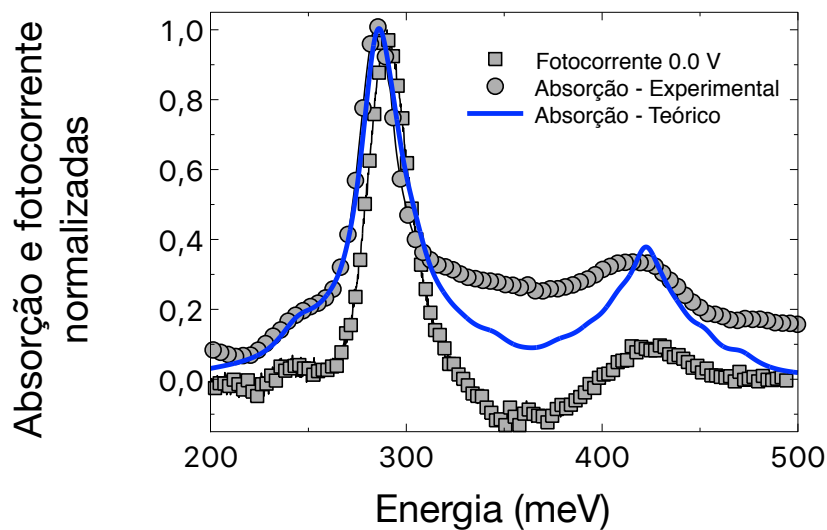


Figura 4.8: Comparação entre as medidas de absorção, bolas azuis, e de fotocorrente, triângulos pretos, em 80 K com o espectro de absorção teórico, linha vermelha.

4.3.2

Figuras de mérito

Conforme apresentado no capítulo 2, as figuras de mérito do fotodetector são os parâmetros universais utilizados na comparação da eficiência entre diversos fotodetectores. As seguintes figuras de mérito foram obtidas para esse fotodetector: corrente de escuro, temperatura BLIP, produto entre a resistência diferencial e a área do detector, responsividade e detectividade.

4.3.2.1

Corrente de escuro

As medidas de corrente de escuro foram realizadas com um analisador de parâmetros de semicondutor da marca HP e modelo 4145b. Para medir apenas a corrente de escuro, o fotodetector foi colocado dentro de um escudo de calor. As correntes de escuro geradas nas tensões entre -5.0 V e 5.0 V no

intervalo de temperatura entre 78 K e 300 K, com o incremento de temperatura em 20 K, são apresentadas na Fig. 4.9(a). Nesse intervalo de temperatura, a corrente de escuro aumenta de forma exponencial em função da temperatura, evidenciando que a maior contribuição para a corrente de escuro são correntes de origens térmicas. A medida da fotocorrente, sem o escudo de calor, em 78 K é representada pela linha preta na Fig. 4.9(a). A comparação entre a corrente de escuro e a fotocorrente fornece informação sobre a temperatura BLIP (do inglês *Background limited infrared photodetector*) do fotodetector. Esse parâmetro que representa a temperatura no qual a intensidade da corrente de escuro é igual a intensidade da fotocorrente. Abaixo dessa temperatura, o sinal gerado pela radiação infravermelha é superior à corrente de escuro do fotodetector. Acima dessa temperatura, o fotodetector ainda é capaz de detectar a radiação, mas é necessário algum equipamento para filtrar o sinal da fotocorrente dentro da corrente de escuro. A temperatura BLIP do fotodetector em função do *bias* de tensão é apresentada na Fig. 4.9(b). Para *bias* de tensão positiva, a temperatura BLIP foi de 120 K e para *bias* de tensão negativa a temperatura BLIP foi de 110 K. Para *bias* nulo, a temperatura BLIP foi de 170 K.

4.3.2.2

O produto R_0A - A resistência diferencial vezes a área do fotodetector

A próxima figura de mérito do fotodetector é o produto entre a resistência diferencial e a área do detector (R_0A) em função da temperatura. Quanto maior for esse produto melhor será o fotodetector, pois fotodetectores com R_0A baixo indica maior geração de corrente de ruído. A resistência diferencial em função do *bias* de tensão foi calculada através da derivada da corrente de escuro, usando o método da derivada em 5 pontos. Na Fig. 4.10(a), é apresentado o produto R_0A , em escala logaritma, em função do inverso da temperatura para os *bias*es -5.0 V, -3.0 V, 0.0 V, 3.0 V e 5.0 V. No geral, dois comportamentos diferentes para o R_0A em função da temperatura são observados: um aumento exponencial do R_0A em altas temperaturas (> 120 K) e um comportamento quase constante em baixas temperaturas (< 120 K). Cada um desses comportamentos do R_0A indica qual é o mecanismo dominante na geração da corrente de escuro. Em baixa temperatura, o comportamento praticamente constante de R_0A indica que a fonte dominante da corrente de escuro nesse regime é devido ao tunelamento quântico entre os estados ligados dos poços quânticos. Por outro lado, o crescimento exponencial do R_0A a partir de 120 K sugere que o tunelamento termicamente assistido e a emissão termiônica são as fontes principais da corrente de escuro. Para 0.0 V, o maior valor de R_0A foi de $5.5 \times 10^8 \Omega \cdot \text{cm}^2$ para 80 K e o seu menor valor foi de $0.77 \Omega \cdot \text{cm}^2$ em

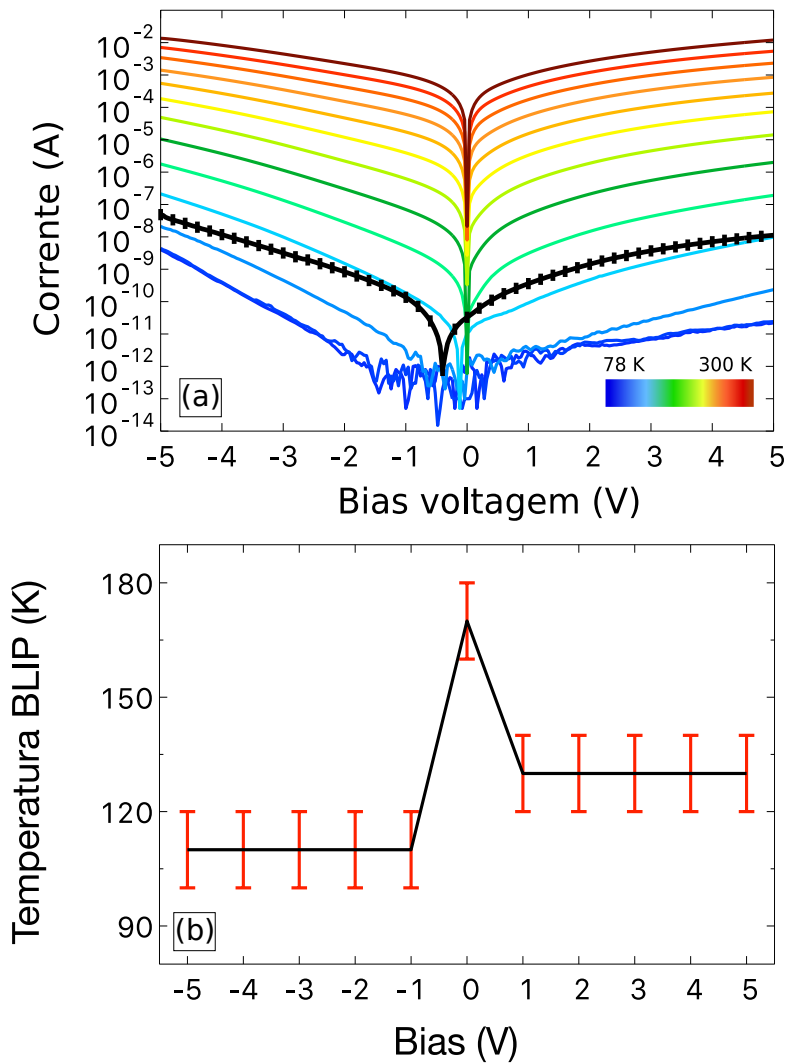


Figura 4.9: (a) Corrente de escuro em função do *bias* de tensão entre -5.0 V e +5.0 V para o intervalo de temperatura de 78 K até 300 K. A curva preta representa a corrente iluminada medida em 78 K. (b) Temperatura BLIP em função do *bias* de tensão.

temperatura ambiente. Esses valores são da mesma ordem de grandeza dos melhores fotodetectores baseados em cascata quântica encontrados na literatura (Hofstetter, 2010), (Ravikumar, 2014), (Xuejiao, 2014), (Ravikumar, 2015), e (Harrer, 2016).

A energia de ativação da superrede pode ser determinada experimentalmente a partir da dependência linear do produto $\log(R_0A)$ com o inverso da temperatura, usando a lei de Arrhenius. Neste caso, a energia de ativação será o produto entre o coeficiente angular da reta e a constante de Boltzmann. O valor da energia de ativação em função do *bias* pode ser visto na Fig. 4.10(b). A energia de ativação é dependente da amplitude e da direção do *bias* de tensão aplicado, sendo o seu maior valor ocorrendo para zero *bias* de (307.44 ± 1.47) meV. A energia de ativação decresce com o aumento do

bias. Isso acontece devido à periodicidade condição de espelho de Bragg ser apenas satisfeita para zero *bias* de tensão aplicada. Com o aumento do *bias*, o campo elétrico estático inclina o potencial, levando à quebra da periodicidade no perfil do potencial.

A energia de ativação representa a diferença entre o começo do contínuo de estados e a energia de Fermi. Com isso, a energia de Fermi experimental pode ser determinada a partir da energia de ativação e da energia do começo do contínuo de estados. Para os poços quânticos simples, o começo do contínuo de estados coincide com a altura da barreira quântica. Para as superredes, o começo do contínuo é aumentado virtualmente devido à periodicidade do potencial. Um aumento virtual em 90 meV do contínuo para a superrede assimétrica foi observado através do cálculo do coeficiente de transmissão eletrônica para zero *bias*, Fig. 3.6(b). Com isso, a energia de Fermi experimental está localizada a 27 meV acima do estado fundamental. A energia de Fermi teórica foi calculada para estar 31 meV acima do estado fundamental, mostrando um excelente acordo entre a previsão teórica e a energia de Fermi experimental.

4.3.2.3

Responsividade espectral

A medida da responsividade espectral relaciona a quantidade de fotocorrente gerada no fotodetector em função da potência irradiada por um corpo negro. A representação esquemática da configuração experimental é apresentada na Fig. 4.11. A temperatura do corpo negro foi mantida em 800° C e a abertura de saída da radiação do corpo negro é de 6.4 mm. A distância entre o corpo negro e o fotodetector foi fixada em 305.0 mm, entre eles foi posicionado um *chopper* na frequência de 330 Hz. O fotodetector foi posicionado num ângulo de 45° dentro do criostato. A janela do criostato é de seleneto e zinco (ZnSe), cuja transmissão no infravermelho médio é 0.7.

A responsividade de pico (\mathfrak{R}_p^0) é determinada a partir do valor da fotocorrente gerada e dos parâmetros da configuração do experimento. A fotocorrente gerada no fotodetector (I_f) por uma fonte de corpo negro incidente na temperatura T é dada por (Levine,1993)

$$I_f = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} R(\lambda)P(\lambda)d\lambda. \quad (4-4)$$

Sendo λ_1 e λ_2 a largura de meia altura do pico de fotocorrente, $R(\lambda)$ a responsividade espectral e $P(\lambda)$ a potência do corpo negro incidente no fotodetector por unidade de comprimento. A responsividade espectral pode ser escrita como,

$$R(\lambda) = \mathfrak{R}_p^0 \bar{R}(\lambda), \quad (4-5)$$

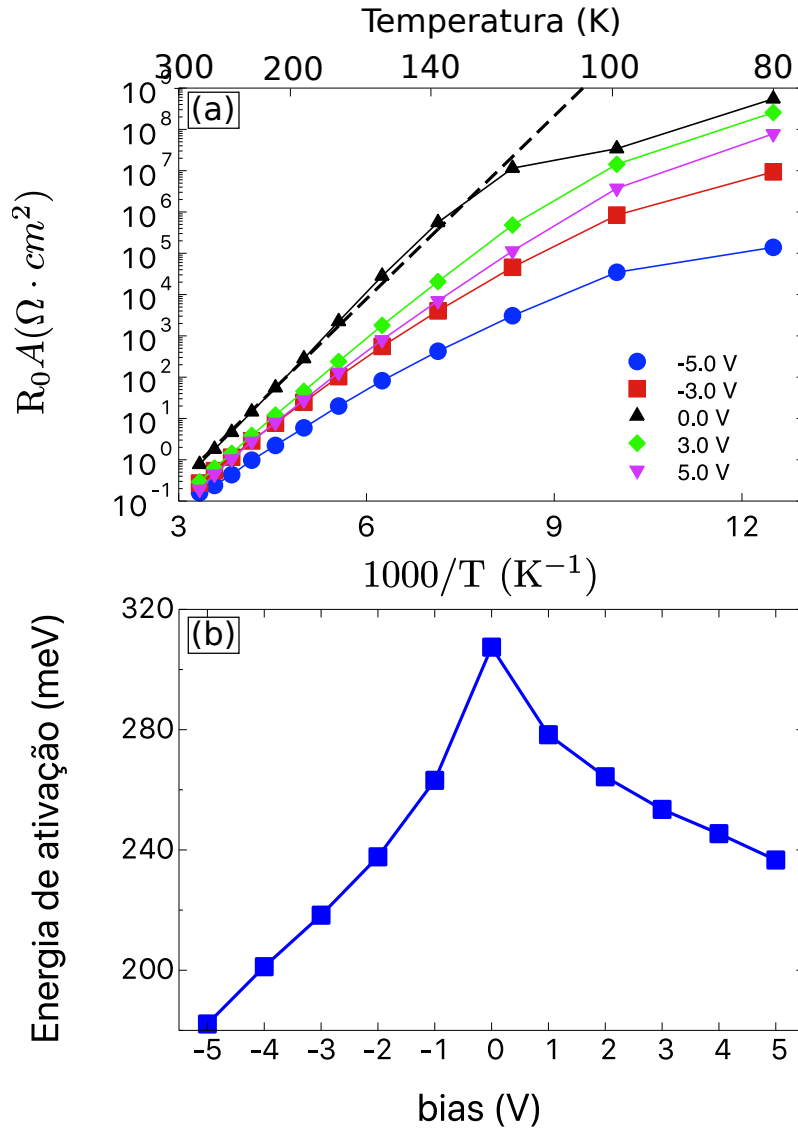


Figura 4.10: (a), O produto R_0A para os *biases* -5.0 V, -3.0 V, 0 V, 3.0 V e 5.0 V em função do inverso da temperatura. (b) A energia de ativação em função do *bias* de tensão.

onde \mathfrak{R}_p^0 é a responsividade de pico e $\bar{R}(\lambda)$ é o espectro da fotocorrente experimental normalizado à unidade no pico. A potência do corpo negro por comprimento de onda é dada por

$$P(\lambda) = W(\lambda) \sin^2(\Omega/2) A_D C_F \cos(\theta), \quad (4-6)$$

no qual $W(\lambda)$ é a densidade espectral do corpo negro

$$W(\lambda) = \left(\frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5} \right) \frac{1}{e^{hc/\lambda k_B T_B} - 1}, \quad (4-7)$$

onde c é a velocidade da luz, h a constante de Planck, k_B a constante de Boltzmann e T_B a temperatura do corpo negro. Ω é o ângulo sólido entre o diâmetro da fenda do corpo negro (a) e a distância do corpo negro até o fotodetector D , dada por

$$\Omega = \pi \frac{(d/2)^2}{D^2 + (d/2)^2}. \quad (4-8)$$

Os fatores de acoplamento foram agrupados como $C_F = T_f(1 - r)M$, onde T_f é a transmissão da janela do criostato, r é a refletividade da amostra e M é o fator de modulação do feixe óptico pelo *Chopper*.

Por fim, a responsividade de pico \mathfrak{R}_P^0 é calculada a partir da fotocorrente medida no amplificador *lock-in*, da temperatura do corpo negro e dos parâmetros do experimento através da equação

$$\mathfrak{R}_P^0 = \frac{I_f}{\sin^2(\Omega/2) A_D C_F \cos \theta \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \bar{R}(\lambda) W(\lambda) d\lambda}. \quad (4-9)$$

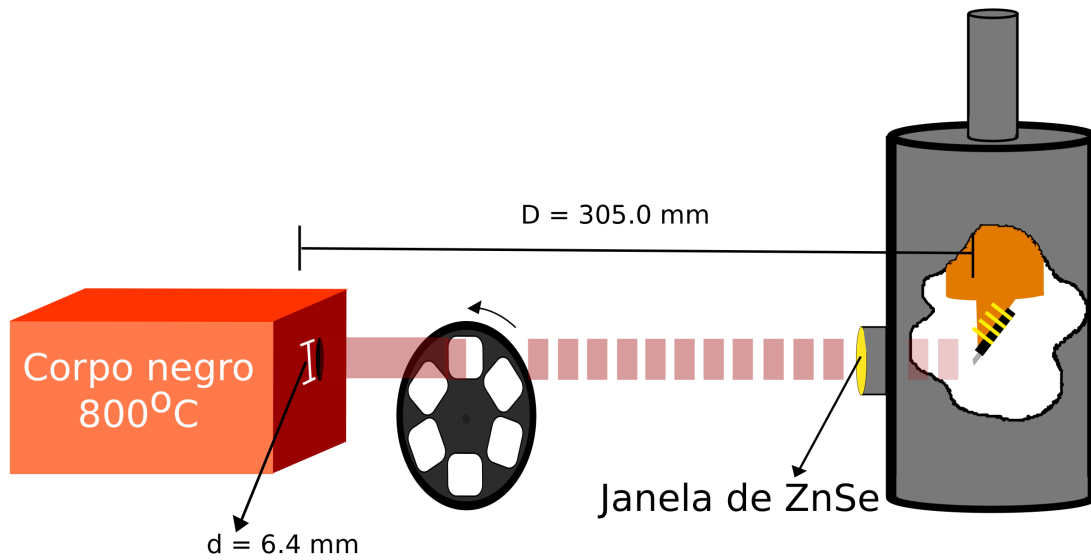


Figura 4.11: Representação esquemática da configuração experimental da medida da responsividade espectral.

A responsividade de pico do fotodetector operando no modo fotovoltaico entre as temperaturas 80 K e 300 K pode ser observada na Fig. 4.12. Dentro desse intervalo de temperatura, a responsividade de pico teve um aumento exponencial até 100 K, depois manteve-se aproximadamente constante até 240 K e após isso um decréscimo exponencial na responsividade foi observado. O aumento exponencial observado em baixas temperaturas indica que o estado fundamental ainda está sendo populado pelos os elétrons termoexcitados. Com o aumento da temperatura, o estado fundamental é populado pelos elétrons termoexcitados levando ao aumento da responsividade de pico. O comportamento constante da responsividade de pico entre 120-240 K mostra que o estado fundamental está completamente ocupado, ou seja, os elétrons termoexcitados contribuem para a fotocorrente. O decréscimo na responsividade em

altas temperaturas pode estar relacionado com a diminuição da probabilidade de escape dos elétrons fotoexcitados no primeiro estado vazante no contínuo devido ao espalhamento elétron-fônon (Graf, 2006). O valor máximo para a responsividade foi de 2.0 mA/W entre 120-140 K e em temperatura ambiente a responsividade caiu para 0.1 mA/W.

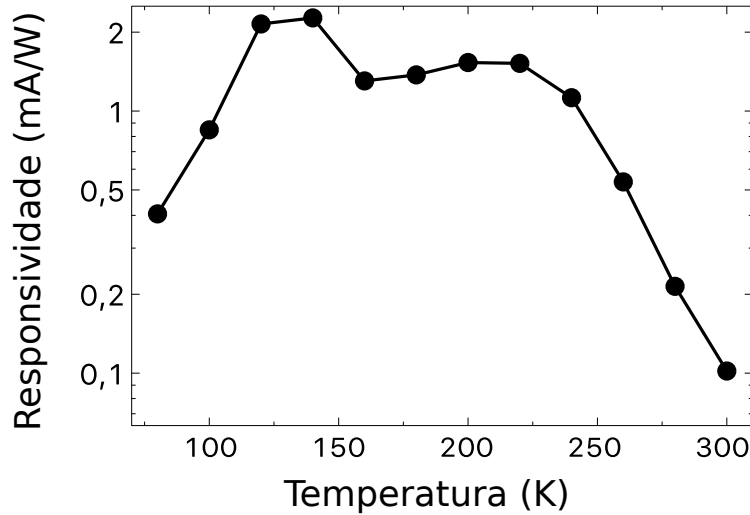


Figura 4.12: Responsividade de pico da superrede assimétrica no modo fotovoltaico em função da temperatura. As bolas pretas representam os resultados experimentais e a linha é apenas um guia aos olhos.

4.3.2.4

Detectividade espectral

A detectividade espectral é a figura de mérito mais importante para os fotodetectores, pois com ela é possível relacionar o desempenho entre os diversos tipos de fotodetectores. A detectividade é definida como a razão entre a responsividade de pico e a corrente de ruído gerada pelo fotodetector multiplicado pela área do fotodetector, na forma de

$$D^* = \frac{\sqrt{A_d \Delta f}}{I_{\text{ruído}}} \mathfrak{R}. \quad (4-10)$$

Para o modo fotovoltaico, a corrente de ruído gerada pelo fotodetector foi obtida por dois métodos diferentes: considerando o ruído térmico como a única fonte de ruído ou medindo a corrente de ruído total com o amplificador *lock-in*. A corrente de ruído térmico, ou ruído Johnson, foi determinada através da resistência diferencial da corrente de escuro com a eq. 2-55,

$$i_{\text{ruído},J}^2 = \frac{4k_B T \Delta f}{R}, \quad (4-11)$$

que relaciona a resistência diferencial com a corrente de ruído térmico. A medida da corrente de ruído total foi medida com o amplificador *lock-in*,

no modo *X-Y noise*, e com o fotodetector dentro do escudo térmico. Para evitar o ruído do tipo $1/f$, a frequência escolhida do *chopper* foi de 333 Hz. A representação experimental da medida da corrente de ruído total é apresentada na Fig. 4.13.

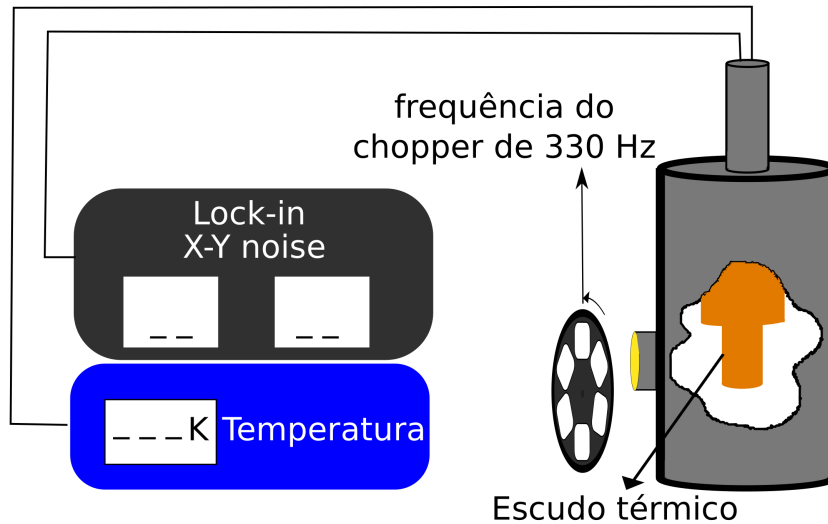


Figura 4.13: Representação esquemática da configuração experimental utilizada na medida da corrente de ruído utilizando o amplificador *lock-in*.

Os valores da detectividade, obtida pelos dois métodos, em função da temperatura podem ser observados na Fig. 4.14(a). No geral, a detectividade decresce com o aumento da temperatura. Uma anomalia na detectividade medida abaixo da temperatura de 120 K é observada, a detectividade aumenta em função da temperatura. Essa anomalia ocorre em consequência do limite mínimo de detecção da corrente de ruído pelo amplificador *lock-in*. Conforme pode ser observado na corrente de ruído em função da temperatura na Fig. 4.14(b). A corrente de ruído medida até a temperatura de 120 K apresenta um valor constante e posteriormente ela aumenta com a temperatura. A detectividade térmica determina o limite superior possível da detectividade, pois o ruído térmico é uma característica intrínseca de todos os dispositivos resistivos. O maior e o menor valores para a detectividade limitada pelo ruído térmico foram 1.43×10^{11} Jones e 6.97×10^5 Jones, respectivamente. Por outro lado, o maior e o menor valores da detectividade medida com o amplificador *lock-in* foram de 1.19×10^9 Jones e 1.18×10^5 Jones.

Com isso, as figuras de mérito do fotodetector operando no modo fotovoltaico foram apresentadas. O modo fotovoltaico apresentou ótimos resultados e indicando o grande potencial de uso da superrede assimétrica com um defeito estrutural em fotodetectores fotovoltaicos de infravermelho médio operando em altas temperaturas. Pelo que foi pesquisado na literatura, essa foi a pri-

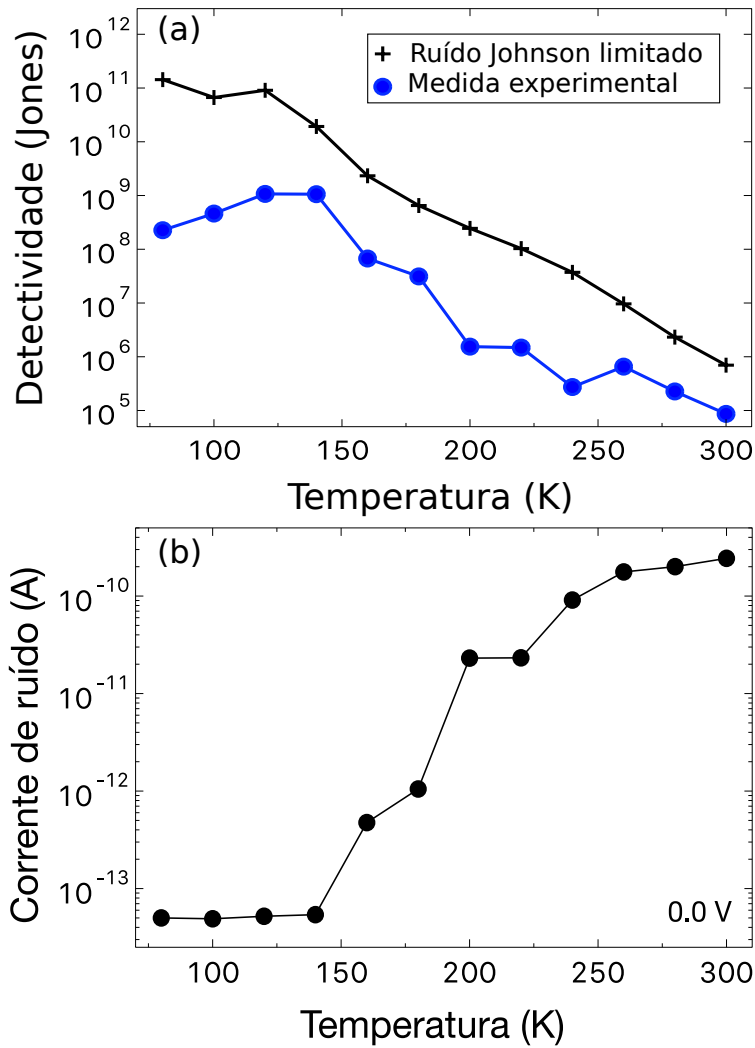


Figura 4.14: (a) Comparação entre a detectividade de pico limitada pelo ruído Johnson com a detectividade de pico determinada através da corrente de ruído medida com o amplificador *lock-in* em função da temperatura. A corrente de ruído medida com o amplificador *lock-in*.

meira observação de fotocorrente (em 300 meV) em temperatura ambiente com fotodetector baseado em superredes de InGaAs/InAlAs. Na próxima seção, as figuras de mérito para o fotodetector operando no modo fotocondutivo serão apresentadas.

4.4 Fotodetector operado na modo fotocondutivo

No modo fotocondutivo, as caracterizações eletro-ópticas serão realizadas em função do *bias* de tensão aplicado sobre a *mesa* do fotodetector. Devido à assimetria da superrede, a direção no qual o *bias* de tensão é aplicado sobre a *mesa* tem grande influência sobre as caracterizações eletro-ópticas e, conseqüentemente, nas figuras de mérito do fotodetector. Foi definido que

o contato inferior da *mesa* como o contato terra do fotodetector.

4.4.1

O espectro de fotocorrente

Na Fig. 4.15, os espectros de fotocorrente em 78 K para os *bias*es +5.0 V até -5.0 V são apresentados. O perfil do espectro de fotocorrente depende da intensidade e da direção do *bias* de tensão aplicado sobre a *mesa*. Para *bias* negativo, o fluxo de elétron saem pelo contato inferior da *mesa*, o perfil do espectro de fotocorrente apresenta uma banda larga com dois picos, o principal próximo de 300 meV e o secundário em torno de 260 meV. A amplitude do pico secundário aumenta em função do *bias*, até que a sua amplitude se torna maior que a amplitude do pico principal. Para *bias* positivo, o fluxo de elétron saem pelo contato no topo da *mesa*, o perfil do espectro de fotocorrente apresenta o pico principal em torno de 300 meV e um ombro em 260 meV. A amplitude do ombro fica mais evidente com o aumento do *bias*.

O comportamento do perfil de fotocorrente dependente da intensidade e da direção do *bias* de tensão aplicado sobre a *mesa* será investigado teoricamente através do espectro de absorção teórico considerando as contribuições de todos os estados eletrônicos termicamente populados.

No primeiro caso, será investigada a origem do pico secundário no espectro de fotocorrente para o *bias* -3.0 V aplicado sobre a *mesa*. Na Fig. 4.16(a) são apresentados o perfil de potencial sobreposto com as densidades de probabilidade eletrônicas. O estado fundamental do poço quântico de defeito estrutural, os estados da minibanda e os dois primeiros estados vazantes no contínuo estão representados pelas linhas azul, roxa, verde e preta, respectivamente. Na Fig. 4.16(b) é mostrada a probabilidade de ocupação térmica em 78 K dos estados eletrônicos em função da energia. O cálculo do espectro de absorção considerando todos os estados termicamente populados sobreposto com o espectro de fotocorrente experimental são apresentados na Fig. 4.16(c). O *bias* de tensão negativo inclina o perfil de potencial da superrede na direção da superrede formada pelas cinco repetições de espelho de Bragg. Com isso, o estado fundamental da superrede não está localizado no poço quântico de defeito e sim nos estados fundamentais dos poços quânticos da superrede à esquerda, como é observado na Fig. 4.16(a). Considerando que a energia de Fermi não se altera com o *bias* de tensão, a probabilidade da ocupação térmica dos estados da minibanda aumenta com a intensidade do *bias*. Além do estado fundamental do poço quântico de defeito, todos os estados da superrede à esquerda estão populados. A comparação entre a espectro de fotocorrente experimental (quadrados pretos), o espectro de absorção teórica de cada es-

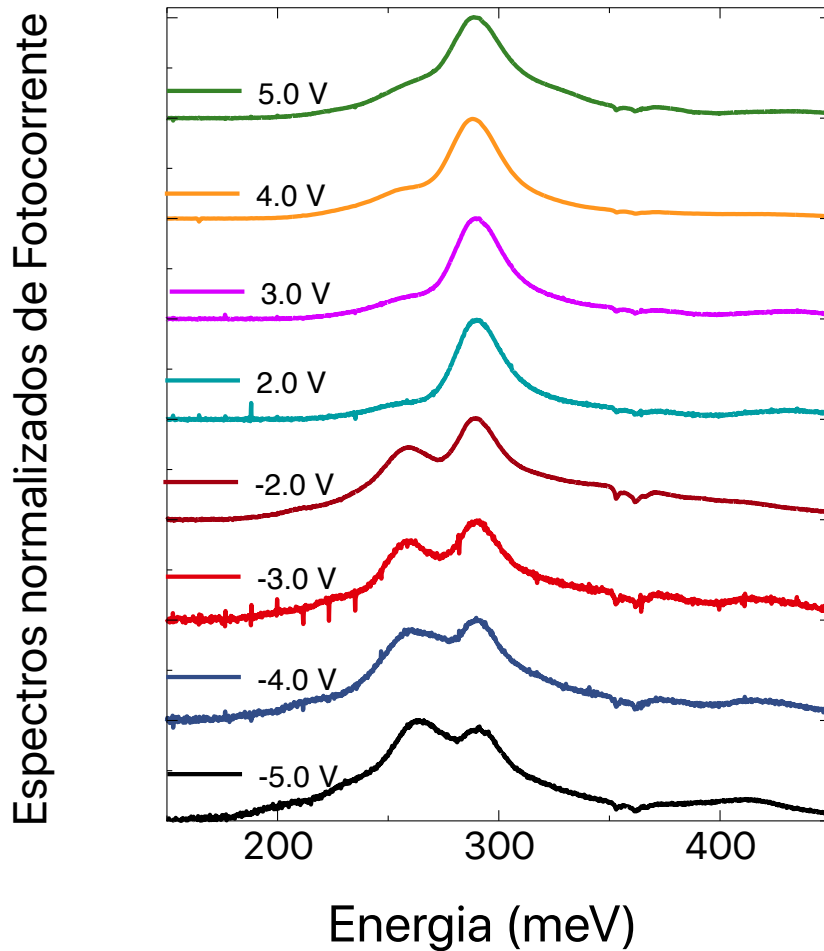


Figura 4.15: Espectros de fotocorrente normalizados da superrede assimétrica, no modo fotocondutivo, para o intervalo de *bias* de tensão aplicado entre -5.0 V e 5.0 V. Os espectros foram empilhados com o objetivo de facilitar a análise do perfil do espectro de fotocorrente em função do *bias* de tensão.

tado populado multiplicado pela sua probabilidade de população (linha rosa) e a soma de todos os espectros de absorção (linha preta) podem ser observados na Fig. 4.16(c). O espectro de absorção total apresenta um bom ajuste com o espectro de fotocorrente experimental. O pico principal do espectro de fotocorrente corresponde à transição óptica entre o estado fundamental do poço quântico de defeito e o primeiro estado vazante no contínuo. O pico secundário da fotocorrente origina das transições ópticas iniciadas a partir dos estados da minibanda para o primeiro estado vazante no contínuo.

Essa metodologia foi aplicada na análise do espectro de fotocorrente para o *bias* +3.0 V, como pode ser observado na Fig. 4.17. Para o *bias* positivo, o estado fundamental da superrede ainda continua localizado no estado fundamental do poço quântico de defeito e o primeiro estado excitado está localizado no estado fundamental do poço quântico lateral à direita dele, Fig. 4.17(a). Nesta direção do *bias*, a superrede é formada por apenas uma

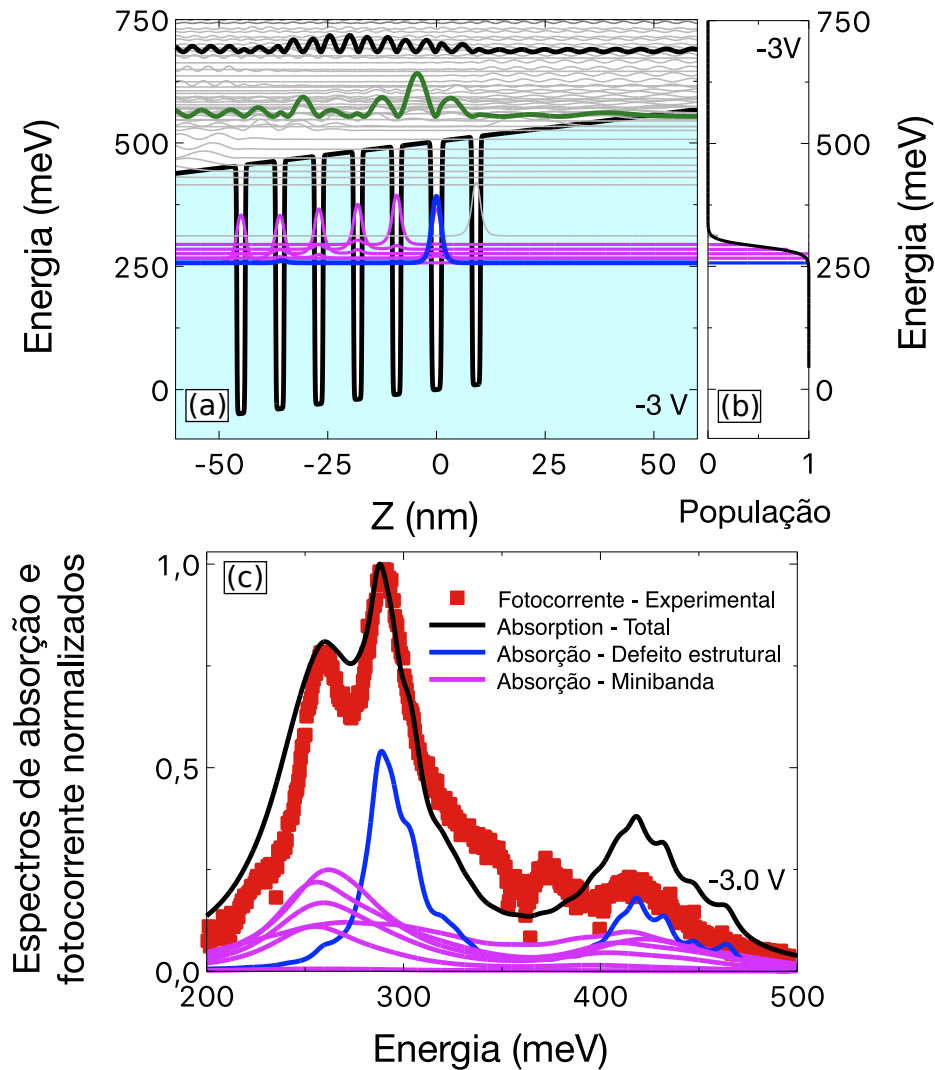


Figura 4.16: (a) Perfil de potencial da banda de condução e a densidades de probabilidade eletrônicas para o *bias* de tensão de -3.0 V. (b) A probabilidade de população térmica dos estados confinados na superrede, considerando a energia de Fermi de 290 meV e a temperatura da rede cristalina de 80 K. Para *bias* negativo quase todos os estados da minibanda estão populados. (c) Comparação entre o espectro de fotocorrente experimental (quadrado vermelho) e o espectro de absorção teórico, no qual foi considerado as contribuições de todos os estados termicamente populados.

repetição do espelho de Bragg, logo apenas o estado fundamental do poço quântico lateral pode ser populado, conforme observado na probabilidade de população na Fig. 4.17(b). O espectro de absorção total teórico apresenta um excelente ajuste com o espectro de fotocorrente experimental, Fig. 4.17(c). Novamente, o pico principal está relacionado com a transição óptica entre o estado fundamental do poço quântico de defeito e o primeiro estado vazante no contínuo. Enquanto que, o ombro em 260 meV corresponde à transição óptica iniciada no primeiro estado da minibanda para o primeiro estado vazante no contínuo.

O pico secundário para *bias* negativo e o ombro para *bias* positivo ocorrem na mesma energia, diferenciando entre si apenas a amplitude. A origem deles está relacionada com as transições ópticas partindo dos estados da minibanda e a amplitude depende do número de estados da minibanda populados em cada direção do *bias* de tensão.

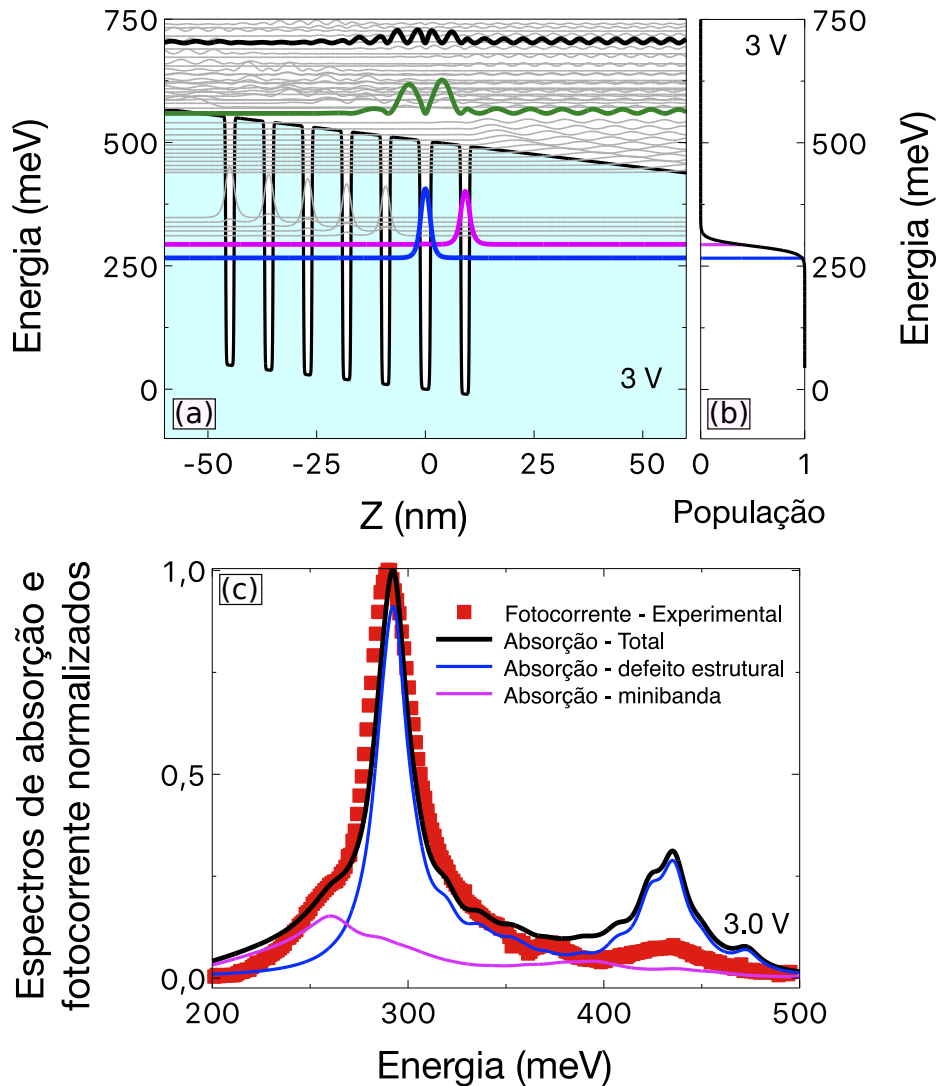


Figura 4.17: (a) Perfil de potencial para a banda de condução e as densidades de probabilidade dos elétrons para o *bias* de +3.0 V. (b) A probabilidade de população térmica dos estados confinados na superrede, considerando a energia de Fermi de 290 meV e a temperatura de rede de 80 K. Para *bias* positivo, apenas um estado da minibanda está populado. (c) Comparação entre o espectro de fotocorrente (quadrado vermelho) e o espectro de absorção teórico (linha preta), considerando a contribuição de todos os estados termicamente populados (linhas azul e rosa).

A mesma metodologia foi aplicada para os demais espectros de fotocorrente em função do *bias* de tensão aplicado. A comparação entre as energias dos dois picos no espectro de fotocorrente com os dois picos no espectro de

absorção teórico em função do *bias* está resumida na Fig. 4.18. A energia do pico principal na fotocorrente (triângulo preto) não apresentou qualquer variação em função da direção e da amplitude do *bias* de tensão. A energia do pico secundário na fotocorrente (círculo preto) para *bias* negativo também não apresentou nenhuma variação com o aumento da tensão. No entanto, a energia do picos secundário para *bias* positivo aumentou com a amplitude da tensão. As energias dos dois pico no espectro de absorção teórico (linha azul para o pico principal e linha roxa para o pico secundário) apresentaram o mesmo comportamento observado nos picos da fotocorrente, mostrando um ótimo acordo entre os resultados experimentais e os resultados teóricos.

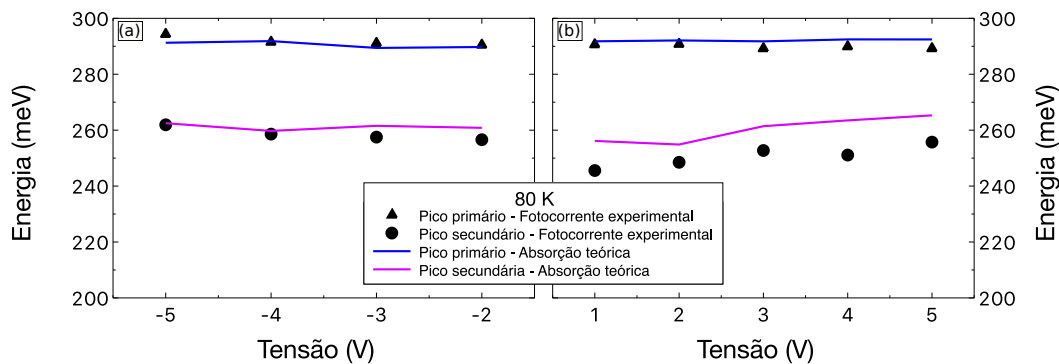


Figura 4.18: Comparação entre as energias do pico principal (triângulo preto) e do pico secundário/ombro (círculo preto) dos espectros de fotocorrente com os picos de energias dos espectros de absorção teórico (linhas rosa e azul) em função do *bias*. (a) Para *bias* negativo e (b) Para os *bias* positivo.

Por fim, foi investigado o espectro de fotocorrente em função da temperatura para os *biases* -5.0 V, -3.0 V, 3.0 V e 5.0 V. Os espectros de fotocorrente nas temperaturas 78 K e na maior temperatura medida para esses *biases* estão esquematizados na Fig. 4.19. Para os *biases* -5.0 V e -3.0 V, Fig. 4.19(a-b), os espectros de fotocorrente foram medidos até as temperaturas de 250 K e 280 K, respectivamente. Para os *biases* 3.0 V e 5.0 V, Fig. 4.19(c-d), os espectros de fotocorrente foram medidos até as temperaturas de 280 K e 260 K, respectivamente. No geral, os espectros de fotocorrente em altas temperaturas apresentaram uma razão sinal-ruído muito maior do que foi observado no espectro de fotocorrente em temperatura ambiente no modo fotovoltaico. Além disso, ocorreu um deslocamento para o vermelho na energia de pico principal em todos os espectros de fotocorrente em altas temperaturas, em consequência da diminuição do *gap* de energia das ligas semicondutoras.

Com isso, as caracterizações eletro-ópticas do fotodetector operando no modo fotocondutivo foram apresentadas. Na próxima seção serão apresentadas as figuras de mérito.

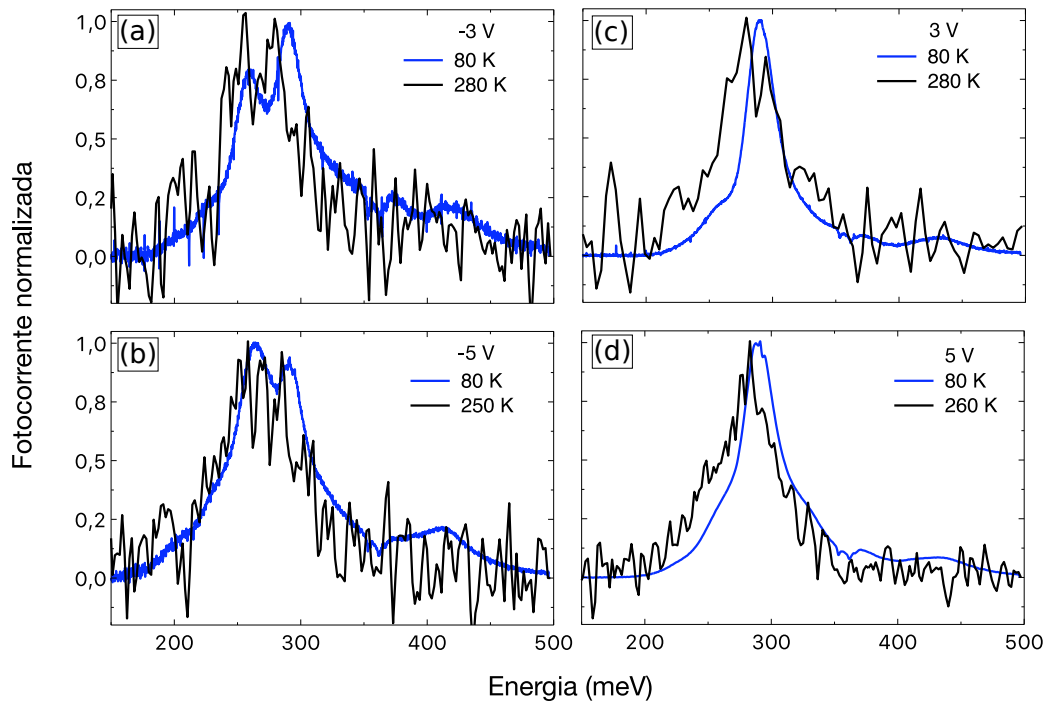


Figura 4.19: Sobreposição dos espectros de fotocorrente, no modo fotocondutor, medidos na temperatura de 78 K (linha azul) e a maior temperatura possível (linha preta) para os *biases* -5.0 V, -3.0 V, 3.0 V e 5.0 V.

4.4.2 Responsividade espectral

As medidas da responsividade espectral em função do *bias* de tensão e da temperatura foram feitas na mesma configuração experimental usada no modo fotovoltaico, Fig. 4.11. Na Fig. 4.20(a), os valores da responsividade de pico para os *biases* -5.0 V, -3.0 V, 3.0 V e 5.0 V em função da temperatura estão apresentados. De modo geral, a responsividade de pico manteve praticamente constante com o aumento da temperatura. Esse resultado indica que a dopagem na amostra está otimizada, ou seja, as impurezas estão ionizadas e a população do estado fundamental não varia com o aumento da temperatura e, conseqüentemente, a responsividade se mantém praticamente constante.

Numa temperatura fixa, a responsividade de pico aumenta em função do *bias* de tensão. A responsividade de pico para *bias* positivo apresenta maior valor quando comparada com a responsividade para *bias* negativo. Esta diferença entre as responsividades em função da direção do *bias* está relacionada com a probabilidade de escape do elétron fotoexcitado no primeiro estado vazante no contínuo. Na direção positiva do *bias*, a função de onda é estendida, enquanto para a direção negativa do *bias*, a função de onda está confinada, conforme observada na Fig. 4.20(b).

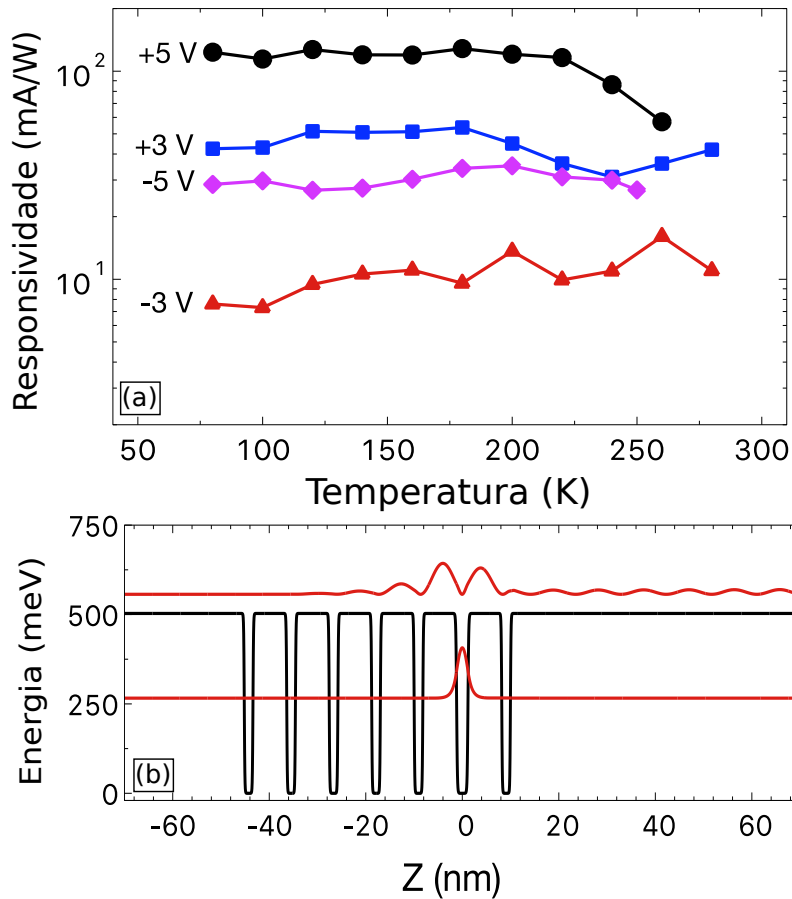


Figura 4.20: (a) Responsividade de pico medido nos *biases* -5.0 V, -3.0 V, 3.0 V e 5.0 V em função da temperatura. (b) Relacionando a característica da função de onda do estado vazante no contínuo ser vazada numa direção com o maior valor da responsividade de pico para *bias* positivo.

4.4.3

Detectividade espectral

A aquisição da corrente de ruído do fotodetector em função do *bias* e da temperatura foi realizada com a mesma configuração experimental do modo fotovoltaico, Fig. 4.13. As correntes de ruído para os *biases* -5.0 V, -3.0 V, 3.0 V e 5.0 V em função temperatura podem ser observadas na Fig. 4.21(a). De modo geral, a intensidade da corrente de ruído se manteve aproximadamente constante em 10^{-13} A até 140 K, após isso um crescimento exponencial nela é observada até 200 K e depois a corrente de ruído se manteve constante em 10^{-10} A. O *plateau* na corrente de ruído observado em baixa temperatura é devido ao limite inferior de detecção do amplificador *lock-in*. O aumento exponencial na corrente de ruído observado a partir de 140 K está relacionado com a temperatura BLIP do fotodetector. Em cada temperatura, a corrente de ruído mostrou ser aproximadamente independente do *bias* de tensão aplicado. Esse comportamento pode indicar que os mecanismos responsáveis para a

corrente de ruído são de origens térmicas. Um estudo mais detalhado sobre a origem da corrente de ruído é necessário. A corrente de ruído gerado pelo detector é menor quando comparado com a corrente de ruído gerada por detectores baseados em poços quânticos. Essa redução na corrente de ruído ocorre por causa do aumento virtual do *offset* da banda de condução que reduz a geração de corrente de ruído térmico.

Os valores da detectividade para os *biases* -5.0 V, -3.0 V, 3.0 V e 5.0 V em função da temperatura estão resumidos na Fig. 4.21(b). Até a temperatura de 140 K, a detectividade apresenta um comportamento aproximadamente constante, devido à corrente de ruído ser limitada experimentalmente. O maior valor da detectividade foi $5.72 \times 10^{+10}$ Jones para o *bias* +5.0 V. Após essa temperatura, é observada uma diminuição na detectividade em consequência do aumento da corrente de ruído. Em todas as temperaturas, a detectividade para *bias* positivo apresenta melhor resultado quando comparado com a detectividade medida com *bias* negativo. Isso acontece por causa da corrente de ruído ser independente do *bias* aplicado e também em consequência da responsividade apresentar maior valor com na direção positiva do *bias*.

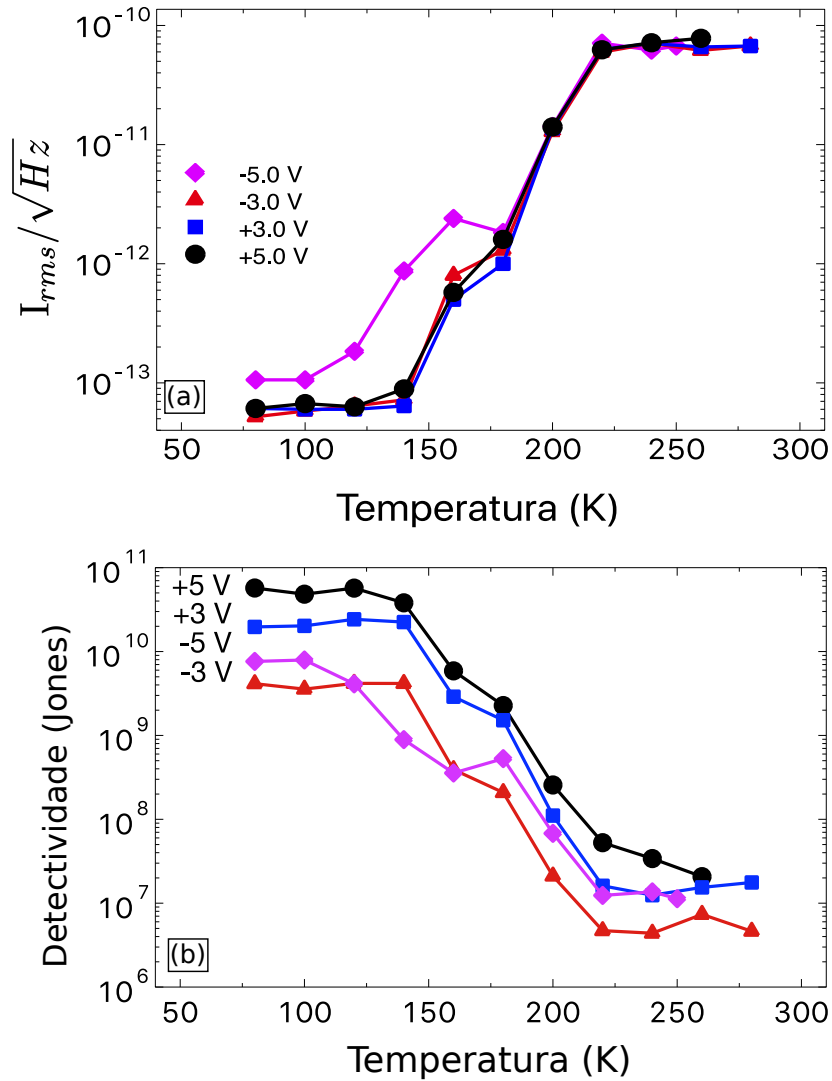


Figura 4.21: (a) A corrente de ruído em função do *bias* de tensão medida com o amplificador *lock-in* em função da temperatura. (b) Detectividade de pico calculada a partir da medida da corrente de ruído em função do *bias* e da temperatura.

5

Conclusão e Trabalhos Futuros

Nesta tese de doutorado, o conceito de estados eletrônicos vazantes no contínuo (LES) para o uso em fotodetectores de infravermelho médio baseados em superredes com um defeito estrutural (SLIP) de alto desempenho foi investigado tanto no aspecto teórico quanto experimental. Em razão das características peculiares deste estado e da assimetria estrutural da heteroestrutura, o fotodetector apresentou modo duplo de operação, ou seja, fotovoltaico e fotocondutivo, e operação em temperatura ambiente. As figuras de mérito do SLIP, responsividade e detectividade, mostraram ser competitivas com os melhores fotodetectores encontrados na literatura, tanto operando em temperaturas criogênicas, no modo fotocondutivo, quanto operando em temperatura ambiente, no modo fotovoltaico, evidenciando a versatilidade e o potencial dessa nova classe de fotodetector.

A função de onda do LES tem a característica de ser localizada numa direção e ser estendida na outra. A heteroestrutura investigada para criar esse peculiar estado foi uma superrede assimétrica de *InGaAs/InAlAs* com um defeito estrutural. Para construir o LES, uma engenharia de *bandgap* na banda de condução foi aplicada para otimizar a espessura de cada camada da superrede. A superrede otimizada é formada por uma superrede com cinco repetições de espelho de Bragg, o poço quântico de defeito estrutural dopado tipo-*n* e uma superrede com apenas uma repetição espelho de Bragg. Essa amostra foi crescida por MBE e processada no formato de *mesas* retangulares por litografia durante o período de pós-doutorado do Professor Dr. Germano Maioli Penello na universidade de Princeton.

A primeira caracterização óptica realizada na amostra foi o espectro de absorção em função da temperatura. Essa caracterização foi essencial para validar o grau de qualidade do crescimento da amostra, pois o confinamento do LES depende da homogeneidade na espessura de cada camada da superrede para satisfazer a condição de espelho de Bragg. O espectro de absorção em 77 K apresentou dois picos de absorção, um pico principal em 300 meV e um pico secundário em torno 430 meV. Esses dois picos correspondem às transições ópticas do estado fundamental no poço quântico de defeito estrutural para os dois primeiros estados vazantes no contínuo, respectivamente.

Devido ao estado eletrônico vazante, o fotodetector apresentou modo de operação duplo, ou seja, fotovoltaico e fotocondutivo.

Para o modo fotovoltaico, o espectro de fotocorrente apresentou os mesmos picos observados no espectro de absorção. Conforme esperado, o espectro de fotocorrente foi medido até a temperatura ambiente com uma boa relação sinal-ruído. A fotocorrente em temperatura ambiente foi possível por causa da diminuição da corrente de escuro de origem térmica. Essa corrente indesejada foi minimizada no SLIP devido ao modo fotovoltaico e do aumento virtual do *offset* da banda de condução.

Para o modo fotocondutivo, o perfil do espectro de fotocorrente mostrou ser dependente da direção do *bias* de tensão é aplicado. Para *bias* positivo, o espectro de fotocorrente apresentou um pico principal em 300 meV e um ombro em torno de 260 meV. Para *bias* negativo, o espectro de fotocorrente apresentou uma banda larga com dois picos, o principal em 300 meV e o secundário em 260 meV. O ombro e o pico secundário estão relacionados à mesma transição óptica entre os estados da minibanda e o primeiro estado eletrônico vazante. A diferença entre eles ocorre por causa do número de estados da minibanda populados. O modo fotocondutivo também apresentou uma temperatura de operação alta. A temperatura máxima de operação foi de 280 K com *bias* de +3 V, mas com um ruído térmico consideravelmente maior quando comparado com a fotocorrente em temperatura ambiente.

Por fim, as figuras de mérito (responsividade e detectividade) do SLIP foram obtidas. Para o modo fotocondutivo, a responsividade manteve-se constante em função da temperatura. Isso significa que os dopantes estão todos ionizados dentro desse intervalo de temperatura. A detectividade se manteve constante até 140 K e após isso um decréscimo exponencial na detectividade foi observado. O modo fotovoltaico apresentou o menor valor de responsividade, mas a sua detectividade está na mesma ordem de grandeza do modo fotocondutivo devido à baixa corrente de ruído gerada. Com isso, o SLIP investigado apresentou figuras de mérito em 77 K, no modo fotocondutivo, competitiva com os melhores QWIPs na literatura. Em temperatura ambiente, o SLIP apresentou figuras de mérito, no modo fotovoltaico, na mesma ordem de grandeza dos QCDs, com a vantagem do SLIP apresentar uma resistência diferencial maior. Em 77 K, o maior valor da responsividade e da detectividade foram 100 mA W^{-1} e 5.7×10^{10} Jones para *bias* +5 V, respectivamente. Enquanto para a temperatura ambiente foram 0.1 mA W^{-1} e 1.3×10^5 Jones.

Ainda há muito a ser explorado nesse tipo de superrede em trabalhos futuros. Na campo teórico, o espectro de fotocorrente não foi possível ser calculado com o método *Split-Operator* devido à sua incompatibilidade com a

aproximação não-parabólica. Uma provável alternativa é utilizar o método da matriz densidade (Iotti, 2015) para o cálculo o espectro de fotocorrente. Além disso, o cálculo da corrente de escuro é importante para minimizar o ruído térmico de futuros SLIPs (de Moura Pedroso, 2017, Trinite, 2011). No campo experimental, o processamento dos fotodetectores dentro de nano-antenas tem mostrado promissor para o aumento da temperatura de operação do QWIPs (Palaferri, 2018, Rodriguez, 2018). Neste caso, a vantagem de usar as nano-antenas em relação ao processamento do tipo *mesa* é o aumento do número dos elétrons fotoexcitados, mas mantendo no mesmo nível os elétrons termicamente excitados. Com esse tipo de processamento, provavelmente as figuras de mérito do nosso fotodetector serão melhoradas. Outro ponto de interesse seria a introdução de uma cascata quântica na superrede, Fig. 5.1, para otimizar o processo de decaimento dos elétrons no LES para os estados da minibanda, no modo fotovoltaico. A espessura de cada camada da cascata precisa ser otimizadas para maximizar o espalhamento elétron-fônon (Saha, 2015, Saha, 2016). Conforme mostrado durante a tese, o estado vazante no contínuo é promissor para fotodetectores e ainda há muito a ser explorado.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1521445/CA

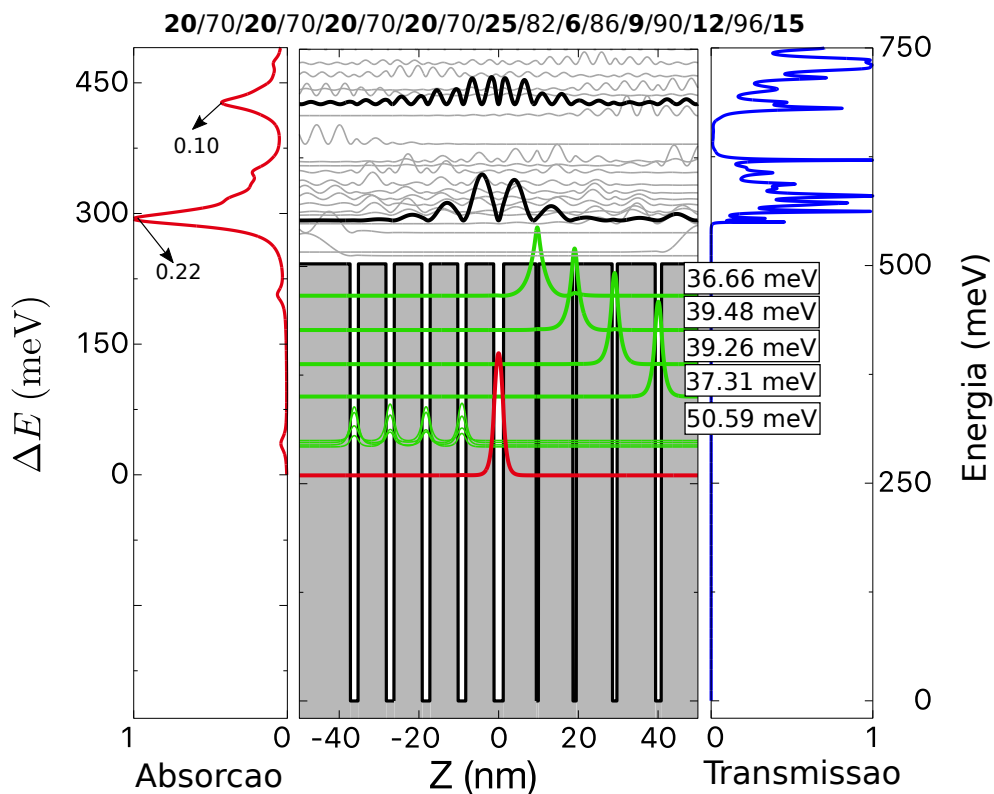


Figura 5.1: Estrutura de banda da superrede assimétrica acoplada em uma cascata quântica. A cascata quântica tem a função de tornar o decaimento do elétron no LES para o estado fundamental mais otimizado.

Referências bibliográficas

- [Adler, 1989] ADLER, ERIC L. **Matrix methods applied to acoustic waves in multilayers**. In: ULTRASONICS SYMPOSIUM, 1989. PROCEEDINGS., IEEE 1989, p. 367–372. IEEE, 1989.
- [Ashcroft, 2005] ASHCROFT, NEIL W AND MERMIN, N DAVID. **Solid state physics (holt, rinehart and winston, new york, 1976)**. Google Scholar, 403, 2005.
- [Bastard, 1990] BASTARD, GERALD. **Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures**, 1990.
- [Bell, 1972] BELL, R. J.. **Introductory Fourier Transform Spectroscopy**. academic Press, New York, 1972.
- [Bellissard, 1989] BELLISSARD, J AND IOCHUM, B AND SCOPPOLA, E AND TESTARD, D. **Spectral properties of one dimensional quasi-crystals**. Communications in mathematical physics, 125(3):527–543, 1989.
- [BenDaniel, 1966] BENDANIEL, DJ AND DUKE, CB. **Space-charge effects on electron tunneling**. Physical review, 152(2):683, 1966.
- [Björck, 1994] BJÖRCK, ÅKE. **Numerics of gram-schmidt orthogonalization**. Linear Algebra and Its Applications, 197:297–316, 1994.
- [Born, 1999] BORN, M.; WOLF, E.. **Principles of Optics**. Cambridge University Press, 7 edition, 1999.
- [Capasso, 1992] CAPASSO, FEDERICO AND SIRTORI, CARLO AND FAIST, JEROME AND SIVCO, DEBORAH L AND CHU, SUNG-NEE G AND CHO, ALFRED Y. **Observation of an electronic bound state above a potential well**. Nature, 358(6387):565, 1992.
- [Casas, 2012] CASAS, FERNANDO AND MURUA, ANDER AND NADINIC, MLADEN. **Efficient computation of the zassenhaus formula**. Computer Physics Communications, 183(11):2386–2391, 2012.
- [Cohen, 1991] COHEN-TANNOUJDI, C. AND DIU, B. AND LALOE, F.. **Quantum Mechanics**. Número v. 1 em Quantum Mechanics. Wiley, 1991.

- [Cohen-Tannoudji, 1973] COHEN-TANNOUJJI, CLAUDE AND DIU, BERNARD AND LALOË, FRANCK AND CROSEMANN, BERND. **Quantum mechanics**, 1998.
- [Degani, 2010] DEGANI, MARCOS H AND MAIALLE, MARCELO Z. **Numerical calculations of the quantum states in semiconductor nanostructures**. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 7(2):454–473, 2010.
- [Faist, 1994] FAIST, J.; CAPASSO, F.; SIVCO, D. L.; SIRTORI, C.; HUTCHINSON, A. L. ; CHO, A. Y.. **Quantum cascade laser**. *Science*, 264(5158):553–556, 1994.
- [Ghatak, 1988] GHATAK, AJOY K AND THYAGARAJAN, K AND SHENOY, MR. **A novel numerical technique for solving the one-dimensional schroedinger equation using matrix approach-application to quantum well structures**. *IEEE journal of Quantum Electronics*, 24(8):1524–1531, 1988.
- [Giorgetta, 2009] GIORGETTA, FABRIZIO R AND BAUMANN, ESTHER AND GRAF, MARCEL AND YANG, QUANKUI AND MANZ, CHRISTIAN AND KOHLER, KLAUS AND BEERE, HARVEY E AND RITCHIE, DAVID A AND LINFIELD, EDMUND AND DAVIES, ALEXANDER G AND OTHERS. **Quantum cascade detectors**. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 45(8):1039–1052, 2009.
- [Goossen, 1988] GOOSSEN, KW AND LYON, SA AND ALAVI, K. **Photovoltaic quantum well infrared detector**. *Applied physics letters*, 52(20):1701–1703, 1988.
- [Graf, 2006] GRAF, MARCEL AND HOYLER, NICOLAS AND GIOVANNINI, MARCELLA AND FAIST, JÉRÔME AND HOFSTETTER, DANIEL. **Inp-based quantum cascade detectors in the mid-infrared**. *Applied physics letters*, 88(24):241118, 2006.
- [Guerra, 2016] GUERRA, L AND PENELLO, GM AND PIRES, MP AND PINTO, LD AND JAKOMIN, R AND MOURAO, RT AND DEGANI, MH AND MAIALLE, MZ AND SOUZA, PL. **Detecting infrared radiation beyond the bandoffset with intersubband transitions**. *IEEE Photonics Technology Letters*, 28(15):1641–1644, 2016.
- [Harrer, 2016] HARRER, A AND SCHWARZ, B AND SCHULER, S AND REININGER, P AND WIRTHMÜLLER, A AND DETZ, H AND MACFARLAND,

- D AND ZEDERBAUER, T AND ANDREWS, AM AND ROTHERMUND, M AND OTHERS. **4.3 μm quantum cascade detector in pixel configuration.** *Optics express*, 24(15):17041–17049, 2016.
- [Harrison, 2016] HARRISON, PAUL AND VALAVANIS, ALEX. **Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures.** John Wiley & Sons, 2016.
- [Harwit, 1987] HARWIT, ALEX AND HARRIS JR, JS. **Observation of stark shifts in quantum well intersubband transitions.** *Applied physics letters*, 50(11):685–687, 1987.
- [Helm, 1999] HELM, MANFRED. **The basic physics of intersubband transitions.** In: SEMICONDUCTORS AND SEMIMETALS, volumen 62, p. 1–99. Elsevier, 1999.
- [Hofstetter, 2010] HOFSTETTER, DANIEL AND GIORGETTA, FABRIZIO R AND BAUMANN, ESTHER AND YANG, QUANKUI AND MANZ, CHRISTIAN AND KÖHLER, KLAUS. **Mid-infrared quantum cascade detectors for applications in spectroscopy and pyrometry.** *Applied Physics B*, 100(2):313–320, 2010.
- [Iotti, 2015] IOTTI, RITA C AND CIANCIO, EMANUELE AND ROSSI, FAUSTO. **Quantum transport theory for semiconductor nanostructures: A density-matrix formulation.** *Physical Review B*, 72(12):125347, 2005.
- [Jonsson, 1990] JONSSON, BJÖRN AND ENG, SVERRE T. **Solving the schrodinger equation in arbitrary quantum-well potential profiles using the transfer matrix method.** *IEEE journal of quantum electronics*, 26(11):2025–2035, 1990.
- [Lai, 2005] LAI, K.; HAYWOOD, S.; MOHAMED, A.; MISSOUS, M. ; GUPTA, R.. **PHOTOVOLTAIC OPERATION UP TO 270 K OF A STRAIN-COMPENSATED ALAS/ IN 0.84 GA 0.16 AS/ ALAS/ INALAS QUANTUM WELL INFRARED PHOTODETECTOR.** *Applied Physics Letters*, 87(19):192113, 2005.
- [Leavitt, 2001] LEAVITT, RP AND LITTLE, JW. **Infrared photodetector based on intersubband transitions to minigap-confined states in doped quantum wells.** *Applied Physics Letters*, 79(13):2091–2093, 2001.
- [Levine, 1987] LEVINE, BF AND MALIK, RJ AND WALKER, J AND CHOI, KK AND BETHEA, CG AND KLEINMAN, DA AND VANDENBERG,

- JM. **Strong 8.2 μm infrared intersubband absorption in doped GaAs/AlAs quantum well waveguides.** Applied Physics Letters, 50(5):273–275, 1987.
- [Levine,1993] LEVINE, BF. **Quantum-well infrared photodetectors.** Journal of applied physics, 74(8):R1–R81, 1993.
- [Luna, 2003] LUNA, E.; GUZMAN, A.; SANCHEZ-ROJAS, J.; CALLEJA, E. ; MUNOZ, E.. **Modulation-doping in 3–5 μm GaAs/AlAs/AlGaAs double barrier quantum well infrared photodetectors: an alternative to achieve high photovoltaic performance and high temperature detection.** Infrared physics & technology, 44(5-6):383–390, 2003.
- [Palaferrri, 2018] PALAFERRI, DANIELE AND TODOROV, YANKO AND BIGIOLI, AZZURRA AND MOTTAGHIZADEH, ALIREZA AND GACEMI, DJAMAL AND CALABRESE, ALLEGRA AND VASANELLI, ANGELA AND LI, LIANHE AND DAVIES, A GILES AND LINFIELD, EDMUND H AND OTHERS. **Room-temperature nine- μm -wavelength photodetectors and GHz-frequency heterodyne receivers.** Nature, 556(7699):85, 2018.
- [Penello, 2013] PENELLO, GM AND DEGANI, MH AND MAIALLE, MZ AND KAWABATA, RMS AND MICHA, DN AND ANDRADE, R RIBEIRO AND SCHIMIDT, W AND PIRES, MP AND SOUZA, PL. **Quantum well infrared photodetector based on a continuum localized state in a defective superlattice.** In: MICROELECTRONICS TECHNOLOGY AND DEVICES (SBMICRO), 2013 SYMPOSIUM ON, p. 1–3. IEEE, 2013.
- [Penello, 2013] PENELLO, GERMANO M AND DEGANI, MARCOS H AND MAIALLE, MARCELO Z AND PIRES, MAURICIO P AND SOUZA, PATRÍCIA L. **Photocurrent calculation of intersubband transitions to continuum-localized states in GaAs/AlGaAs multiquantum wells for mid-infrared photodetector.** IEEE Journal of Quantum Electronics, 49(9):747–752, 2013.
- [Penello, 2016] PENELLO, GERMANO M AND DEGANI, MARCOS H AND MAIALLE, MARCELO Z AND KAWABATA, RUDY MS AND MICHA, DANIEL N AND PIRES, MAURICIO P AND SOUZA, PATRÍCIA L. **Exploring parity anomaly for dual peak infrared photodetection.** IEEE journal of quantum electronics, 52(12):1–6, 2016.
- [Penello, 2018] PENELLO, GERMANO MAIOLI AND PEREIRA, PEDRO HENRIQUE AND PIRES, MAURICIO PAMPLONA AND SIVCO, DEBORAH AND

- GMACHL, CLAIRE AND SOUZA, PATRICIA LUSTOZA. **Leaky electronic states for photovoltaic photodetectors based on asymmetric superlattices**. *Applied Physics Letters*, 112(3):033503, 2018.
- [Penello, 2019] PENELLO, GERMANO M AND PEREIRA, PEDRO H AND GUERRA, LESSLIE AND PINTO, LUCIANA D AND JAKOMIN, ROBERTO AND MOURÃO, RENATO T AND DEGANI, MARCOS H AND MAIALLE, MARCELO Z AND SIVCO, DEBORAH AND GMACHL, CLAIRE AND OTHERS. **Progress in symmetric and asymmetric superlattice quantum well infrared photodetectors**. *Annalen der Physik*, 531(6):1800462, 2019.
- [Pereira, 2019] PEREIRA, PEDRO HENRIQUE AND PENELLO, GERMANO MAIOLI AND PIRES, MAURICIO PAMPLONA AND SIVCO, DEBORAH AND GMACHL, CLAIRE AND SOUZA, PATRICIA LUSTOZA. **High performance dual-mode operation asymmetric superlattice infrared photodetector using leaky electronic states**. *Journal of Applied Physics*, 125(20):204501, 2019.
- [Pereira, 2020] PEREIRA, PEDRO AND GUERRA, LESSLIE AND PENELLO, GM AND PIRES, MP AND PINTO, LD AND JAKOMIN, R AND MOURÃO, RT AND DEGANI, MH AND MAIALLE, MZ AND SOUZA, PL. **Quantum well infrared photodetector for the swir range**. In: *DEVELOPMENTS AND ADVANCES IN DEFENSE AND SECURITY*, p. 363–370. Springer, 2020.
- [Ravikumar, 2014] RAVIKUMAR, ARVIND P AND GARCIA, THOR A AND JESUS, JOEL DE AND TAMARGO, MARIA C AND GMACHL, CLAIRE F. **High detectivity short-wavelength ii-vi quantum cascade detector**. *Applied Physics Letters*, 105(6):061113, 2014.
- [Ravikumar, 2015] RAVIKUMAR, ARVIND P AND DE JESUS, JOEL AND TAMARGO, MARIA C AND GMACHL, CLAIRE F. **High performance, room temperature, broadband ii-vi quantum cascade detector**. *Applied Physics Letters*, 107(14):141105, 2015.
- [Rodriguez, 2018] RODRIGUEZ, ETIENNE AND MOTTAGHIZADEH, ALIREZA AND GACEMI, DJAMAL AND PALAFERRI, DANIELE AND ASGHARI, ZAHRA AND JEANNIN, MATHIEU AND VASANELLI, ANGELA AND BIGIOLI, AZZURRA AND TODOROV, YANKO AND BECK, MATTIAS AND OTHERS. **Room-temperature, wide-band, quantum well infrared**

- photodetector for microwave optical links at 4.9 μm wavelength. ACS Photonics, 5(9):3689–3694, 2018.
- [Saha, 2015] SAHA, SUMIT AND KUMAR, JITENDRA AND OTHERS. **Effect of interface roughness scattering and temperature on quantum cascade detectors.** In: 2015 INTERNATIONAL CONFERENCE ON MICROWAVE, OPTICAL AND COMMUNICATION ENGINEERING (IC-MOCE), p. 254–257. IEEE, 2015.
- [Saha, 2016] SAHA, SUMIT AND KUMAR, JITENDRA. **Rate equation modelling and investigation of quantum cascade detector characteristics.** Superlattices and Microstructures, 98:70–77, 2016.
- [Sakurai, 1995] SAKURAI, JUN JOHN AND COMMINS, EUGENE D. **Modern quantum mechanics, revised edition,** 1995.
- [Schneider, 1993] SCHNEIDER, H AND LARKINS, EC AND RALSTON, JD AND SCHWARZ, K AND FUCHS, F AND KOIDL, P. **Space-charge effects in photovoltaic double barrier quantum well infrared detectors.** Applied physics letters, 63(6):782–784, 1993.
- [Schneider, 1997] SCHNEIDER, HI AND SCHÖNBEIN, C AND WALTHER, M AND SCHWARZ, K AND FLEISSNER, J AND KOIDL, P. **Photovoltaic quantum well infrared photodetectors: The four-zone scheme.** Applied physics letters, 71(2):246–248, 1997.
- [Schneider, 2007] SCHNEIDER, H.; LIU, H. C.. **Quantum well infrared photodetectors.** Springer, 2007.
- [Schonbein, 1996] SCHONBEIN, C AND SCHNEIDER, H AND BIHLMANN, G AND SCHWARZ, K AND KOIDL, P. **A 10 μm gas/al x gal- as intersubband photodetector operating at zero bias voltage.** Applied physics letters, 68(7):973–975, 1996.
- [Takagi, 1991] TAKAGI, T.; KOYAMA, F. ; IGA, K.. **ELECTRON-WAVE REFLECTION BY MULTI-QUANTUM BARRIER IN N-GAAS/I-ALGAAS/N-GAAS TUNNELING DIODE.** Applied physics letters, 59(22):2877–2879, 1991.
- [Tan, 1990] TAN, I-H AND SNIDER, GL AND CHANG, LD AND HU, EL. **A self-consistent solution of schrödinger–poisson equations using a nonuniform mesh.** Journal of applied physics, 68(8):4071–4076, 1990.

- [Trinite, 2011] TRINITÉ, VIRGINIE AND OUERGHEMMI, EZZEDDINE AND GUÉRIAUX, VINCENT AND CARRAS, MATHIEU AND NEDELCO, ALEXANDRU AND COSTARD, ERIC AND NAGLE, JULIEN. **Modelling of electronic transport in quantum well infrared photodetectors.** *Infrared Physics & Technology*, 54(3):204–208, 2011.
- [Vurgaftman, 2001] VURGAFTMAN, I AND MEYER, J ÁR AND RAM-MOHAN, L ÁR. **Band parameters for iii–v compound semiconductors and their alloys.** *Journal of applied physics*, 89(11):5815–5875, 2001.
- [West, 1985] WEST, LC AND EGLASH, SJ. **First observation of an extremely large-dipole infrared transition within the conduction band of a gaas quantum well.** *Applied Physics Letters*, 46(12):1156–1158, 1985.
- [Xuejiao, 2014] XUEJIAO, WANG AND JUNQI, LIU AND SHENQIANG, ZHAI AND FENGQI, LIU AND ZHANGUO, WANG. **Room temperature quantum cascade detector operating at 4.3 μm .** *Journal of Semiconductors*, 35(10):104009, 2014.
- [de Moura Pedrosa, 2017] DE MOURA PEDROSO, DIOGO AND VIEIRA, GUSTAVO SOARES AND PASSARO, ANGELO. **Modelling of high-temperature dark current in multi-quantum well structures from mwir to vlwir.** *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 86:190–197, 2017.

6

Apêndice I - Densidade de estados bidimensional na aproximação não-parabólica do vetor de onda do elétron

Neste apêndice será apresentada a dedução matemática da densidade de estados para um gás de elétrons bidimensional. A densidade de estados fornece o número de estados por unidade de energia e por unidade de volume disponíveis no sistema, sendo ela é escrita como

$$\rho^{2D}(E) = \frac{dN}{dE}. \quad (6-1)$$

O gás de elétrons livres bidimensional pode ser modelado como um poço quântico de duas dimensões com comprimento L no qual os elétrons estão livres dentro do poço. Se a energia potencial dentro do poço quântico é zero e infinita fora do poço, a equação de Schrödinger bidimensional é dada por

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) = -\frac{2m^*(E)E}{\hbar^2} \psi(x, y), \quad (6-2)$$

sendo \hbar a constante reduzida de Planck, $m^*(E)$ a massa efetiva do elétron no semiconductor que depende da sua energia e $\psi(x, y)$ a função de onda bidimensional. Essa equação diferencial parcial (EDP) é resolvida por meio da separação de variáveis, essa EDP é reduzida num sistema de duas equações diferenciais ordinárias da partícula livre. As autofunções desse problema são funções oscilatórias nas direção x e y , na forma de

$$\psi(x, y) = \frac{2}{L} \sin(k_x x) \sin(k_y y), \quad (6-3)$$

sendo k_x e k_y vetores de onda do elétron que satisfazem as condições de contorno, isto é, as autofunções e as suas derivadas precisam ser nulas nas bordas. Essas condições de contorno são satisfeitas quando

$$\begin{aligned} k_x &= \frac{\pi}{L} n_x \\ k_y &= \frac{\pi}{L} n_y \end{aligned} \quad (6-4)$$

no qual n_x e n_y são números inteiros.

Os autoestados permitidos podem ser plotados numa rede de pontos no espaço k bidimensional. Os estados permitidos estão espaçados entre si por πL nas duas direções, conforme observado na Fig. 6.1.

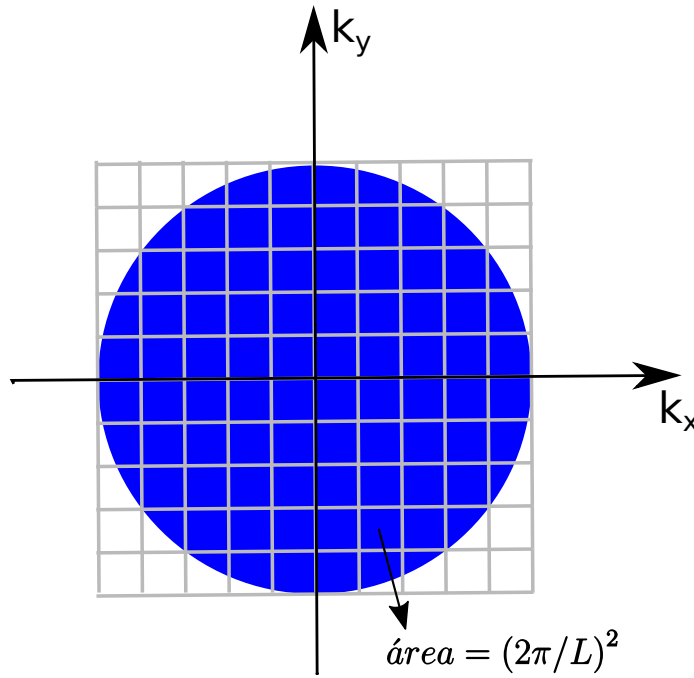


Figura 6.1: Ilustração do preenchimento dos estados do elétron do poço quântico no espaço k bidimensional

No espaço \mathbf{k} , o número de estados N é igual a área do círculo de raio k , dividido pela área ocupada por um estado no espaço k e pela área no espaço real, ou seja,

$$N^{2D} = 2\pi k^2 \frac{1}{(2\pi/L)^2} \frac{1}{L^2}, \quad (6-5)$$

$$N^{2D} = \frac{2\pi k^2}{(2\pi)^2}, \quad (6-6)$$

portanto,

$$\frac{dN^{2D}}{dk} = \frac{k}{\pi}. \quad (6-7)$$

A densidade de estados para o gás de elétron se torna

$$\rho^{2D}(E) = \frac{dN^{2D}}{dE} = \frac{dN^{2D}}{dk} \frac{dk}{dE}. \quad (6-8)$$

Considerando que a relação de dispersão para os elétrons no plano seja aproximadamente parabólica e a massa do elétron no semiconductor dependente da sua energia, a energia do elétron é dado por

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(E)}. \quad (6-9)$$

Logo a derivada do vetor de onda em relação a energia será

$$\frac{dk}{dE} = \left[\frac{2}{\hbar^2} \right]^{1/2} \left[\frac{1}{2} m^*(E)^{-1/2} \frac{dm^*(E)}{dE} E^{1/2} + \frac{1}{2} m^*(E)^{1/2} E^{-1/2} \right] \quad (6-10)$$

após algumas manipulações algébricas, a derivada é reduzida à

$$\frac{dk}{dE} = \frac{1}{\hbar^2 k} \left[\frac{dm^*(E)}{dE} E + m^*(E) \right]. \quad (6-11)$$

Finalmente, usando as eqs. 6-7, 6-8 e 6-11, a densidade de estado bidimensional é

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m_d^*(E)}{\pi \hbar^2}. \quad (6-12)$$

sendo $m_d^*(E)$ a massa efetiva da densidade de estados

$$m_d^*(E) = \left[\frac{dm^*(E)}{dE} E + m^*(E) \right]. \quad (6-13)$$

Conforme visto, a massa do elétron dependente da energia é usada na modelagem do efeito da não-parabolicidade na dispersão do vetor de onda do elétron na subbanda quando a sua energia se torna na mesma ordem do *gap* de energia do semiconductor. Neste modelo, a massa dependente da energia é escrita como

$$m^* = m(0)[1 + \alpha(E - V)] \quad (6-14)$$

sendo $m(0)$ a massa do elétron no fundo da subbanda e α o coeficiente da não-parabolicidade. Com isso, a massa efetiva da densidade de estados reduz a

$$m_d^*(E) = m(0)[1 + 2\alpha E]. \quad (6-15)$$

Por fim, a densidade de estados para o gás de elétrons bidimensional quando há vários níveis ocupados no poço quântico é dado por

$$\rho^{2D}(E) = \sum_{i=1}^n \frac{m_d^*(E)}{\pi \hbar^2} \Theta(E - E_i). \quad (6-16)$$

Vale ressaltar algumas características da densidade de estados do gás de elétron. Para o caso da massa efetiva constante ($\alpha = 0$) a densidade de estados dentro de uma subbanda do poço quântico é constante. Por outro lado, a densidade de estados dentro de uma subbanda varia linearmente com a energia, quando a massa efetiva variável é considerada.

7

Apêndice II - Espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR)

Neste apêndice serão apresentados os conceitos básicos da espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (do inglês FTIR). O FTIR é uma técnica largamente utilizada na investigação das transições ópticas de moléculas e materiais na região do espectro infravermelho (Bell, 1972).

O FTIR é basicamente um interferômetro de Michelson com uma fonte de infravermelho de espectro largo, a representação esquemática do FTIR é apresentada na Fig. 7.1. O feixe infravermelho é dividido em dois por um *beam-splitter*, esse dois feixes seguem para os dois braços do interferômetro e eles são refletidos por espelhos. Os dois feixes são recombinados pelo o mesmo *beam-splitter* e ele é enviado para o detector para que a sua intensidade seja analisada. Para haver um padrão de interferência, o comprimento de um dos braços do interferômetro precisa ser variável e esse padrão de interferência será determinado em função da diferença do caminho óptico entre os feixes. Para um feixe monocromático, quando a diferença do caminho óptico entre os dois braços for um múltiplo inteiro de comprimento de onda, eles vão interferir construtivamente e quando essa diferença for um múltiplo semi-inteiro do comprimento de onda, eles vão interferir de forma destrutiva. Essas interferências construtivas e destrutivas na intensidade detectada pelo detector em função da diferença do caminho óptico dão origem ao interferograma da fonte. Um feixe policromático vai interferir de modo diferente para cada comprimento de onda e para diversos caminhos ópticos. Então, O perfil do interferograma desse feixe policromático vai ser um sinal oscilatório superposto dos interferogramas de cada comprimento de onda do feixe policromático. A transformada de Fourier do interferograma fornece a densidade espectral em energia da fonte. A densidade espectral em energia fornece informação sobre como a intensidade de um sinal temporal é distribuída em diversas energias (Born, 1999).

A intensidade do feixe detectada no detector em função da diferença de caminho óptico entre os braços do espectrômetro (τ) é dada pela equação da interferência de dois feixes com a mesma intensidade

$$I = 2I_0 + 2 |\langle E(t) * E(t + \tau) \rangle| \cos(2\pi\nu\tau), \quad (7-1)$$

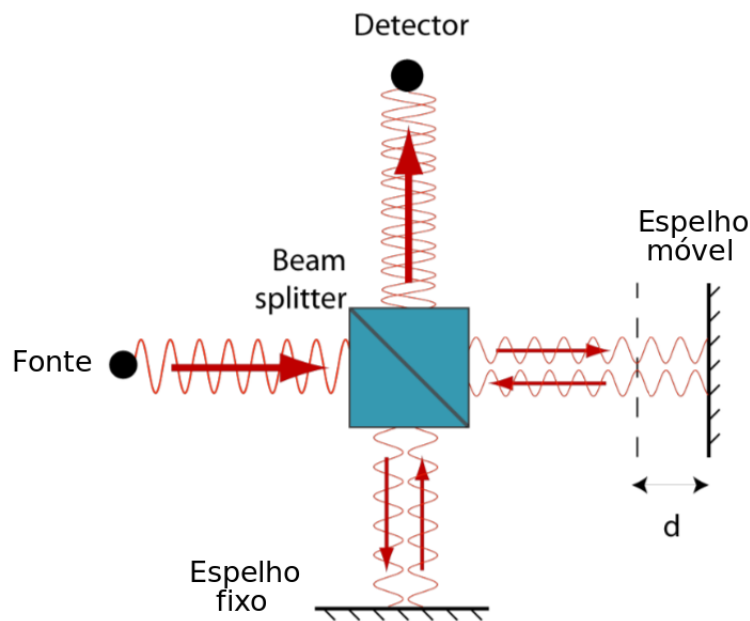


Figura 7.1: O espectrômetro por transformada de Fourier é baseado no interferômetro de Michelson com um espelho móvel. O sinal no detector vai ser uma composição de muitas frequências, em cada resulta da interferência de um comprimentos de onda diferente.

onde $E(t)$ e $E(t + \tau)$ são as componentes dos campos elétricos dos feixes para os caminhos ópticos do espelho fixo e do espelho móvel respectivamente, $\langle E(t) * E(t + \tau) \rangle$ é a função de autocorrelação entre eles e $\cos(2\pi\nu\tau)$ é o padrão de interferência causada pela diferença do caminho óptico entre os braços do interferômetro. O campo elétrico temporal pode ser escrito em função da amplitude do campo elétrico em frequência ($e(\nu)$) através da transformada de Fourier

$$E(t) = \int_0^{\infty} e(\nu)e^{2i\pi\nu t} dt$$

$$E(t + \tau) = \int_0^{\infty} e(\nu)e^{2i\pi\nu(t+\tau)} dt. \quad (7-2)$$

A função de correlação pode ser reescrita na forma de

$$\langle E(t) * E(t + \tau) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T}^{+T} e^*(\nu)e(\nu)d\tau \right\} e^{2i\pi\nu\tau} d\nu. \quad (7-3)$$

A função entre os colchetes é conhecida como a densidade espectral de energia de uma função temporal ($S(\nu)$) e ela descreve como a energia da função temporal será distribuída em frequência. Com isso, a função de correlação se reduz a

$$\langle E(t) * E(t + \tau) \rangle = \int_0^{\infty} S(\nu)e^{2i\pi\nu\tau} d\nu. \quad (7-4)$$

Essa equação representa a relação entre a função de correlação do feixe com a sua

densidade espectral de energia através da transformada de Fourier, ela é conhecida como o teorema de Winier-Khinchine. A intensidade do feixe também pode ser expressa em termo da densidade espectral, na forma de

$$I_0 = \int_0^{\infty} S(\nu) d\nu. \quad (7-5)$$

O padrão de interferência na intensidade do feixe em função do diferença do caminho óptico após passar pelo espectrômetro de Michelson, eq.7-1, se torna

$$I = 2 \int_0^{\infty} S(\nu) (1 + \cos(2\pi\nu\tau)) d\nu. \quad (7-6)$$

Essa equação mostra que é possível determinar a densidade espectral em energia de um feixe temporal através do seu padrão de interferência via a transformada de Fourier do seu interferôgrama. Essa técnica é conhecida como espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR). Na Fig. 7.2 está representada relação entre a densidade espectral em energia de um feixe com o seu perfil de interferôgrama medido com o espectrômetro de Michelson.

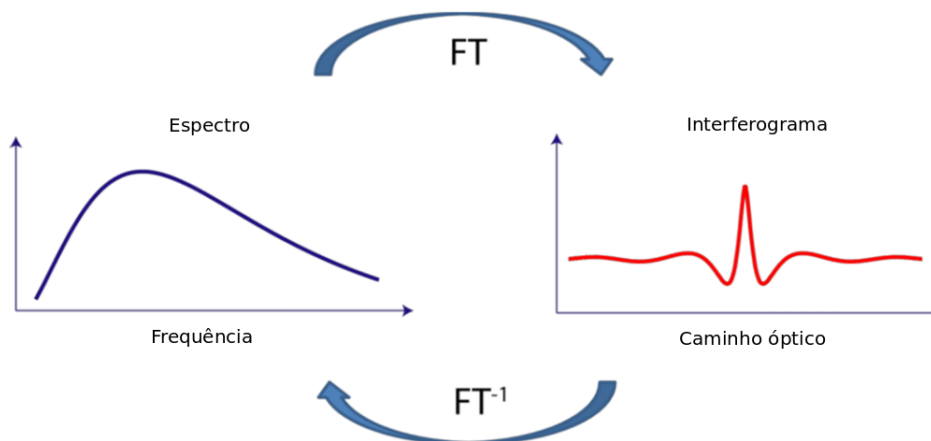


Figura 7.2: Representação da relação entre o interferograma e a densidade espectral de energia de um feixe através da transformada de Fourier.

A espectroscopia por transformada de Fourier tem duas importantes vantagens sobre a espectroscopia por grade de difração no infravermelho que faz dela o instrumento preferido em muitas aplicações, que são: fontes com baixa intensidade podem ser investigadas, ou seja, linhas fracas podem ser identificadas e a rapidez para medir o espectro, pois no FTIR o detector recebe todos os comprimentos de onda de uma única vez, enquanto que na espectroscopia por grade de difração, o detector recebe uma gama de comprimento de onda por vez.

8

Apêndice III - O método da matriz transferência

O problema da onda viajando através de um meio inhomogêneo nem sempre apresenta uma solução analítica, salvo alguns casos simples, sendo necessário o uso de algum método numérico para calcular essa evolução. Dentro os métodos numéricos, foi escolhido o método numérico da matriz transferência para determinar a evolução da onda. O método da matriz transferência (Ghatak, 1988) consiste em relacionar as amplitudes da onda incidente (A e B) com as amplitudes da onda de saída (A' e B') após a interação com um potencial através da matriz transferência (\mathbf{T}), na forma de

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix}, \quad (8-1)$$

conforme é observado na Fig. 8.1(a).

O método da matriz transferência pode ser aplicado para calcular a propagação de onda unidimensional em um meio dispersivo, como exemplo: ondas eletromagnéticas (Bellissard, 1989), ondas sonoras (Adler, 1989) e ondas de matéria (Jonsson, 1990) (Penello, 2013). Esse método tem a característica de ser simples, rápido e com boa precisão numérica.

Para construir a matriz transferência é necessário discretizar o potencial do meio numa grade formada por N camadas e em cada camada o potencial é considerado constante, conforme apresentado na Fig.8.1(b). Neste condição, a matriz transferência será construída considerando que a função de onda é formada por uma superposição de ondas planas que propagam tanto para à direita quanto para à esquerda. Assim, cada camada terá sua matriz transferência, \mathbf{T}_i , e a matriz transferência total será a multiplicação da matriz transferência de cada camada.

A matriz transferência de cada camada, \mathbf{T}_i , é formada por uma matriz de translação, \mathbf{P}_i , que faz a propagação da função de onda dentro da camada e a matriz da interface, \mathbf{I}_i , que relaciona as amplitudes das ondas entre a interface.

Para o caso de onda de matéria propagando na direção de crescimento de uma heteroestrutura semicondutora, a função de onda do elétron precisa satisfazer a equação de Schrödinger unidimensional de um elétron na aproximação massa efetiva dependente da posição

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z), \quad (8-2)$$

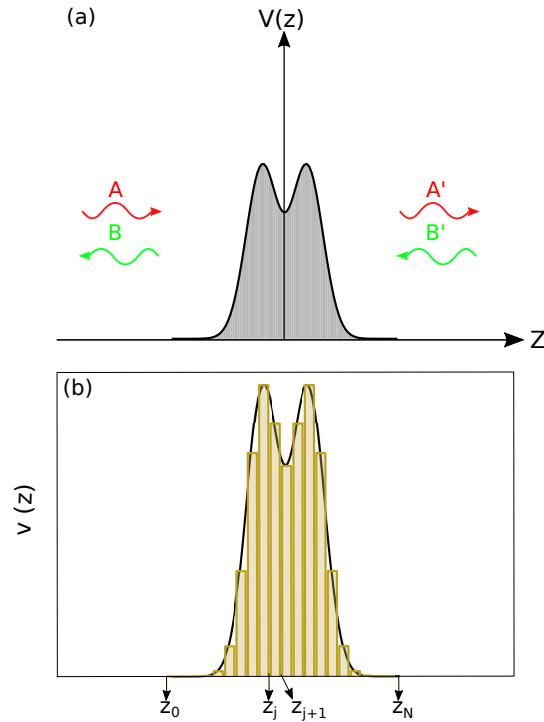


Figura 8.1: (a) Representação do problema de ondas propagando através de um meio inhomogêneo pelo método matriz transferência. Este método relaciona o amplitude do campo de entrada com a amplitude do campo de saída por meio da matriz transferência. (b) No método matriz transferência o potencial é discretizado numa grande de N camadas com espaçamento, a e potencial V constantes.

sendo \hbar a constante de Planck reduzida, $m^*(z)$ a massa efetiva do elétron dependente da posição, $V(z)$ o potencial do meio, E a energia do elétron e $\psi(z)$ a função envelope.

A solução da eq. 8-2 em cada camada é

$$\psi(z) = Ae^{ikz} + Be^{-ikz}, \tag{8-3}$$

sendo A e B as amplitudes da função de onda e k o vetor de onda. Dependendo da energia do elétron, o vetor de onda pode assumir dois valores

$$k = \begin{cases} \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(E - V)} & \text{se } E > V \\ -i\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(V - E)} & \text{se } E < V, \end{cases} \tag{8-4}$$

ou seja, a função envelope do elétron pode ter um comportamento oscilatório, se a sua energia for maior que a energia potencial ($E > V$), ou um comportamento do tipo decaimento ou crescimento exponencial, quando a sua energia é menor que energia potencial ($E < V$).

O próximo passo é aplicar as condições de contorno adequadas na interface dos dois semicondutores. Considerando que a massa efetiva é diferente para cada semiconductor da heteroestrutura, as condições de contorno de BenDaniel-Duke

(BenDaniel, 1966) diz que

$$\begin{aligned} \psi_1(z = a) &= \psi_2(z = a) \\ \frac{1}{m_1^*} \frac{d\psi_1(z)}{dz} \Big|_{z=a} &= \frac{1}{m_2^*} \frac{d\psi_2(z)}{dz} \Big|_{z=a}, \end{aligned} \quad (8-5)$$

onde $\psi_1(z)$, m_1^* , $\psi_2(z)$ e m_2^* representam a função onda e a massa efetiva de cada semiconductor, respectivamente. Ou seja, as funções de onda e suas derivadas precisam ser iguais na interface. Aplicando essas condições de contorno na eq. 8-3

$$\begin{aligned} Ae^{ik_1a} + Be^{-ik_1a} &= Ce^{ik_2a} + De^{-ik_2a} \\ \frac{ik_1a}{m_1^*} Ae^{ik_1a} - \frac{ik_1a}{m_1^*} Be^{-ik_1a} &= \frac{ik_2a}{m_2^*} Ce^{ik_2a} - \frac{ik_2a}{m_2^*} De^{-ik_2a}. \end{aligned} \quad (8-6)$$

Que pode ser reescrita na forma matricial, na forma de

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_1}{m_1^*} & -\frac{ik_1}{m_1^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_1a} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_2}{m_2^*} & -\frac{ik_2}{m_2^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_2a} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}. \quad (8-7)$$

Considerando que a interface ocorre em $z = a = 0$, a matriz interface entre os dois semicondutores (\mathbf{I}_1) é dada por

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_1a}{m_1^*} & -\frac{ik_1a}{m_1^*} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_2a}{m_2^*} & -\frac{ik_2a}{m_2^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (8-8)$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= \mathbf{I}_1 \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}. \\ \mathbf{I}_1 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_2m_1^*}{k_1m_2^*} & 1 - \frac{k_2m_1^*}{k_1m_2^*} \\ 1 - \frac{k_2m_1^*}{k_1m_2^*} & 1 + \frac{k_2m_1^*}{k_1m_2^*} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8-9)$$

Geralmente, a descontinuidade não acontece apenas no ponto $z = 0$, mas em pontos arbitrários. Neste caso, para continuar usando a matriz \mathbf{I}_1 é necessário fazer uma mudança de variável tal que a descontinuidade sempre seja em $z = 0$. Por exemplo, se a descontinuidade ocorre em $z = a$, a mudança de variável necessária para trazer essa descontinuidade até $z = 0$ é $z' = z - a$. Com isso, a matriz \mathbf{I}_1 pode ser aplicada no problema. Essa mudança de variável não pode alterar nenhuma informação do sistema, para isso a nova função de onda precisa ser igual a função de onda antiga, ou seja,

$$\psi(z') = \psi'(z = z' + a) \quad (8-10)$$

$$\begin{pmatrix} e^{ik_1z'} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1z'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_1(z'+a)} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1(z'+a)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (8-11)$$

ou seja,

$$\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (8-12)$$

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} e^{ik_1a} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1a} \end{pmatrix}, \quad (8-13)$$

sendo \mathbf{P} é a matriz de propagação, \mathbf{P} , que propaga a função de onda do ponto $z = 0$ até o ponto $z = a$.

Com isso, a matriz transferência da propagação da função de onda na camada 1 para a camada 2, com o espaçamento de a , é dada por

$$\mathbf{T}_1 = \mathbf{P}_{1,2}^a \cdot \mathbf{I}_1. \quad (8-14)$$

A grande vantagem do método consiste no tratamento de cada trecho por duas matrizes (2x2) que são separadas e independentes. Por fim, a matriz de transferência total será o produto entre a matriz transferência das N-1 camadas da heteroestrutura

$$\mathbf{T} = \prod_{j=1}^{N-1} \mathbf{T}_j = \mathbf{P}_{j,j+1}^a \cdot \mathbf{I}_j. \quad (8-15)$$

Com a matriz de transferência calculada, os coeficiente de transmissão e reflexão eletrônica podem ser obtidos com os valores assintótico da matriz

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{21} \\ t_{12} & t_{22} \end{pmatrix}. \quad (8-16)$$

O coeficiente de transmissão é dado por

$$t = \frac{k_i}{k_f} \frac{1}{|t_{11}|^2}. \quad (8-17)$$

O coeficiente de transmissão em função da energia do elétron é obtido apenas repetindo esse algoritmo para o intervalo de energia de interesse.

Em resumo, para aplicar esse método numérico o potencial precisa ser discretizado numa grade com N camadas com o espaçamento de a . A matriz transferência de cada camada é obtida multiplicando sequencialmente das matrizes de propagação e da descontinuidade, ou seja,

$$\mathbf{T} = \prod_{j=1}^{N-1} \mathbf{T}_j = \mathbf{P}_{j,j+1}^a \cdot \mathbf{I}_j. \quad (8-18)$$

$$P(a)_{j,j+1} = \begin{pmatrix} e^{ik_ja} & 0 \\ 0 & e^{-ik_ja} \end{pmatrix} \quad (8-19)$$

$$D_j = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_{j+1}m_j^*}{k_jm_{j+1}^*} & 1 - \frac{k_{j+1}m_j^*}{k_jm_{j+1}^*} \\ 1 - \frac{k_{j+1}m_j^*}{k_jm_{j+1}^*} & 1 + \frac{k_{j+1}m_j^*}{k_jm_{j+1}^*} \end{pmatrix} \quad (8-20)$$

$$k_j = \sqrt{\frac{2m_j^*(E)}{\hbar^2} (E - V_j)} \quad (8-21)$$

Apêndice IV - Solução numérica da equação de Schrödinger via método do *Split-Operator*

Nesta apêndice será apresentado, de forma detalhada, o método numérico usado no cálculo dos estados eletrônicos criados no *offset* na banda de condução da superrede estudada nesta tese. O método do *Split-Operator* é uma poderosa ferramenta para obter tanto os estados eletrônicos quanto sua evolução temporal através da solução da equação de Schrödinger dependente do tempo na aproximação massa efetiva (Degani, 2010). O método apresentado neste apêndice é uma generalização do *Split-Operator* apresentada na referência (Degani, 2010), pois aqui a massa efetiva do elétron será diferente para cada liga semicondutora da superrede. O apêndice foi dividido em duas seções; a evolução temporal da função de onda no domínio real e a evolução temporal da função de onda no domínio imaginário. Esse último caso é utilizado para calcular os autoestados.

9.1

Evolução temporal da função de onda no domínio real

A evolução temporal no domínio real de um estado quântico é regida pela equação de Schrödinger

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \psi(z, t) = \widehat{H} \psi(z, t), \quad (9-1)$$

sendo \hbar a constante reduzida de Planck, $\psi(z, t)$ o vetor de estado do sistema e \widehat{H} o operador Hamiltoniano. O Hamiltoniano de um elétron na aproximação massa efetiva dependente da posição (BenDaniel, 1966) é

$$\widehat{H} = \frac{1}{2} \widehat{P} \frac{1}{m^*(z)} \widehat{P} + V(\widehat{z}), \quad (9-2)$$

no qual \widehat{P} é o operador *momentum* linear mecânico e $V(\widehat{z})$ o operador energia potencial.

A solução formal da eq.9-1 é

$$\psi(z, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} \widehat{H} dt} \psi(z, t). \quad (9-3)$$

Como o Hamiltoniano não depende explicitamente do tempo, a evolução temporal da função de onda será dada por

$$\psi(z, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} (\widehat{P} \frac{1}{2m^*(z)} \widehat{P} + V(\widehat{z})) \Delta t} \psi(z, t), \quad (9-4)$$

Esta exponencial é o operador de evolução temporal que evolui a função de onda de t para $t + \Delta t$.

O método do *Split-Operator* consiste na "quebra" do operador evolução temporal numa multiplicação de exponenciais de cada operador do Hamiltoniano. Essa operação algébrica apenas é exata quando os operadores comutam entre si. Os operadores *momentum* linear e potencial não comutam entre si. Logo a fatorização do operador evolução temporal não é exata, mas uma aproximação. De forma geral, essa fatorização é calculada através da expansão de Zassenhaus (Casas, 2012),

$$e^{t(A+B)} = e^{tA} e^{tB} e^{-\frac{t^2}{2}[A,B]} e^{-\frac{t^3}{6}[A,[B,A]]} + \dots \quad (9-5)$$

Em primeira aproximação, será considerado apenas os termos lineares da expansão de forma que a eq. 9-4 se torna

$$\psi(z, t + \Delta t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{P} \frac{1}{2m^*(z)} \hat{P} \Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar} V(\hat{z}) \Delta t} \psi(z, \Delta t) + O(\Delta t^2). \quad (9-6)$$

O erro dessa aproximação é da ordem (Δt^2) . Este erro pode ser diminuído se o Hamiltoniano for dividido em mais partes. Por exemplo, se ele for dividido em 3 partes,

$$\psi(z, t + \Delta t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(\hat{z}) \Delta t}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{P} \frac{1}{2m^*(z)} \hat{P} \Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(\hat{z}) \Delta t}{2}} \psi(z, \Delta t) + O(\Delta t^3), \quad (9-7)$$

o erro será na ordem de (Δt^3) . Quanto mais dividido o Hamiltoniano for, melhor será a aproximação. Por outro lado, o custo computacional para fazer essa operação aumentará exponencialmente. Normalmente, o Hamiltoniano separado em três partes já o é suficiente para manter uma boa precisão do método e com um tempo de máquina razoável. Nota-se que as exponenciais ainda são hermitianas, garantido assim a conservação da corrente de probabilidade e uma boa estabilidade do método.

A evolução temporal de um estado quântico no tempo t até o tempo $t + \Delta t$ é obtida através da solução numérica da eq. 9-7. Para resolver-lá, o espaço e a função de onda precisarão ser discretizados numa grade de N pontos com o espaçamento entre eles, δ , uniforme.

A primeira exponencial da eq. 9-7 contém apenas o operador energia potencial e ela é diagonal no espaço das posições. A sua multiplicação pela função de onda é direta

$$\xi(z, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(z) \Delta t}{2}} \psi(z, \Delta t). \quad (9-8)$$

A próxima multiplicação exponencial envolve o operador *momentum* linear e a função de onda da multiplicação anterior

$$\eta(z, t + \Delta t) = e^{\frac{-i}{\hbar} \hat{P} \frac{1}{2m^*(z)} \hat{P} \Delta t} \xi(z, t + \Delta t). \quad (9-9)$$

Neste caso, essa multiplicação não é direta, pois o operador *momentum* linear não é diagonal no espaço das posições. Essa operação algébrica pode ser resolvida por duas abordagens diferentes; reescrever o operador *momentum* linear no espaço das posições ou então reescrever a função de onda, $\xi(z, t + \Delta t)$, no espaço dos *momenta* através da transformada de Fourier rápida (do inglês *FFT*).

9.1.1

Resolvendo a exponencial do operador *momentum* linear no espaço das posições

O operador *momentum* linear no espaço das posições é escrito como

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dz}.$$

O próximo passo é expandir a exponencial em série de Taylor em Δt

$$e^{\kappa \Delta t} = 1 + \kappa \Delta t + \frac{(\kappa \Delta t)^2}{2} + \frac{(\kappa \Delta t)^3}{3!} + \dots,$$

onde $\kappa = \frac{i\hbar}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz}$. Essa expansão pode ser reescrita na forma de

$$e^{\kappa \Delta t} = \left(1 + \frac{\kappa \Delta t}{2}\right) \left(1 + \frac{\kappa \Delta t}{2} + \frac{(\kappa \Delta t)^2}{4} + O(\Delta t^3)\right). \quad (9-10)$$

A expansão foi truncada até que o seu erro fosse da mesma ordem que o erro da eq. 9-7. O segundo termo pode ser escrito na forma de binômio de Newton

$$e^{\kappa \Delta t} = \left(1 + \frac{\kappa \Delta t}{2}\right) \left(1 - \frac{\kappa \Delta t}{2}\right)^{-1}. \quad (9-11)$$

Portanto, a multiplicação da exponencial do operador *momentum* linear se torna,

$$\begin{aligned} \eta(z, t + \Delta t) &= \left(1 + \frac{\kappa \Delta t}{2}\right) \left(1 - \frac{\kappa \Delta t}{2}\right)^{-1} \xi(z, t + \Delta t), \\ \left(1 - \frac{\kappa \Delta t}{2}\right) \eta(z, t + \Delta t) &= \left(1 + \frac{\kappa \Delta t}{2}\right) \xi(z, t + \Delta t), \end{aligned} \quad (9-12)$$

ou na forma de

$$\left(1 - \frac{i\hbar \Delta t}{4} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz}\right) \eta(z, t + \Delta t) = \left(1 + \frac{i\hbar \Delta t}{4} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz}\right) \xi(z, t + \Delta t). \quad (9-13)$$

Para resolver essa equação, é necessário calcular as derivadas em todos os pontos da grade. A parte à esquerda da equação será resolvida primeiro e a parte à direita posteriormente. A partir de agora será omitido a parte temporal das funções apenas para simplificar a notação.

$$\left(1 - \frac{i\hbar\Delta t}{4} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz}\right) \eta(z) = \eta(z) - \frac{i\hbar\Delta t}{4} \left[-\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} m^*(z) \frac{d}{dz} \eta(z) + \frac{1}{m^*(z)} \frac{d^2}{dz^2} \eta(z) \right]. \quad (9-14)$$

Considerando que a massa efetiva do elétron seja constante em cada semiconductor da heteroestrutura, a derivada na posição da massa efetiva do elétron na interface entre os dois semicondutores tende ao infinito. Esse ponto pode ser contornado, se ao invés de calcular a derivada na interface, é calculado o valor médio no ponto antes e depois da interface, na forma de

$$\left(1 - \frac{i\hbar\Delta t}{4} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz}\right) \eta(z) = \eta(z) - \frac{i\hbar\Delta t}{4} \left[\frac{\frac{1}{m^*(z+\delta z)} \frac{d\eta(z)}{dz} \Big|_{z=z+\delta z} - \frac{1}{m^*(z-\delta z)} \frac{d\eta(z)}{dz} \Big|_{z=z-\delta z}}{2\delta z} \right] \quad (9-15)$$

$$= \eta(z) - \frac{i\hbar\Delta t}{42\delta z} \left[\frac{1}{m^*(z+\delta z)} \frac{d\eta(z)}{dz} \Big|_{z=z+\delta z} - \frac{1}{m^*(z-\delta z)} \frac{d\eta(z)}{dz} \Big|_{z=z-\delta z} \right] \quad (9-16)$$

A derivada é calculada através do método dos elementos finitos centrado, na forma de

$$\frac{df}{dz} \Big|_z = \frac{f(z+\delta z) - f(z-\delta z)}{2\delta z} \quad (9-17)$$

assim temos

$$= \eta(z) - \frac{i\hbar\Delta t}{42\delta z} \frac{1}{m^*(z+\delta z)} \left[\frac{\eta(z+2\delta z) - \eta(z)}{2\delta z} \right] - \frac{i\hbar\Delta t}{42\delta z} \frac{1}{m^*(z-\delta z)} \left[\frac{\eta(z) - \eta(z-2\delta z)}{2\delta z} \right] \quad (9-18)$$

reorganizando essa equação

$$= \frac{i\hbar\Delta t}{4(2\delta z)^2} \frac{1}{m^*(z-\delta z)} \eta(z-2\delta z) + \left[1 + \frac{i\hbar\Delta t}{4(2\delta z)^2} \left(\frac{1}{m^*(z+\delta z)} + \frac{1}{m^*(z-\delta z)} \right) \right] \eta(z) - \frac{i\hbar\Delta t}{4(2\delta z)^2} \frac{1}{m^*(z-\delta z)} \eta(z+2\delta z) \quad (9-19)$$

Agora a equação é bem comportada em todos os pontos do sistema. O único problema é que o incremento δz não é uniforme em todas as funções. Para deixar o incremento uniforme, podemos fazer a seguinte manipulação matemática na massa efetiva

$$\frac{1}{m^*(z + \delta z)} = \frac{2}{m^*(z + 2\delta z) + m^*(z)} \quad (9-20)$$

$$\frac{1}{m^*(z - \delta z)} = \frac{2}{m^*(z - 2\delta z) + m^*(z)}$$

Portanto

$$\begin{aligned} &= \frac{i\hbar\Delta t}{4(2\delta z)^2} \frac{2}{m^*(z - 2\delta z) + m^*(z)} \eta(z - 2\delta z) + \\ + &\left[1 + \frac{i\hbar\Delta t}{4(2\delta z)^2} \left(\frac{2}{m^*(z + 2\delta z) + m^*(z)} + \frac{2}{m^*(z - 2\delta z) + m^*(z)} \right) \right] \eta(z) - \\ &\quad - \frac{i\hbar\Delta t}{4(2\delta z)^2} \frac{2}{m^*(z + 2\delta z) + m^*(z)} \eta(z + 2\delta z) \end{aligned} \quad (9-21)$$

Por fim, o lado esquerda da eq. 9-13 pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{i\hbar\Delta t}{4} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \eta(z, t + \Delta t) &= \sum_{j=1}^N -\beta m^- \eta_{j-1} + \\ &+ \left[1 + \beta (m^- + m^+) \right] \eta_j - \beta m^+ \eta_{j+1} \end{aligned} \quad (9-22)$$

sendo que,

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{i\hbar\Delta t}{4\delta z^2} \\ m^+ &= \frac{1}{m_{j+1} + m_j} \\ m^- &= \frac{1}{m_{j-1} + m_j}. \end{aligned} \quad (9-23)$$

Essa mesma metodologia pode ser aplicada no lado direita da eq. 9-13. Assim temos,

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{i\hbar\Delta t}{4} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \xi(z, t + \Delta t) &= \sum_{j=1}^N +\beta m^- \xi_{j-1} + \\ &+ \left[1 - \beta (m^- + m^+) \right] \xi_j + \beta m^+ \xi_{j+1}. \end{aligned} \quad (9-24)$$

Finalmente, a eq. 9-13 pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N -\beta m^- \eta_{j-1} + [1 + \beta (m^- + m^+)] \eta_j - \beta m^+ \eta_{j+1} = \\ & = \sum_{j=1}^N +\beta m^- \xi_{j-1} + [1 - \beta (m^- + m^+)] \xi_j + \beta m^+ \xi_{j+1}. \end{aligned} \quad (9-25)$$

Uma vez que a função $\xi(z)$ é conhecida em todos os pontos da grade, o lado direito da eq. 9-25 é um vetor coluna (Θ_j) de dimensão N e o lado esquerdo dela é uma matriz cujos os únicos elementos não-nulos estão nas diagonais: principal, superior e inferior. Esse tipo de matriz é conhecida como matriz tridiagonal. Antes de resolver essa matriz é preciso determinar qual condição de contorno será aplicada no problema. Neste trabalho, a condição de contorno escolhida foi a condição de contorno para sistemas finitos, ou seja, a função de onda precisa ser nula nas bordas do sistema, $\eta_0 = \eta_{n+1} = 0$. Nestas condições, a representação matricial da eq. 9-25 será

$$\begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \\ \vdots \\ \xi_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 + \beta(m^- + m^+) & -\beta m^+ & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -\beta m^- & 1 + \beta(m^- + m^+) & -\beta m^+ & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -\beta m^- & 1 + \beta(m^- + m^+) & -\beta m^+ & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\beta m^- & 1 + \beta(m^- + m^+) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Theta_1 \\ \Theta_2 \\ \Theta_3 \\ \vdots \\ \Theta_N \end{bmatrix},$$

onde

$$\Theta_j = \beta m^- \xi_{j-1} + [1 - \beta(m^- + m^+)] \xi_j + \beta m^+ \xi_{j+1} \quad (9-26)$$

assim, o problema foi transformado na solução de um sistema de equações tridiagonal fornecendo os valores da função de onda (ξ) em cada ponto da grade. Vale notar, se a massa efetiva for considerada constante em todo o sistema, essa matriz se reduz na matriz tridiagonal padrão do método *Split-Operator* (Degani, 2010).

9.1.2

Resolvendo a exponencial do operador *momentum* linear no espaço dos *momenta*

A segunda alternativa consiste em resolver a eq. 9-9 dentro do espaço dos *momenta* através do algoritmo da *Fast Fourier Transform* (FFT). Essa alternativa apenas é aplicável quando o perfil de potencial é simétrico. O operador *momentum* linear pode ser escrito no espaço dos *momenta* através da relação de De Broglie, $\hat{p} = \hbar\hat{k}$. Neste caso, o operador é diagonal no espaço dos *momenta* na forma de

$$\hat{p}|k\rangle = \hbar k|k\rangle. \quad (9-27)$$

O próximo passo é transformar a eq. 9-9 no espaço das posições para o espaço dos *momenta* através do cálculo da sua FFT

$$\xi(k, t + \Delta t) = FFT[\xi(z, t + \Delta t)]. \quad (9-28)$$

Com isso, tanto a função de onda ξ quanto a exponencial estão escritas mesmo espaço e a multiplicação entre elas é direta

$$\eta(k, t + \Delta t) = e^{i\frac{(\hbar k)^2}{2m}\Delta t}\xi(k, t + \Delta t). \quad (9-29)$$

O que resta agora é aplicar a transformada de Fourier inversa para voltar a função de onda para o espaço das posições

$$\xi(z, t + \Delta t) = FFT^{-1}[\xi(k, t + \Delta t)]. \quad (9-30)$$

Finalmente, a função de onda evoluída de t para $t + \Delta t$ é obtida multiplicando a exponencial da energia potencial,

$$\psi(z, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar}V(z)\Delta t}\xi(z, t + \Delta t). \quad (9-31)$$

Repetindo esse processo, Δt após Δt , a função de onda inicial $\psi(z, 0)$ será evoluída até um estado final $\psi(z, t)$. Este é o algoritmo do *Split-Operator*.

Na próxima seção será apresentado como os autoestados podem ser obtidos com o método *Split-Operator* através a evolução temporal no domínio do tempo imaginário.

9.2

Evolução temporal da função de onda no domínio imaginário

Os autoestados do hamiltoniano podem ser determinados utilizando o método *Split-Operator* com a evolução temporal no domínio imaginário ($t = -i\tau$). Neste domínio, a equação de Schrödinger, eq. 9-4, se torna uma equação tipo de difusão. O estado fundamental é obtido quando uma função de onda arbitrária é evoluída num intervalo de tempo suficientemente longo. Com isso, a função de onda arbitrária vai convergir para o autoestado fundamental quando este tempo for para o infinito. O operador evolução temporal no domínio imaginário, $e^{-\hat{H}\Delta t/\hbar}$, não é mais unitário e com isso é necessário renormalizar a função de onda em cada intervalo de tempo (Degani, 2010).

A prova que a evolução temporal no domínio imaginário de uma função de onda arbitrária conduz ela para o estado fundamental da superrede é feita na seguinte maneira. Uma vez que os autoestados de um hamiltoniano formam uma base ortonormal completa ($\{|\phi_n\rangle\}$), qualquer função de onda pode ser escrita como a combinação linear destes autoestados (Cohen-Tannoudji, 1973), na seguinte forma

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n e^{i\epsilon_n t/\hbar} |\phi_n\rangle, \quad (9-32)$$

no qual a_n é um coeficiente complexo e ϵ a autoenergia do autoestado.

Fazendo a mudança para o tempo imaginário

$$|\psi(\tau)\rangle = \sum_n a_n e^{-\epsilon_n \tau/\hbar} |\phi_n\rangle. \quad (9-33)$$

A evolução temporal da função de onda não é mais unitária, sendo necessário renormalizar a função de onda em cada intervalo de tempo,

$$|\psi(\tau)\rangle^{norm} = \frac{\sum_n a_n e^{-\epsilon_n \tau/\hbar} |\phi_n\rangle}{\sqrt{\sum_n |a_n|^2 e^{-2\epsilon_n \tau/\hbar}}}. \quad (9-34)$$

O estado fundamental, $|\phi_0\rangle$, pode ser separado da expansão da seguinte maneira

$$|\psi(\tau)\rangle^{norm} = \frac{|\phi_0\rangle + \sum_{n=1} a_n e^{-\epsilon_n \tau/\hbar} |\phi_n\rangle}{\sqrt{1 + \sum_{n=1} \left|\frac{a_n}{a_0}\right|^2 e^{-2(\epsilon_0 - \epsilon_n)\tau/\hbar}}}. \quad (9-35)$$

No limite de τ muito grande a exponencial tende a zero pois $\epsilon_0 > \epsilon_n$ e o estado fundamental é fortemente dominante em comparação aos outros termo. Portanto a função de onda converge para a autofunção do estado fundamental, ou seja,

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} |\psi(\tau)\rangle^{norm} = |\phi_0\rangle. \quad (9-36)$$

A partir do estado fundamental é possível obter os demais autoestado do Hamiltoniano, através do processo de ortonormalização de Gram-Schmidt

(Björck, 1994). Neste caso, o estado fundamental é conhecido $|\psi_0\rangle = |\phi_0\rangle$. O primeiro estado excitado pode ser escrito como

$$|\phi_1\rangle = \sum_n b_n e^{\epsilon_n t/\hbar} |\phi_n\rangle \quad (9-37)$$

A ortogonalização de Gram-Schmidt é escrita como

$$|\psi_1(\tau)\rangle = \frac{|\phi_1(\tau)\rangle - \langle\psi_0(\tau)|\phi_1(\tau)\rangle|\psi_0(\tau)\rangle}{\sqrt{\langle\phi_1(\tau)|\phi_1(\tau)\rangle - |\langle\psi_0(\tau)|\phi_1(\tau)\rangle|^2}} \quad (9-38)$$

onde

$$\langle\phi_1|\phi_1\rangle = \sum_n |b_n|^2 e^{-2\epsilon_n\tau/\hbar}$$

$$\langle\psi_0|\phi_1\rangle = b_0 e^{-\epsilon_0\tau/\hbar}$$

$$|\psi_1(\tau)\rangle = \frac{|\phi_1\rangle - \sum_{n>1} \frac{b_i}{b_1} e^{(\epsilon_1 - \epsilon_i)\tau/\hbar} |\phi_i\rangle}{\sqrt{1 + \sum_{i>1} \left|\frac{b_i}{b_1}\right|^2 e^{2(\epsilon_1 - \epsilon_i)\tau/\hbar}}}$$

Desde que $\epsilon_0 < \epsilon_1 < \epsilon_2 < \dots < \epsilon_n$ no limite de τ indo ao infinito

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} |\psi(\tau)\rangle^{norm} = |\phi_1\rangle. \quad (9-39)$$

desta forma, o primeiro estado excitado foi encontrado. Este procedimento pode ser aplicado para os demais estados excitados do Hamiltoniana.

10

Apêndice V - Solução numérica da equação de Poisson

Nesta apêndice serão apresentados os dois métodos numéricos utilizados no cálculo do potencial eletrostático gerado pelos dopantes na superrede com um defeito estrutural, que são: solução da equação de Poisson via elementos finitos (Tan, 1990) e o cálculo do potencial elétrico gerado por um plano infinito de cargas (Harrison, 2016).

10.1

A solução via elementos finitos

A equação de Poisson unidimensional na direção de crescimento da superrede é escrita como

$$\frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{d}{dz} V_e(z) = -e^2 \rho(z), \quad (10-1)$$

sendo $V_e(z)$ o potencial eletrostático gerado pelas impurezas, $\epsilon(z)$ a constante dielétrica na direção de crescimento e $\rho(z)$ a densidade de carga. A densidade de carga é dada por

$$\rho(z) = (n(z) - N_d^+ + N_a^-), \quad (10-2)$$

no qual $N_d^+ + N_a^-$ são as densidades das impurezas doadoras e aceitadoras ionizadas e $n(z)$ é a densidade eletrônica. A densidade eletrônica é

$$n(z) = \sum_i N_i |\psi_i(z)|^2, \quad (10-3)$$

onde N_i é o número total de portadores por seção transversal na i -ésima subbanda. Sendo ela escrita como

$$N_i = \frac{k_B T m^*}{\pi \hbar^2} \ln [1 + e^{(E_F - E_i)/k_B T}], \quad (10-4)$$

no qual E_i a energia da subbanda, T a temperatura a superrede, k_B a constante de Boltzmann, \hbar a constante de Planck reduzida, m^* a massa efetiva do elétron dentro do poço quântico e E_F a energia de Fermi.

Antes de aplicar a aproximação de elementos finitos na equação de Poisson é aconselhável reescrever ela na forma adimensional. Para isso, as grandezas físicas são escritas como

$$\begin{aligned}\bar{\epsilon}(z) &= \frac{\epsilon(z)}{\epsilon_0} \\ \bar{V}_e(z) &= \frac{V_e(z)}{R_y^*} \\ R_y^* &= \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{e^2}{2a_0^2} \\ \bar{z} &= \frac{z}{a_0},\end{aligned}\tag{10-5}$$

sendo R_y^* a constante de Rydberg reduzida. Com isso, a equação de Poisson, eq. 10-1, adimensional na forma de

$$\frac{d}{d\bar{z}}\bar{\epsilon}(z)\frac{d}{d\bar{z}}\bar{V}_e(z) = -8\pi\epsilon\bar{\rho}(z),\tag{10-6}$$

onde $\bar{\rho}(z)$ é a densidade de carga reduzida

$$\bar{\rho}(z) = a_0^3 \left[N \frac{|\bar{\psi}(z)|^2}{a_0} - N_d^+ \right].\tag{10-7}$$

A discontinuidade da permissibilidade na interface entre os dois semicondutores faz com que a sua derivada neste ponto não seja bem comportada para aplicar o método dos elementos finitos. Um jeito de contornar esse problema é expandir a derivada, do lado esquerdo da eq. 10-6, nos pontos antes e depois da interface, na forma de

$$\frac{\bar{\epsilon}(\bar{z} + \delta\bar{z}) \left. \frac{d\bar{V}_e}{d\bar{z}} \right|_{\bar{z}+\delta\bar{z}} - \bar{\epsilon}(\bar{z} - \delta\bar{z}) \left. \frac{d\bar{V}_e}{d\bar{z}} \right|_{\bar{z}-\delta\bar{z}}}{2\delta\bar{z}} = -8\pi\epsilon\bar{\rho}(z),\tag{10-8}$$

ou

$$\bar{\epsilon}(\bar{z} + \delta\bar{z}) \left. \frac{d\bar{V}_e}{d\bar{z}} \right|_{\bar{z}+\delta\bar{z}} - \bar{\epsilon}(\bar{z} - \delta\bar{z}) \left. \frac{d\bar{V}_e}{d\bar{z}} \right|_{\bar{z}-\delta\bar{z}} = -8\pi\epsilon(2\delta\bar{z})\bar{\rho}(z)\tag{10-9}$$

Agora a derivada do potencial é uma função bem comportada em todos os pontos da grade, logo é possível escrever a derivada primeira na forma de elementos finitos centrados,

$$\left. \frac{df}{dz} \right|_z = \frac{f(z + \delta z) - f(z - \delta z)}{2\delta z},\tag{10-10}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}\bar{\epsilon}(\bar{z} + \delta\bar{z}) \frac{[\bar{V}_e(\bar{z} + 2\delta\bar{z}) - \bar{V}_e(\bar{z})]}{2\delta\bar{z}} - \bar{\epsilon}(\bar{z} - \delta\bar{z}) \frac{[\bar{V}_e(\bar{z}) - \bar{V}_e(\bar{z} - 2\delta\bar{z})]}{2\delta\bar{z}} &= \\ &= -8\pi\epsilon(2\delta\bar{z})\bar{\rho}(z).\end{aligned}\tag{10-11}$$

Vale notar que nesta equação os intervalos entre cada ponto da grade, δz , da permissibilidade e do potencial eletrostático não são uniformes. Para deixar a equação com os intervalos uniformes, a permissibilidade pode ser escrita na forma de

$$\bar{\epsilon}(\bar{z} + \bar{\delta z}) = \frac{\bar{\epsilon}(\bar{z} + 2\bar{\delta z}) + \bar{\epsilon}(\bar{z})}{2}$$

$$\bar{\epsilon}(\bar{z} - \bar{\delta z}) = \frac{\bar{\epsilon}(\bar{z} - 2\bar{\delta z}) + \bar{\epsilon}(\bar{z})}{2}.$$

Com isso, a permissibilidade e o potencial eletrostático estão uniforme. Por fim, fazendo a mudança de variável $2\delta z \rightarrow \delta z$, a eq. 10-11 se torna

$$a\bar{V}_e(\bar{z} - \bar{\delta z}) - b\bar{V}_e(\bar{z}) + c\bar{V}_e(\bar{z} + \bar{\delta z}) = -16\pi\epsilon\bar{\delta z}^2\bar{\rho}(z) \quad (10-12)$$

sendo a , b e c os coeficientes reais, dado por

$$a = [\bar{\epsilon}(\bar{z} - \bar{\delta z}) + \bar{\epsilon}(\bar{z})]$$

$$b = [\bar{\epsilon}(\bar{z}) + \bar{\epsilon}(\bar{z} - \bar{\delta z}) + \bar{\epsilon}(\bar{z}) + \epsilon(\bar{z} + \bar{\delta z})] \quad (10-13)$$

$$c = [\bar{\epsilon}(\bar{z} + \bar{\delta z}) + \bar{\epsilon}(\bar{z})].$$

As condições de contorno para a equação de Poisson são

$$\begin{aligned} V_e(z)|_{z=0} &= V_0 \\ \left. \frac{dV_e(z)}{dz} \right|_{z=z_n} &= 0. \end{aligned} \quad (10-14)$$

Essas condições impõem que o potencial eletrostático seja igual a altura da barreira no ponto $z = 0$, condição de contorno de Dirichlet, e também exige que o campo elétrico no ponto $z = z_{max}$ seja nulo, condição de contorno de Neumann.

A eq. 10-12 juntamente com as condições de contorno, eq. 10-14, pode ser escrita na sua forma matricial

$$\begin{bmatrix} \bar{V}_{e1} \\ \bar{V}_{e2} \\ \vdots \\ \bar{V}_{en-1} \\ \bar{V}_{en} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ a & -b & c & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a & -b & c \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_n & -b_n \end{bmatrix} = -16\pi\epsilon\bar{\delta}z^2 \begin{bmatrix} \bar{\rho}_1 + V_0 \\ \bar{\rho}_2 \\ \vdots \\ \bar{\rho}_{n-1} \\ \frac{3}{2}\bar{\rho}_n \end{bmatrix}$$

sendo

$$\begin{aligned} b_1 &= [3\bar{\epsilon}(1) + \bar{\epsilon}(2)] \\ c_1 &= [\bar{\epsilon}(2) + \bar{\epsilon}(1)] \\ a_n &= [\bar{\epsilon}(n-1) + \bar{\epsilon}(n)] \\ b_n &= [3\bar{\epsilon}(n) + \bar{\epsilon}(n-1)] \end{aligned} \tag{10-15}$$

Finalmente, o problema da solução de uma equação diferencial de segunda ordem foi transformado na diagonalização de um sistema linear, cuja a matriz associada é tridiagonal.

10.2

Solução via potencial eletrostático gerado por um plano infinito carregado

O segundo método para o cálculo do potencial eletrostático gerado pelos dopantes na superrede consiste na aproximação desse problema ao cálculo do potencial eletrostático gerado por uma plano de cargas infinito. A superrede pode ser modelada como um empilhamento de diversos planos infinitos de dois semicondutores.

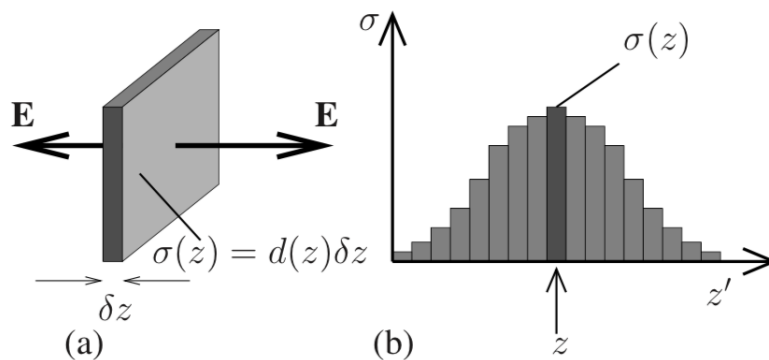


Figura 10.1: (a) Campo elétrico gerado por um único plano de cargas infinito com espessura de δz . (b) Densidade de carga planar devido a diversos planos infinito empilhados.

O campo elétrico gerado por um plano infinito com densidade de carga $\sigma(z)$, Fig. 10.1(a), e permissibilidade $\epsilon(z)$ é dado por

$$E(z) = \frac{\sigma(z)}{2\epsilon(z)}. \quad (10-16)$$

Isto é, o campo elétrico gerado por esse plano é constante em todas as direções a partir do plano. O campo elétrico total, devido aos diversos planos infinitos empilhados, Fig. 10.1(b), é dado como a somatória da contribuição de cada plano individualmente

$$E(z) = \sum_{z'=-\infty}^{+\infty} \frac{\sigma(z')}{2\epsilon(z')} \text{sign}(z - z'), \quad (10-17)$$

sendo a função $\text{sign}(z - z')$ definida como

$$\text{sign}(z - z') = \begin{cases} +1, & z \geq z' \\ -1, & z < z' \end{cases} \quad (10-18)$$

ela foi introduzida para definir a origem do campo elétrico. Por exemplo, se o plano de carga está localizado no ponto z' , o campo elétrico no ponto $z < z'$ é $E = -\sigma/2\epsilon$ e no ponto $z > z'$ é $E = +\sigma/2\epsilon$. Isto nada mais é a neutralidade de carga,

$$\sum_{z=-\infty}^{\infty} \sigma(z) = 0.$$

Em semicondutores dopados há duas contribuições possíveis para a densidade de carga $\sigma(z)$: a contribuição devido às impurezas ionizadas que depende das condições de crescimento da superrede e a contribuição devido aos próprios elétrons que depende da densidade de probabilidade dos elétrons na superrede. A densidade de cargas líquida pode ser escrita como

$$\sigma(z) = q [N_i \psi^*(z) \psi(z) - d(z)] \delta z, \quad (10-19)$$

$\psi(z)$ é a função de onda do elétron calculada com a equação de Schrödinger, $d(z)$ é a densidade volumétrica dos elétrons na posição z e N_i é o número de elétrons por seção transversal em cada subbanda, dada por

$$N_i = \frac{k_B T m^*}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + e^{(E_F - E_i)/k_B T} \right], \quad (10-20)$$

no qual E_i a energia da subbanda, T a temperatura da superrede, k_B a constante de Boltzmann, \hbar a constante de Planck reduzida, m^* a massa efetiva do elétron dentro do poço quântico e E_F a energia de Fermi.

Por fim, o potencial eletrostático gerado pelos planos infinitos carregados é calculado com

$$V_e(z) = - \int_{-\infty}^z E(z) \cdot dz. \quad (10-21)$$