

DIOGO DE MOURA PEDROSO

**APLICAÇÃO DE EQUAÇÕES DE TAXA EM MODELAGEM DE DISPOSITIVOS
FOTODETECTORES DE INFRAVERMELHO BASEADOS EM POÇOS
QUÂNTICOS**

DIOGO DE MOURA PEDROSO

APLICAÇÃO DE EQUAÇÕES DE TAXA EM MODELAGEM DE DISPOSITIVOS
FOTODETECTORES DE INFRAVERMELHO BASEADOS EM POÇOS QUÂNTICOS

Trabalho de graduação apresentado ao conselho de Curso de Graduação em Física da Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, como parte dos requisitos para obtenção do diploma de Graduação em Física Bacharelado.

Orientadora: Prof^a Dr^a. Olivia Maria Berengue
Co-orientador: Prof. Dr. Angelo Passaro

Guaratinguetá
2013

Pedroso, Diogo de Moura
Equações de taxa aplicadas na modelagem de dispositivos
P372e fotodetectores baseados em poços quânticos / Diogo de Moura Pedroso –
Guaratinguetá : [s.n], 2013.
66 f.: il.

Bibliografia: f. 63 - 65

Trabalho de Graduação em Bacharelado em Física – Universidade
Estadual Paulista, Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, 2013.

Orientadora: Profa. Dra. Olivia Maria Berengue

1. Poços quânticos 2. Semicondutores I. Título

CDU 530.145

DIOGO DE MOURA PEDROSO

ESTE TRABALHO DE GRADUAÇÃO FOI JULGADO ADEQUADO COMO PARTE
DO REQUISITO PARA A OBTENÇÃO DO DIPLOMA DE "GRADUADO EM
FÍSICA BACHARELADO"

APROVADO EM SUA FORMA FINAL PELO CONSELHO DE CURSO DE
GRADUAÇÃO EM FÍSICA.

Prof. Dr. Konstantin Georgiev Kostov
Coordenador

BANCA EXAMINADORA:


Prof. Dr. OLIVIA MARIA BERENGUE
Orientadora/UNESP-FEG.


Prof. Dr. ANGELO PASSARO
Co-Orientador/IEAv-DCTA


Prof. Dr. GUSTAVO SOARES VIEIRA
IEAv-DCTA

Novembro de 2013

DADOS CURRICULARES

Diogo de Moura Pedroso

NASCIMENTO 25.08.1988 – GUARATINGUETÁ / SP

FILIAÇÃO Edson Alves Pedroso

Vera Lúcia de Moura Pedroso

2003/2005 Curso técnico nível médio

Técnico em mecânica industrial – Colégio Técnico de Guaratinguetá

2007/2013 Curso de Graduação

Física Bacharelado - Universidade Estadual Paulista,

Campus de Guaratinguetá.

com todo o carinho, dedico a Dona Isaltina, que com simplicidade
sempre apoiou os caminhos de seu neto

AGRADECIMENTOS

Pelas oportunidades, agradeço a Deus.

Agradeço aos meus pais e irmão pelas horas de paciência, apoio e compreensão nas horas que não pude me dedicar à família.

À companheira que escolhi para os meus caminhos e aventuras, Nathália Velloso.

Ao Angelo Passaro, um excelente profissional, e hoje um grande amigo, sem o qual nenhum trabalho seria possível. À todos os companheiros do IEAv: Ademar, André, Cristian, Dárley, Marcela, Reviane, Carlos, Roberto, Rafael, Thiago, Juvenal, Nancy, Onofre. Em especial, ao Lucas, parceiro de uma viagem inesquecível.

À Olivia e Gustavo pelo excelente acompanhamento e dicas durante toda a elaboração do trabalho.

Aos meus amigos: José, Danilo, Fernando, Ian, Luis Henrique, em que mesmo estando longe, a amizade é incomparável e insubstituível.

Aos professores, Marcelo e Antônio, que marcaram positivamente a minha formação acadêmica.

Este trabalho foi financiado com recursos de bolsa de iniciação tecnológica do CNPq. (processo: 180248/2012-0 bolsa ITI-A).

“Encontre um caminho, ou abra um caminho”

Ingrid Vida

PEDROSO, D. M. **Aplicação de equações de taxa em modelagem de dispositivos fotodetectores de infravermelho baseados em poços quânticos.** 2013. 66 f. Trabalho de Graduação (Graduação em Física Bacharelado) – Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2013.

RESUMO

Neste trabalho apresenta-se um método de obtenção de parâmetros de tempo de captura, tempo de emissão térmica de portadores, probabilidade de captura e ganho de ruído em dispositivos fotodetectores de radiação baseados em poços quânticos. Tais dispositivos são construídos pela deposição intercalada de materiais semicondutores de diferentes energias de gap de modo a formar os poços quânticos. O método apresentado neste trabalho utiliza equações de taxa para descrição da ocupação dos estados discretos do poço quântico, que em conjunto com equações de ganho de ruído dadas em literatura são resolvidas autoconsistentemente. Os dados de entrada do método são medidas experimentais de corrente de escuro (corrente medida sem a incidência relevante de fótons no dispositivo) por tensão aplicada. Os valores encontrados foram comparados com resultados de literatura, e se mostraram coerentes fisicamente, validando a abordagem do método apresentado.

PALAVRAS-CHAVE: Poços quânticos. Dispositivos nanoestruturados. Dispositivos semicondutores. Cálculo autoconsistente.

PEDROSO, D. M. **Rate equations applied on modeling quantum well infrared photodetectors.** 2013. 66 f. Graduate Work (Graduate in Physics Bachelor's) - Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2013.

ABSTRACT

In this work, it is presented a novel method for calculating some intrinsic parameters such as capture mean time, thermic emission mean time, capture probability and noise gain on quantum well infrared photodetectors. Such devices are built by depositing layers of semiconductors of different energy gap, forming quantum wells. The present method uses rate equations to describe the occupation of discrete states of the quantum wells, that together with noise gain equations given in literature, are solved self consistently. The input data of the method is experimental measurement of dark current (current measured with no relevant incident photon) versus applied bias. In order to validate this approach, the values obtained were compared with results from literature.

KEYWORDS: Quantum well. Nanostructured devices. Semiconductor devices. Selfconsistent calculus.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	10
2	MATERIAIS SEMICONDUTORES	12
2.1	ESTRUTURAS CRISTALINAS	12
2.2	BANDAS DE ENERGIA	15
2.3	JUNÇÕES	18
3	DISPOSITIVOS FOTODETECTORES DE INFRAVERMELHO BASEADOS EM POÇOS QUÂNTICOS (QWIP)	21
3.1	DISPOSITIVOS DE DETECÇÃO DE INFRAVERMELHO	21
3.2	CARACTERÍSTICAS GERAIS DE UM DISPOSITIVO QWIP	23
3.3	APLICAÇÃO DE CAMPO ELÉTRICO E DEFORMAÇÃO DE BANDAS	25
3.4	CORRENTE DE ESCURO	26
3.5	FOTOCORRENTE	28
3.6	MECANISMO DE GANHO	29
4	METODOLOGIA	35
4.1	EQUAÇÕES DE TAXA	35
4.2	APLICAÇÃO DE EQUAÇÕES DE TAXA EM ESTRUTURAS IDEAIS DE POÇOS QUÂNTICOS	37
4.3	APLICAÇÃO DE EQUAÇÕES DE TAXA EM DISPOSITIVOS QWIPs	45
4.4	CÁLCULO AUTOCONSISTENTE	47
5	RESULTADOS	49
6	COMENTÁRIOS, CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	61
	REFERÊNCIAS	63
	ANEXO	66

1 INTRODUÇÃO

O surgimento de novas ligas semicondutoras e a melhoria nos processos de crescimento epitaxial de cristais permitiu o desenvolvimento de novos dispositivos nanoestruturados, poços, pontos e fios quânticos na construção de super-redes. Super-redes são estruturas com diversas junções de materiais com diferentes energias de *gap*. Tais estruturas possuem aplicações diversas: detectores de gás, detectores de infravermelho, células fotoelétricas, dentre outras (LEVINE, 1993). Recentemente uma aplicação de pontos quânticos na construção de telas de televisão foi anunciada na mídia (HAMANN, 2011).

O desenvolvimento de dispositivos detectores de infravermelho baseados em poços quânticos (QWIP – Quantum Well Infrared Photodetector) foi impulsionado após a consolidação do crescimento epitaxial de ligas semicondutoras das famílias III-V, como InP, GaAs, AlGaAs, dentre outras (ROGALSKY, 2011). Um QWIP é construído pela deposição intercalada de materiais com diferentes energias de *gap*, sendo que o material com maior *gap* age em geral como barreira de potencial para as cargas livres. Para o QWIP considerado neste trabalho, as dimensões do poço são precisamente determinadas para que haja somente dois estados ligados tal que o primeiro estado excitado esteja em ressonância com a energia do topo da barreira, de forma a garantir maior detectividade ao dispositivo (GUNAPALA; BANDARA, 1999). Além disso, o QWIP possui todos os períodos de poços e barreiras iguais, de forma que as propriedades de um poço se repetem ao longo de toda a estrutura, por exemplo, coeficientes de absorção, probabilidades de captura dentre outros. Um QWIP funciona com a excitação de elétrons da primeira subbanda para subbandas superiores por meio de absorção de fótons. Os elétrons excitados podem escapar da região do poço, tornando-se livres e sendo transportados ao longo da estrutura e direcionados em um dado sentido devido à presença de campo elétrico aplicado.

Para estes dispositivos, diversos modelos teóricos foram criados no estudo de fotocorrente, corrente de escuro, detectividade, dentre outros (LEVINE, 1993; ROGALSKY, 2011). Tais modelos necessitam de parâmetros intrínsecos nem sempre elementares de se obter empiricamente, exigindo medidas específicas com equipamentos nem sempre disponíveis (LEVINE, 1993; STEINKOGLER et al, 2003). Podemos citar como exemplo de parâmetro intrínseco (geralmente obtido empiricamente) a probabilidade de captura, que é a probabilidade de um elétron transportado ao longo de um dispositivo sofrer espalhamento e

relaxar para um estado confinado. Levine et al (1992) apresentam resultados experimentais para este parâmetro em três configurações de QWIP.

Neste trabalho, apresentamos um método autoconsistente utilizando-se de equações de taxa para obtenção da probabilidade de captura, do tempo médio de captura de um elétron pelo poço e o tempo médio de excitação térmica de um elétron do estado fundamental do poço. Este cálculo é realizado a partir de medidas experimentais de corrente de escuro por tensão aplicada.

A abordagem utilizando equações de taxa foi construída inspirada em trabalhos com lasers de cascata quântica, que também são construídos utilizando poços quânticos (INDJIN et al, 2002). Apesar de o presente trabalho ser realizado com poços quânticos simétricos e retangulares é possível aplicar o mesmo método para outras configurações de dispositivo.

Na primeira parte deste trabalho é realizada uma revisão da física de materiais semicondutores, seguida de uma apresentação dos conceitos básicos de dispositivos QWIP. A metodologia do cálculo autoconsistente é apresentada com argumentos construídos passo-a-passo. Primeiramente, aplicamos esses argumentos em estruturas artificiais ou não-realizáveis acrescentando considerações no cálculo, até que a aplicação em um dispositivo real possa ser viabilizada.

Para o método proposto nesse trabalho, consideramos que as medidas são realizadas a baixas tensões aplicadas, de tal forma que consideramos linear a deformação das bandas do dispositivo. O trabalho foi realizado dentro do contexto do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Dispositivos Semicondutores INCT-DISSE.

2 MATERIAIS SEMICONDUTORES

Neste capítulo busca-se efetuar uma breve revisão de conceitos básicos da física de semicondutores, ou prover a base teórica necessária à compreensão dos fenômenos físicos que fazem parte da produção dos sensores descritos neste trabalho. Longe de ser uma discussão completa, destina-se apenas a rever conceitos importantes para o correto entendimento do trabalho desenvolvido neste documento. A discussão deste capítulo se inicia com uma apresentação das estruturas cristalinas de materiais semicondutores e se encerra com uma breve discussão das diferenças entre metais, isolantes e semicondutores.

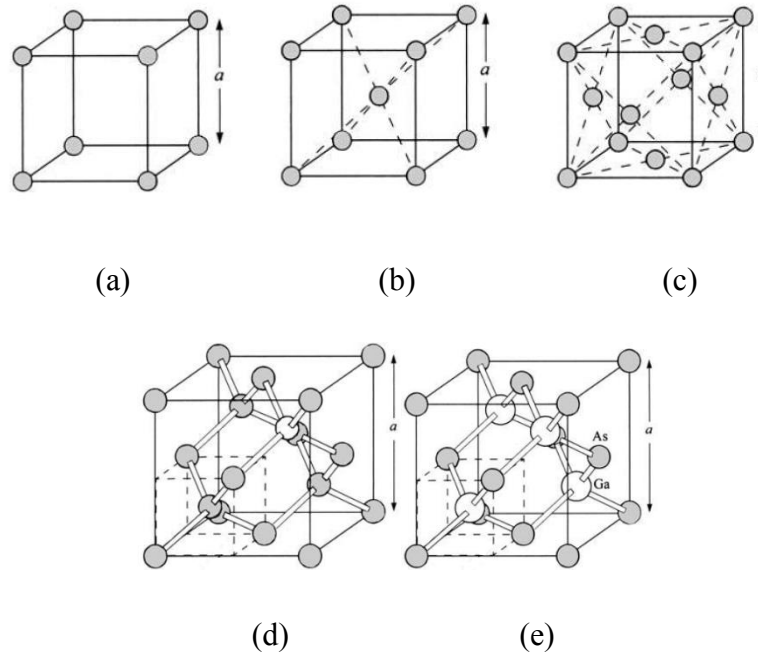
2.1. ESTRUTURAS CRISTALINAS

Materiais semicondutores podem ser amorfos ou cristalinos. Materiais amorfos são aqueles que não possuem uma estrutura atômica periódica, enquanto que os materiais cristalinos são definidos como materiais sólidos em que os arranjos moleculares se repetem de forma organizada e periódica. Cada unidade de repetição (período) é chamada de célula unitária (STREETMAN, 2006). A célula possui diversos arranjos possíveis dependendo da composição do cristal. A estrutura cristalina, no caso de semicondutores, é formada majoritariamente por átomos que se unem por meio de ligações metálicas (SZE; KWOK, 2007).

Para caracterizar uma célula cristalina utiliza-se um valor denominado parâmetro de rede, que é um comprimento característico da célula unitária. Na figura 1 o parâmetro de rede está indicado como “ a ” em cada estrutura (SZE; KWOK, 2007).

O parâmetro de rede é uma característica importante no projeto de uma estrutura envolvendo interface de diferentes materiais. No caso de deposição de materiais com diferentes parâmetros de rede, existe uma probabilidade muito alta de geração de defeitos devido ao tensionamento da estrutura (STREETMAN, 2006; UNUMA et al, 2003), gerando centros espalhadores de portadores de carga diminuindo a mobilidade do material.

Figura 1 – Estruturas cristalinas e exemplos de materiais que possuem tal estrutura: (a) Cúbica simples, Polônio; (b) Cúbica de corpo centrado, Sódio e Tungstênio; (c) Cúbica de faces centradas, Alumínio e Ouro; (d) Diamante, Silício, Germânio e Carbono; (e) “ZincBlend”, Arseneto de Gálio e Fosfeto de Gálio



Fonte: (SZE; KWOK, 2007).

Denomina-se defeito cristalino uma quebra na periodicidade do cristal, ou seja, uma célula diferente das demais, podendo ser intencional ou não, dependendo das propriedades desejadas. A inclusão de defeitos na estrutura gera estados na região de gap dos materiais (ver seção 2.2 – BANDAS DE ENERGIA). A presença de defeitos afeta ainda a mobilidade, que está relacionada à velocidade média dos elétrons por campo elétrico aplicado. A principal fonte de defeitos cristalinos indesejados é o próprio processo de crescimento do cristal. Atualmente o processo de crescimento de cristais com maior precisão e com menor densidade de defeitos existente é o MBE (Molecular Beam Epitaxy) (STREETMAN, 2006) no qual a deposição dos átomos é feita por feixe de átomos em uma câmara de ultra-alto-vácuo. Neste processo o controle das camadas é possível de ser realizado com resolução atômica.

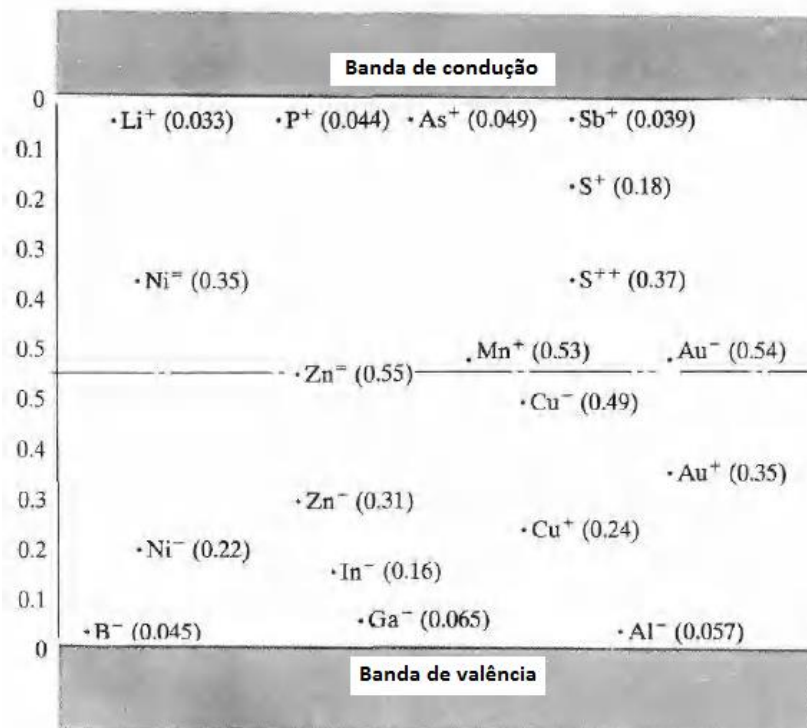
No caso de defeitos cristalinos intencionais temos a dopagem de materiais intrínsecos, ou seja, a adição de impurezas desejadas controladamente. Materiais intrínsecos possuem condutividade baixa. Para melhorar tal propriedade são adicionados elementos para dopagem. Tais elementos aumentam a quantidade de portadores livres no material, sendo que o material resultante será do tipo N (P) quando houver excesso de elétrons (lacunas). Materiais com

dopagem tipo N são dopados com impurezas doadoras de elétrons, enquanto que do tipo P são dopados com impurezas aceitadoras de elétrons.

No caso de um material intrínseco, a energia de Fermi estará aproximadamente na metade da energia de *gap*. No caso de materiais dopados a energia de Fermi é deslocada, conforme o tipo de material (N ou P) e a quantidade de portadores inseridos.

No diagrama da figura 2 são apresentadas as energias de estados localizados gerados na região de *gap* quando silício é dopado com alguns materiais indicados.

Figura 2 – Diagrama as energias de estados localizados inseridos por algumas impurezas na dopagem de silício. O sinal positivo é para materiais do tipo N, e negativo para materiais dopados do tipo P.



Fonte: (STREETMAN, 2006).

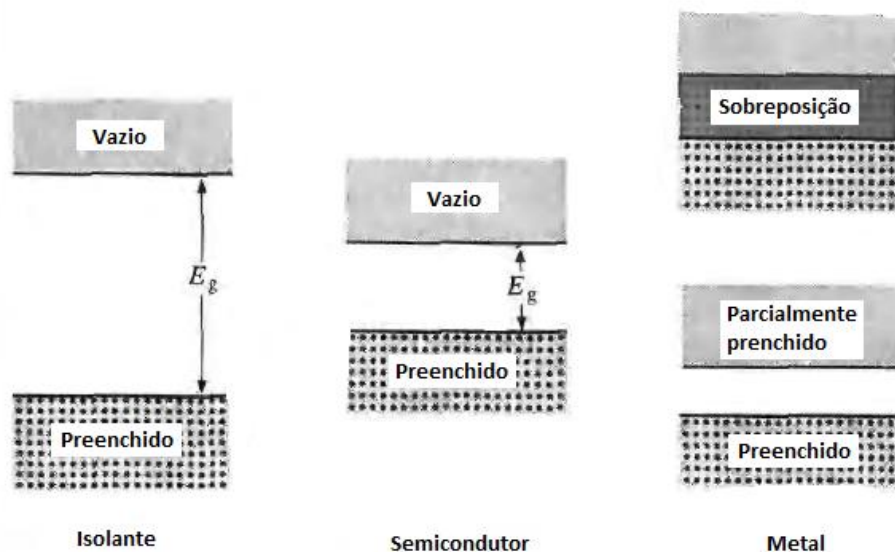
Quando um semicondutor é fortemente dopado tal que a energia de Fermi está no interior da banda de condução, este semicondutor terá propriedades de condução de um metal condutor. Mesmo à temperatura de zero Kelvin haverá portadores na banda de condução. Um semicondutor com estas características é chamado de degenerado (STREETMAN, 2006; THIBAudeau, 1996).

2.2. BANDAS DE ENERGIA

Quando consideramos os átomos isoladamente, a resolução da equação de Schroedinger fornece estados discretos possíveis de serem ocupados pelos elétrons do sistema. Quando átomos são aproximados formando os cristais regulares haverá sobreposição das funções de onda gerando uma replicação dos estados possíveis formando bandas de energia permitidas e banda de energia proibida (*gap*) (STREETMAN, 2006). O espectro de energia é dividido em banda de condução, valência e a banda proibida ou *gap*.

A diferença na ocupação das bandas de energia e no perfil energético das bandas de cada material nos fornece uma boa definição quanto a diferença entre metais, isolantes e semicondutores. Na figura 3 são mostrados os diagramas dos perfis energéticos de um isolante, metal e um semicondutor (STREETMAN, 2006).

Figura 3 – Perfis de bandas de um isolante, um semicondutor (não degenerado) e um metal.



Fonte: (STREETMAN, 2006).

Metais são capazes de conduzir corrente elétrica em qualquer temperatura. Em geral, diminuindo sua temperatura a mobilidade irá aumentar devido a diminuição da agitação térmica do cristal e conseqüente espalhamento dos portadores. No caso dos metais a energia de Fermi está acima do *gap*, no interior da banda de condução, ou seja, mesmo a uma temperatura hipotética de zero Kelvin existem portadores disponíveis para condução. Mesmo que exista uma região de banda proibida, a energia de *gap* deixa de ter importância em termos

das propriedades de condutividade do metal, sendo que em muitos casos existe sobreposição das bandas de valência e condução (STREETMAN, 2006; SZE; KWOK, 2007).

Isolantes são materiais que possuem uma energia de *gap* relativamente grande, tal que os elétrons são excitados para a banda de condução somente a uma temperatura muito alta, nesse caso a agitação térmica é significativa aumentando a resistividade do material (STREETMAN, 2006; SZE; KWOK, 2007).

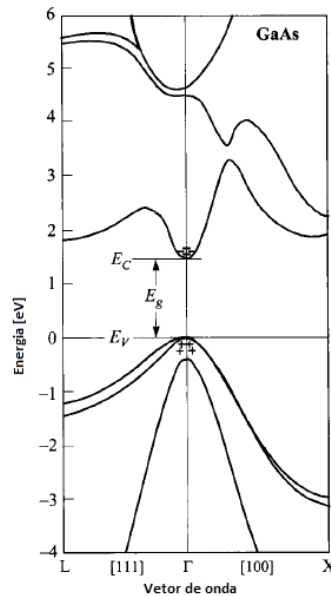
Semicondutores possuem condições intermediárias. A energia de *gap* é menor que de um isolante, mas não nula. A energia de Fermi está geralmente no interior da banda proibida (exceção para semicondutores degenerados) tal que para materiais de *gap* pequeno ou altamente dopados a uma temperatura pouco acima do zero, o material já disponha de portadores para a condução elétrica (STREETMAN, 2006; SZE; KWOK, 2007).

Dependendo dos átomos ou ligas constituintes do cristal semicondutor, os portadores podem ser elétrons (negativo) ou lacunas (positivo), sendo que a corrente é formada por esses portadores. A lacuna é a falta de um elétron (na banda de valência) que gera uma carga líquida positiva. A corrente é gerada por elétrons (lacunas) transportados pela banda de condução (valência). Os semicondutores serão do tipo N (P) quando há excesso de portadores negativos (positivos).

A ocupação das bandas é fortemente influenciada pela temperatura em que o material se encontra. Para um semicondutor intrínseco (mesma quantidade de elétrons e lacunas) a uma temperatura (hipotética) de zero Kelvin, todos os estados da banda de valência estão ocupados e todos os estados da banda de condução estarão vazios (SZE; KWOK, 2007).

No caso de um material real, a presença de defeitos, desejados ou não, pode inserir estados na região de *gap*. Para a representação gráfica das energias das bandas é utilizado o espaço dos momentos (no eixo das abscissas) (SZE; KOWK, 2007). No gráfico abaixo está mostrado o diagrama de energias do GaAs.

Figura 4 – Diagrama representando as bandas de energia da liga de GaAs (Arseneto de Gálio).



Fonte: (SZE; KOWK, 2007).

No diagrama da figura 4 as abscissas representam o vetor de onda. No ponto Γ temos o ponto de maior energia da banda de valência e a menor energia da banda de condução, a diferença entre essas energias é chamada de energia de *gap*. Quando esses dois pontos ocorrem para um mesmo valor de k (vetor de onda) o material será chamado de *gap* direto, em outro caso será chamado de *gap* indireto. No caso de um material de *gap* indireto, a excitação de um elétron da banda de valência para a condução, por um fóton de energia maior ou igual ao *gap*, deve ser obtida juntamente com uma alteração do momento do elétron, o que implica na presença de outro mecanismo de espalhamento, como um fônon (STREETMAN, 2006).

Podemos notar ainda na figura 4 que nos pontos próximos ao mínimo da banda Γ o formato da banda é aproximadamente parabólico. Esta forma permite a aproximação parabólica no cálculo da massa efetiva do elétron. A massa efetiva foi um conceito introduzido para o estudo simplificado de elétrons na rede cristalina substituindo o efeito dos potenciais da rede por uma partícula utópica com determinada massa efetiva. Esse conceito é válido tanto para elétrons como lacunas. O cálculo da massa efetiva é dado por:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}} \quad (1)$$

Fatores externos como temperatura e pressão podem alterar a estrutura de bandas do material, sendo que o efeito depende do material considerado. Para Si e GaAs a energia de gap diminui com a temperatura, e para a liga de PbS a energia de gap aumenta (SZE, KWOK, 2007).

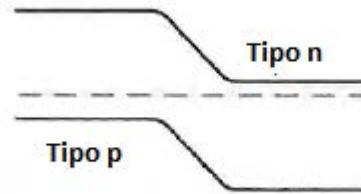
O efeito da transição de um elétron da banda de condução para a banda de valência é chamado de recombinação de par elétron-lacuna. A energia perdida pelo elétron nesta transição pode se transformar em fóton (luminescência) e/ou fônons. O efeito combinado de geração de fônons e fótons é a termoluminescência. A probabilidade de recombinação espontânea é maior no caso de semicondutores de gap direto. Para semicondutores de gap indireto a recombinação envolve algum espalhamento do elétron devido à mudança de momento do elétron necessária para a transição.

A presença de defeitos na estrutura cristalina pode inserir estados possíveis de ocupação no interior da banda proibida. Esta característica pode ser desejada em alguns dispositivos. A adição de impurezas também pode gerar tais estados intermediários (STREETMAN, 2006)

2.3. JUNÇÕES ENTRE SEMICONDUTORES

A fabricação de dispositivos envolve a junção de um material semicondutor com outro semicondutor, um metal ou um isolante. A junção entre semicondutores mais simples possível é a junção de um material dopado tipo N com um mesmo material dopado P, esta configuração é utilizada em diodos e é chamada de homojunção (figura 5). Tratando-se de materiais com diferentes energias de *gap* é chamada de heterojunção.

Figura 5 – Diagrama de bandas representando uma junção de materiais semicondutores com dopagem do tipo n (direita) e tipo p (esquerda).

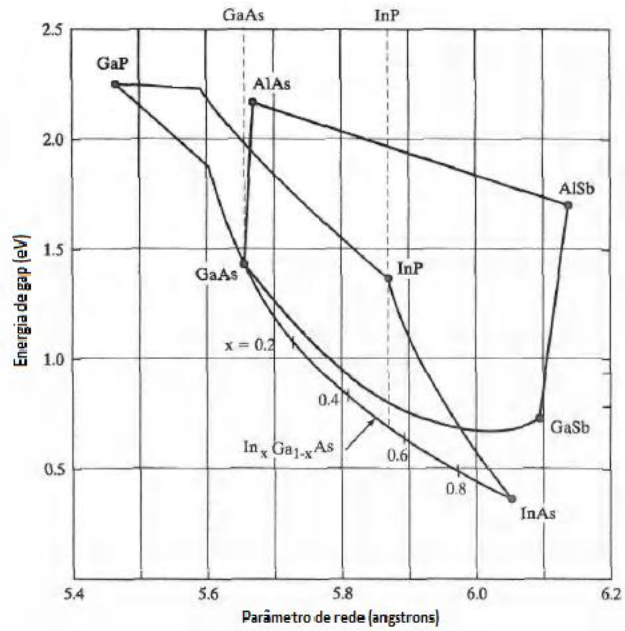


Fonte: (STREETMAN, 2006).

Em uma junção, não importando entre quais materiais, haverá um período transiente em que cargas são difundidas de um lado a outro da junção até que o estado de equilíbrio seja atingido, ou seja, mesma energia de Fermi não havendo mais gradiente entre um material e outro (STREETMAN, 2006) Neste processo de difusão de cargas, são geradas regiões chamadas de regiões de depleção, que são regiões de baixa concentração de cargas livres em torno da interface entre as porções de semicondutores com dopantes distintos.

Quando os materiais da junção são semicondutores diferentes (heterojunção) o parâmetro de rede das estruturas cristalinas deve ser considerado. Na figura 6 são mostrados os parâmetros de rede e energia de *gap* para algumas ligas semicondutoras de utilização mais comum. As linhas correspondem às possíveis concentrações de cada elemento na liga.

Figura 6 – Diagrama apresentando o parâmetro de rede e a energia de *gap* para ligas semicondutoras. As linhas representam as diferentes concentrações possíveis de cada componente na liga.



Fonte: (STREETMAN, 2006).

3 DISPOSITIVOS FOTODETECTORES DE INFRAVERMELHO BASEADOS EM POÇOS QUÂNTICOS (QWIP)

3.1. DISPOSITIVOS DE DETECÇÃO DE INFRAVERMELHO

Diferentes tipos de elementos sensores são utilizados para detecção de infravermelho considerando diferentes aplicações, e características desejadas. Existem duas classes de detectores de infravermelho (ROGALSKY, 2011): termodetectores e fotodetectores. Essa classificação está relacionada ao método de detecção, no primeiro caso os fótons são absorvidos alterando a temperatura do elemento sensor; essa mudança de temperatura altera alguma propriedade elétrica do material (resistividade, por exemplo). No caso dos fotodetectores, trata-se de absorção de fótons e sua interação com os elétrons; o sinal detectado no elemento sensor será devido à mudança na distribuição eletrônica de energia (ROGALSKY, 2011).

Termodetectores não possuem dependência com o espectro da radiação detectada para uma ampla faixa de comprimentos de onda. A polarização dos fótons incidentes também não influencia o seu funcionamento, essa característica faz com que a resposta espectral relativa do sensor seja aproximadamente constante ao longo de uma ampla faixa do espectro de radiação (ROGALSKY, 2011). O tempo de resposta do elemento sensor é relativamente alto (quando comparado a fotodetectores) tal que para aplicações que envolvem mudança rápida no cenário tais sensores não são indicados. Termodetectores podem ser operados à temperatura ambiente tornando a sua operação mais simples, principalmente em aplicações de campo (inspeções em indústrias, por exemplo) (SKATRUD, 1997).

Fotodetectores atuam na detecção de uma faixa bem determinada de comprimentos de onda, tendo um baixo tempo de resposta. O processo de detecção está relacionado à interação de fótons absorvidos com elétrons do sensor, gerando uma redistribuição da energia dos elétrons no sistema (ROGALSKY, 2011; DONATI, 1999). Para estes detectores a temperatura de operação é um fator crítico, já que a excitação de elétrons por espalhamentos com fônons da estrutura também pode gerar uma redistribuição de energia dos elétrons sendo, portanto, a temperatura uma importante fonte de ruído, o que faz com que a resolução do seja menor. A resposta dos fotodetectores é dependente do espectro detectado, ou seja, existe seletividade no comprimento de onda, e a polarização do fóton incidente deve ser considerada, já que pode alterar a interação do fóton com o elétron.

A faixa de comprimentos de onda absorvidos pelo fotodetector depende da natureza construtiva do dispositivo: concentração dos materiais das ligas envolvidas, larguras das camadas, energias de *gap*, dentre outras. Os tipos mais importantes de fotodetector, conforme apresentado em (DONATI, 1999), são: intrínsecos, extrínsecos, fotoemissivos (barreiras Schottky) e detectores intrabanda (pontos, poços e fios quânticos).

O processo de detecção em dispositivos intrínsecos e extrínsecos ocorre com a absorção de fótons e consequente geração de um par elétron-lacuna, em outras palavras, um elétron é excitado da banda de valência para a banda de condução. Estes dispositivos também são chamados de detectores de transição entrebandas (ROGALSKY, 2011; DONATI, 1999). Os detectores intrínsecos são aqueles em que o material (geralmente uma liga semicondutora) utilizado não possui impurezas desejadas, enquanto que os extrínsecos são constituídos de materiais dopados. O maior comprimento de onda detectado por este dispositivo é determinado pela energia de *gap* do material (denominado comprimento de onda de corte), já que a menor energia de fóton absorvida corresponde ao *gap* do material. Detectores de Ge, Si e ligas HgCdTe são materiais mais comumente utilizados para fabricação deste tipo de detector (ROGALSKY, 2011). Nos detectores de HgCdTe (Telureto de Mercúrio e Cádmiio), a energia de *gap* é determinada pela concentração das ligas binárias HgTe e CdTe, quanto maior a concentração de HgTe maior o *gap* do material (ROGALSKY, 2011).

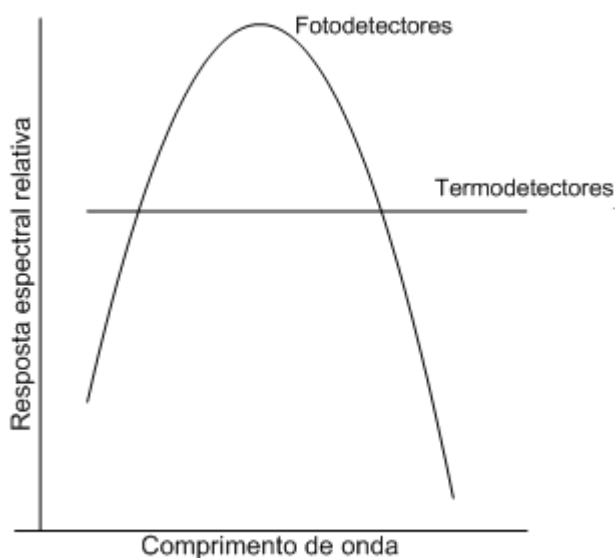
Os dispositivos de detecção intrabanda são aqueles em que a excitação dos elétrons (ou lacunas) ocorre em estados discretos no interior da banda de condução (ou valência). Com o desenvolvimento de ligas semicondutoras, foram criados novos dispositivos baseados na construção de super-redes de diferentes ligas semicondutoras de forma a criar confinamento de estados eletrônicos. O aperfeiçoamento de novas técnicas de crescimento (fabricação) de materiais semicondutores permitiu o desenvolvimento de dispositivos nanoestruturados. As técnicas aperfeiçoadas permitiram o crescimento de cristais com menores quantidades de defeitos indesejados tornando a estrutura mais coerente com as previsões teóricas (mais próximas de estruturas ideais). Os principais tipos de dispositivos de detecção intrabanda são: poços quânticos (confinamento unidimensional), fios quânticos (confinamento bidimensional) e pontos quânticos (confinamento tridimensional). Podem existir dispositivos com dois ou três desses elementos acoplados (ROGALSKY, 2011).

Uma das principais diferenças dos dispositivos intrabanda está na resposta espectral em uma faixa estreita de comprimentos de onda, diferentemente dos detectores termais. Esta

característica está vinculada a seletividade na absorção de fótons de energia correspondentes à diferença de energia entre os estados projetados, confinados na banda de condução (ou valência). A probabilidade de transição entre tais estados é representada por uma grandeza denominada Força de Oscilador (apresentada no item 3.2). Por outro lado, os dispositivos de detecção intrabanda operam a temperaturas criogênicas, pois a excitação térmica dos elétrons confinados pode ser significativa, sendo esse o principal mecanismo gerador da corrente de escuro que é um componente da corrente de ruído.

Na figura 7 estão representadas as respostas espectrais relativas dos fotodetectores e dos detectores termais.

Figura 7 – Resposta espectral relativa para fotodetectores e termodetectores.



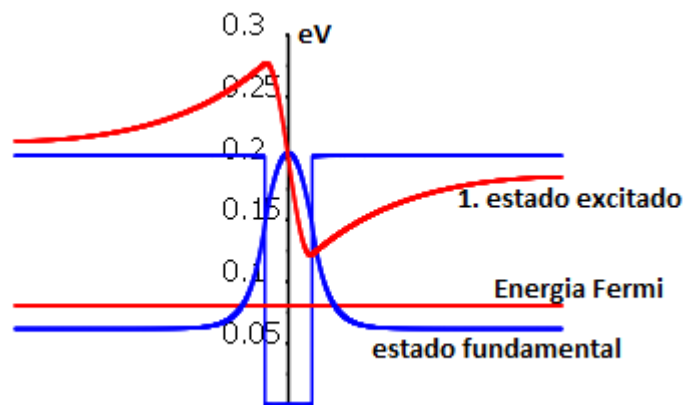
Fonte: (ROGALSKY, 2011).

3.2. CARACTERÍSTICAS GERAIS DE UM DISPOSITIVO QWIP

Os QWIPs (Quantum Well Infrared Photodetector – Fotodetector de infravermelho baseado em poços quânticos) são construídos a partir da deposição intercalada de ligas semicondutoras com diferentes energias de *gap*. Os materiais de maior energia de *gap* formam as barreiras, e os de menor *gap*, o poço. A estrutura mais comum de um QWIP é dada por um poço de potencial retangular com barreiras simétricas contendo somente dois estados confinados (LEVINE, 1993). As dimensões do poço são calculadas de forma que o segundo estado possua energia ressonante com o topo da barreira, de acordo com o apresentado na

figura 7. Esta configuração dos estados é considerada a mais eficiente devido a alta probabilidade de escape dos elétrons excitados do estado fundamental ao primeiro estado excitado, apresentando a maior detectividade, no caso de dispositivos. Para dispositivos com o primeiro estado excitado acima do nível da barreira existe o probabilidade do aumento da corrente de escuro, já que a excitação do elétron do estado fundamental, já o torna um elétron livre (GUNAPALA, 1999).

Figura 8 – poço quântico simples em que o primeiro estado excitado é ressonante com a barreira. Nesta figura está representada somente a banda de condução.



Fonte: software QWS (TANAKA et al, 2013).

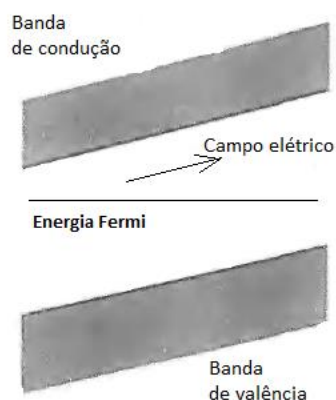
O processo de detecção ocorre com a absorção de um fóton com energia correspondente a diferença entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, que interage com um elétron na primeira subbanda excitando-o à segunda. Com aplicação de tensão no dispositivo, a barreira efetiva sobre o elétron excitado será diminuída, aumentando a probabilidade de escape deste elétron excitado. Os elétrons livres acima do nível da barreira compõem a fotocorrente gerada pela absorção de fótons (LEVINE, 1993).

Os QWIPs considerados neste trabalho são os mais comumente utilizados: poços quadrados, dopados do tipo-n. A temperatura é considerada alta o suficiente para que o material esteja com todas as impurezas ionizadas, e dopagem é alta o suficiente para que energia de Fermi esteja acima do estado fundamental do poço no interior da banda de condução do material do poço. Alguns autores tratam o dispositivo como um semiconductor degenerado comportando-se como um metal que possui regiões geradoras de portadores (THIBAUDEAU, 1996).

3.3. APLICAÇÃO DE CAMPO ELÉTRICO E DEFORMAÇÃO DAS BANDAS

Com a aplicação de campo elétrico no dispositivo, o perfil das bandas de condução e valência é “deformado” de acordo com o a intensidade e direção do campo aplicado. Para a maioria dos materiais em forma bulk a deformação será linear ao longo de todo o perfil da estrutura, conforme demonstrado na figura 9 (STREETMAN, 2006).

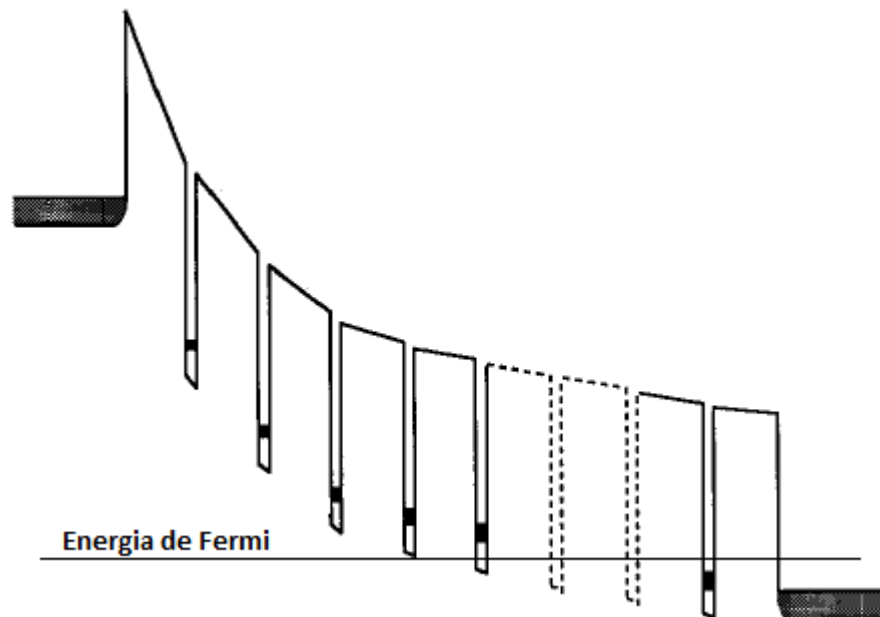
Figura 9 – Perfil das bandas de condução e valência em um material bulk quando existe um campo elétrico aplicado.



Fonte: (STREETMAN, 2006).

Considerando um dispositivo QWIP as junções (interfaces) entre os diferentes materiais devem ser consideradas devido à formação de domínios, ou regiões de depleção, nas bandas de condução e de valência com a aplicação de campo elétrico (THIBAudeau, 1996). Devido a formação de uma região de depleção a deformação das bandas é não-linear. Essa região de depleção é causada pela distribuição não uniforme dos portadores na estrutura e consequente distribuição não uniforme do campo elétrico ao longo da direção de crescimento dos QWIPs. O perfil da banda de condução de um dispositivo QWIP após a aplicação de campo elétrico é apresentado na figura 10 (THIBAudeau, 1996):

Figura 10 – Perfil das bandas de condução dos materiais de um dispositivo QWIP após a aplicação de campo elétrico.



Fonte: (THIBAUDEAU, 1996).

A deformação é tão mais “acentuada” quanto maior o campo elétrico aplicado. Para casos de campos de baixa intensidade é possível considerar uma aproximação de campo constante (deformação linear).

3.4. CORRENTE DE ESCURO

Corrente de escuro é a corrente medida em um elemento sensor mesmo quando não existem fótons incidentes no dispositivo. Esta corrente é um dos principais contribuintes na formação do ruído em um dispositivo QWIP, limitando a temperatura de operação.

Levine (1993) propõe a contribuição de três efeitos geradores da corrente de escuro para QWIPs: a emissão termiônica, o tunelamento ressonante sequencial e o tunelamento termicamente assistido.

O efeito de emissão termiônica é gerado pela transferência da energia térmica da rede cristalina para os elétrons no estado fundamental. Este espalhamento (transferência de energia) promove os elétrons para o contínuo acima da barreira. Com a tensão aplicada no dispositivo os elétrons excitados formam a corrente de escuro. A maior contribuição deste efeito ocorre a temperaturas a partir de aproximadamente 50K.

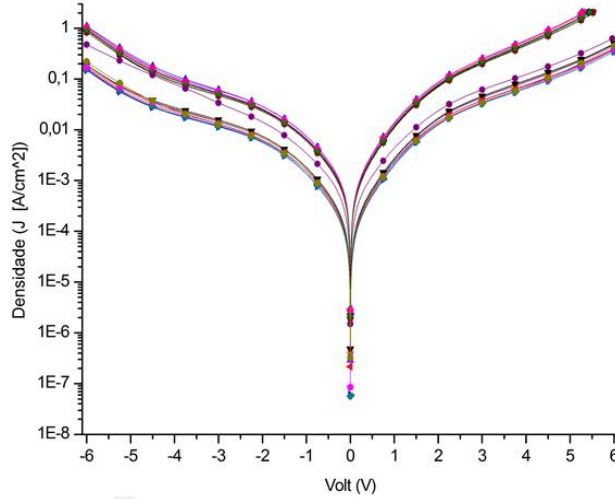
O tunelamento ressonante sequencial ocorre devido ao tunelamento de elétrons através das barreiras para os poços subsequentes quando os estados destes poços estiverem alinhados ou próximos do alinhamento em energia. Este efeito pode ser minimizado com o aumento da largura das barreiras, que por outro lado pode diminuir a responsividade do dispositivo (taxa de intensidade do sinal por intensidade da radiação incidente). Nos gráficos de corrente por tensão aplicada correspondentes a este efeito existe a formação de uma região de corrente constante (VIEIRA, 1998). Os efeitos de tunelamento ressonante são predominantes abaixo de 30K, aproximadamente.

O terceiro efeito, o tunelamento termicamente assistido, é o menos compreendido. Está associado à transferência de energia térmica da rede cristalina aos elétrons do poço (interação elétron-fônon) aumentando a probabilidade de ocorrência de tunelamento destes elétrons através das barreiras. Sua maior contribuição se dá abaixo de 50K aproximadamente (LEVINE, 1993).

Nos três efeitos existe o escape de elétrons dos poços, que é contrabalançado pela injeção de elétrons pelo contato atingindo-se uma situação de equilíbrio na qual as taxas de captura e emissão de cargas em cada poço se igualem. Portanto, a corrente de escuro é formada pelos elétrons emitidos pelos poços somados aos elétrons injetados pelo contato elétrico do dispositivo e não capturados pelos poços (SCHNEIDER; LIU, 2007).

Na figura 11 são mostradas curvas típicas de corrente de escuro obtidas a 70K em dispositivos QWIPs com pico de absorção em 9,3 μ m. A esta temperatura, o processo dominante de geração de corrente de escuro é o de emissão termiônica.

Figura 11 – curva de densidade de corrente de escuro para dois dispositivos com pico de detecção em 9,3µm. A temperatura da medida foi feita a 70K, em que o processo de emissão termiônica é dominante na geração de corrente de escuro.



Fonte: Laboratório de Caracterização de Dispositivos Semicondutores, IEAv DCTA.

3.5. FOTOCORRENTE

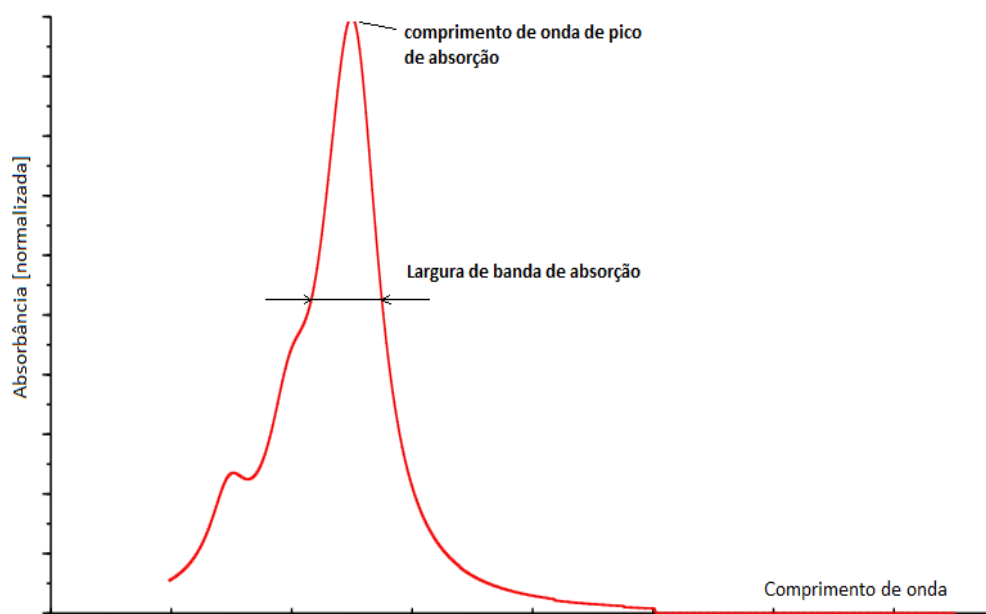
O processo físico de formação de fotocorrente é iniciado com a absorção de fótons incidentes e consequente excitação de elétrons da subbanda fundamental para subbandas excitadas. O estado final do elétron excitado depende da energia do fóton incidente. As probabilidades de transição devido ao espalhamento por fótons são determinadas pelo cálculo de uma grandeza denominada força de oscilador. A força de oscilador é um valor adimensional da probabilidade de transição entre dois estados eletrônicos devido à absorção de fótons. A expressão para esta medida é dada por:

$$f_{ij} = \frac{m^*}{\hbar} \left(\int \psi_i^* r \psi_j dr \right)^2 (E_j - E_i) \quad (2)$$

onde, ψ é a função de onda, E é a energia do estado correspondente, r é o operador posição, e os índices j, i referem-se aos estados iniciais e finais do elétron. Quando calculamos a força de oscilador para um dispositivo QWIP e utilizando uma convolução sobre os resultados obtém-se a curva de absorbância do dispositivo (figura 12). O maior valor da força de oscilador f_{ij} corresponde ao pico da curva de absorbância, isto é, fótons com energia de transição

correspondente a ij possuem maior probabilidade de gerar a excitação de um elétron entre os estados correspondentes a ij .

Figura 12 – Curva típica de absorbância de um dispositivo QWIP.



Fonte: Software QWS (TANAKA et al, 2013).

Através da absorbância é possível identificar o comprimento de onda de pico. Outra característica importante a ser observada é a largura de banda de detecção do dispositivo, ou seja, mesmo que exista seletividade na absorção de comprimentos de onda, o perfil de absorção não será absolutamente estreito. Isso ocorre devido a mecanismos adicionais de espalhamento (elétron-elétron, elétron-fônon, elétron-impureza, dentre outras) (UNUMA, 2003).

O elétron excitado é transportado através da estrutura devido à ação de campo elétrico aplicado (LIU, 1993). Ao longo desse transporte, o elétron sofre espalhamento por processos diversos: fônons, interfaces, impurezas ionizadas, flutuações de liga dentre outros. Estes espalhamentos possibilitam que o elétron seja “relaxado” para o estado fundamental (no interior do poço) (LIU, 1993).

3.6. MECANISMO DE GANHO

A descrição dos mecanismos de ganho (de ruído e fotocondutivo) em dispositivos QWIPs é importante para a determinação da detectividade do dispositivo. A definição de ganho dada por Beck (1993) descreve que o ganho representa o número de portadores que

circulam no circuito do dispositivo para cada portador gerado tanto por efeitos térmicos quanto por absorção de fótons. Representa, portanto a taxa de elétrons “circulantes” por portadores gerados no dispositivo, sendo que no caso de ganho fotocondutivo tratam-se de elétrons excitados por absorção de fótons, enquanto que no caso do ganho de ruído os elétrons são excitados por espalhamento pelos fônons da estrutura (espalhamento térmico).

Para organização, serão primeiramente apresentados os argumentos físicos para a geração dos mecanismos de ganho em um dispositivo semiconductor para que posteriormente seja apresentado o modelo de cálculo de ganho de ruído utilizado no presente trabalho.

Partindo da equação da continuidade (GRIFFITHS, 1999):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (3)$$

que na forma integral é dada por:

$$\oint \vec{J} \cdot d\vec{A} = -\frac{dq_{enc}}{dt} \quad (4)$$

Na equação 4 o fluxo de corrente através da superfície de uma região fechada A é igual a menos a variação temporal de carga existente no interior desta região. Em outras palavras, em uma região onde não há variação temporal da quantidade de carga, o valor de corrente entrando na região é igual ao valor de corrente saindo da região resultando em um fluxo total nulo.

Para um circuito em regime estacionário (leia-se: em um estado não transiente) temos que:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (5)$$

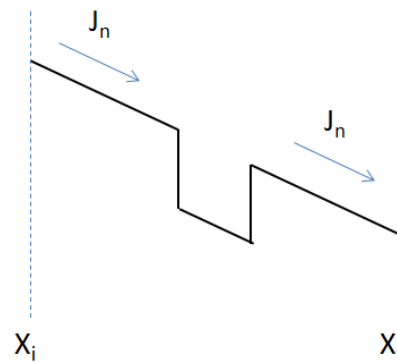
ou seja, o fluxo de corrente em todos os pontos do circuito é nulo indicando que não existem pontos de acúmulo ou geração de corrente. Supondo que em um determinado instante em algum ponto do circuito ocorra uma variação da densidade de carga:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \neq 0 \quad (6)$$

nesta situação o circuito estará em um estado transiente (ou oscilante). Devido a esta diferença pontual de carga uma diferença de potencial δV será adicionada ao circuito, de tal modo que a corrente será alterada de forma que se retorne a um estado de equilíbrio.

Vamos supor um dispositivo QWIP com uma estrutura de poços quadrados submetida a uma diferença de potencial V_0 e cujo processo de detecção ocorra na banda de condução. Para efeitos ilustrativos do argumento vamos analisar um poço qualquer desta estrutura, ilustrado na figura 12.

Figura 13 – Poço quântico de um dispositivo QWIP em uma situação de equilíbrio, ou seja, a corrente em X_i é igual a corrente em X_f .



Fonte: Autor.

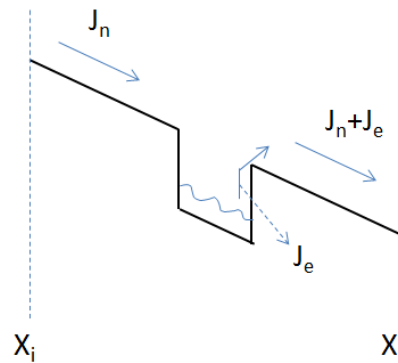
Na situação da figura 13 a estrutura está em equilíbrio, a corrente entrando na região do poço através do ponto X_i é a mesma saindo pelo ponto X_f , e desta forma temos:

$$\oint \vec{J} \cdot d\vec{A} = 0$$

(7)

onde a região A é toda a região do poço limitada nos pontos X_i e X_f . Suponhamos que em um determinado instante um efeito gerador de cargas é aplicado na estrutura (por exemplo temperatura), de forma que os elétrons do estado fundamental sejam excitados e escapem do poço, por exemplo, por aumento da temperatura ou incidência de fótons. Nesta situação transiente o poço passa a emitir cargas (J_e) de tal forma que no ponto X_f passará uma corrente total $J_T = J_e + J_n$ (Figura 14).

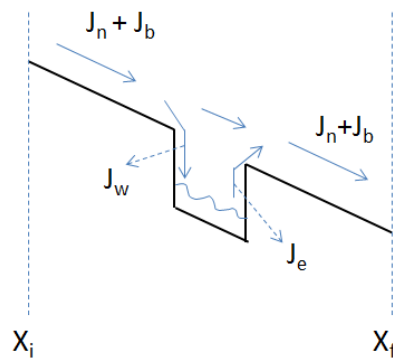
Figura 14 – Situação transiente (desequilíbrio) em um poço quântico, a corrente em X_i é diferente da corrente em X_f e devido a essa perda de carga nos poços uma diferença de potencial adicional é gerada δV .



Fonte: Autor.

A perda de cargas no poço causará uma diferença de potencial adicional δV que tenderá a aumentar a corrente entrando em X_i . Esse efeito também poderia ser previsto analisando a equação de continuidade. Esse aumento da densidade de corrente (J_b) tenderá a igualar a corrente dos pontos X_i e X_f , porém parte dessa corrente J_b será capturada na região do poço, definida por J_w (ver figura 15).

Figura 15 – Situação de equilíbrio em que as correntes em X_i e X_f são iguais e não há variação de carga no interior do poço.



Fonte: Autor.

Podemos escrever que a densidade de probabilidade de captura de um elétron com energia E pela região do poço é dada por:

$$P(E) = \underbrace{\Gamma_{interf} + \Gamma_{e-e} + \Gamma_{e-LO} + \dots}_{\text{Mecanismos de espalhamento}}$$

(8)

onde: cada Γ indica a probabilidade de ocorrência de um tipo de espalhamento: defeitos de interface, elétron-elétron, elétron fônon, dentre outros.

Logo, a probabilidade de captura de um elétron com energia acima da barreira seria dada por:

$$p_c = \int_{E_1}^{\infty} P(E)dE \quad (9)$$

onde: E_1 é a energia do primeiro estado excitado, ou seja, a integração é feita sobre todas as energias possíveis dos elétrons livres.

Retornando às características do sistema em equilíbrio, temos uma condição dual quando a variação média de cargas no poço for nula e ao mesmo tempo em que a corrente em X_i e X_f forem iguais. Nestas condições temos ainda que $J_w = J_e$. Na situação de equilíbrio temos a seguinte equação:

$$J_b \cdot p_c = J_e \quad (10)$$

Se $0 < p_c \leq 1$, então $J_e \leq J_b$, ou seja, para cada elétron que escapa do poço (independente do mecanismo) haverá uma quantidade de elétrons circulando no dispositivo de tal forma que se obtenha o equilíbrio na estrutura, ou seja, a situação em que a equação 7 esteja satisfeita.

Os argumentos aqui apresentados podem ser estendidos a qualquer perfil de estrutura tanto para a banda de valência quanto de condução, em diferentes situações de perda ou geração de carga.

Conforme descrito anteriormente, a descrição geral do mecanismo de ganho é associada à emissão-recombinação de elétrons (QWIPs do tipo-n) nos poços. Uma importante observação trata-se da diferenciação entre QWIP e material bulk, já que o QWIP possui discretização espacial na emissão de portadores; somente nas regiões do poço os portadores escapam contribuindo para a formação de corrente (BECK, 1993; ERSHOV, 1999).

A partir da descrição do mecanismo físico de geração do ganho fotocondutivo e de ruído, será apresentada a equação do modelo mais detalhado para determinação dos ganhos.

Sendo assim, as equações de cálculo de ganho fotocondutivo e de ruído são dadas por (ERSHOV, 1999):

$$g_p = \frac{1}{Np_c} \quad (11)$$

$$g_n = \frac{\left(1 - \frac{p_c}{2}\right)}{(P+1)p_c} + \frac{1 - (1 - p_c)^{P+1}}{p_c(P+1)^2[1 - (1 - p_c)^P]} \quad (12)$$

onde: g_p é o ganho fotocondutivo, g_n é o ganho de ruído e P é o número de poços.

As equações acima consideram que:

- Em média a densidade de portadores existentes no poço se mantém constante;
- A probabilidade de captura tem valor igual para todos os poços da estrutura;
- O emissor (contato de emissão de portadores) é ideal;
- O transporte de elétrons via tunelamento através das barreiras é desprezível.

Interessante, notar o significado do segundo termo aditivo na equação de ganho de ruído, o que diferencia este modelo de outros apresentados na literatura (BECK, 1993; LIU, 1992). Um portador que escapa do coletor não será capturado e irá “causar” (considerando estabilidade de cargas na estrutura) a injeção de outro portador pelo contato de emissão (emissor). Podemos afirmar que este portador irá passar por dois períodos sem nenhuma probabilidade de captura. Este tipo de efeito é significativo principalmente para dispositivos com poucos períodos ($P < 10$).

4 METODOLOGIA

Antes de iniciar o capítulo com as descrições das fórmulas e das considerações efetuadas, é necessário aqui descrever a natureza de alguns parâmetros intrínsecos de dispositivos QWIP que serão utilizados a partir deste ponto.

O tempo médio de captura (τ_c) é o tempo médio necessário para que elétrons livres transportados por efeito de campo elétrico sejam espalhados principalmente por defeitos de interface, percam energia e sejam relaxados para o estado fundamental no interior do poço. O parâmetro τ_c está relacionado a probabilidade de captura (p_c). O tempo de emissão térmica (τ_G) refere-se ao tempo médio de excitação térmica (espalhamento por fônons) dos elétrons da subbanda fundamental independente da energia. O tempo médio de trânsito (τ_{trans}) é o tempo necessário para o portador atravessar a região do poço com energia acima da barreira.

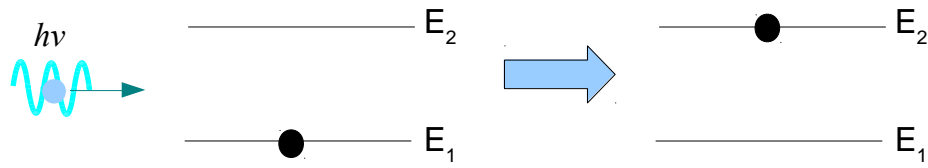
4.1. EQUAÇÕES DE TAXA

Equações de taxa foram inicialmente propostas por Einstein no estudo da absorção e emissão estimulada de fótons por átomos. São muito utilizadas no estudo de lasers, sendo uma ferramenta para cálculos de propriedades como: intensidade de bombeamento, largura de banda, densidade espectral de energia, dentre outras (INDJIN, 2002).

As equações consistem de um lado de uma derivada temporal da concentração de portadores em um nível e do outro um valor de médio resultante de processos de absorção de fótons (com excitação de elétrons) e de emissão de fótons (com relaxação de elétrons) de tal forma que esses processos podem retirar ou acrescentar elétrons ao nível energético estudado. Deve-se lembrar que os valores tratados representam valores médios nas probabilidades de absorção ou emissão (SVELTO, 2010).

Uma aplicação autoconsistente de equações de taxa pode ser encontrada em (INDJIN, 2002), em que o autor utiliza as equações de taxa para cálculo de ganho do dispositivo e corrente termicamente gerada.

A seguir iremos demonstrar alguns exemplos de aplicação das equações de taxa (SVELTO, 2010). No estudo da absorção temos que:

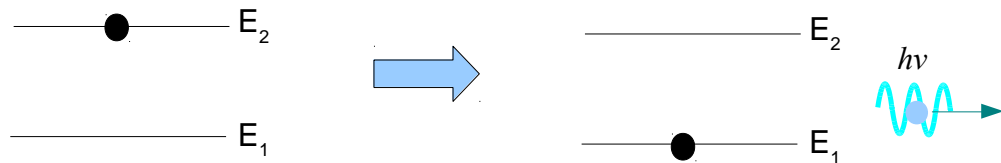


Um fóton é absorvido no sistema pelo elétron do estado E_1 . As equações de taxa para os níveis E_1 e E_2 podem ser escritas como:

$$\frac{dN_1}{dt} = -\alpha_{abs} N_F N_1$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \alpha_{abs} N_F N_1$$

onde: α_{abs} é a probabilidade média de absorção de fótons incidentes, e N_F é a população de fótons no sistema. Para um sistema que emite fótons teríamos:



As equações de taxa podem ser escritas como:

$$\frac{dN_2}{dt} = -\alpha_{emissao} N_2$$

$$N_1 + N_2 = \text{constante}$$

onde: $\alpha_{emissao}$ é a probabilidade média de emissão de fótons.

Importante ressaltar que as equações de taxa são válidas para obtenção de um resultado da ação média dos efeitos considerados. Análises de sistemas de poucas partículas podem ser comprometidas se utilizadas as equações de taxa descritas nessa seção.

4.2. APLICAÇÃO DE EQUAÇÕES DE TAXA EM ESTRUTURAS IDEAIS DE POÇOS QUÂNTICOS

Nesta seção, empregam-se equações de taxa no estudo de dispositivos QWIPs de poços retangulares de barreiras simétricas, mais comumente chamados de poços simples (como serão denominados a partir deste ponto). A apresentação da argumentação física para aplicação final das equações de taxa é desenvolvida a partir de exemplos envolvendo dispositivos ideais simples, até um dispositivo de múltiplos poços (mais próximo de um dispositivo real). Ao final do capítulo é proposto um método de cálculo autoconsistente para a obtenção de parâmetros intrínsecos (tempo médio de excitação térmica, probabilidade de captura e tempo de captura de elétrons de condução), de uma estrutura típica de dispositivo QWIP (de poços simples) a partir de resultados experimentais de medições de corrente de escuro a *baixa tensão aplicada*.

Supondo uma estrutura ideal em uma situação de escuro (figura 8). Supondo a existência de somente duas subbandas com energia menor ou igual a barreira, a quantidade total de portadores (N_T) existentes na estrutura será:

$$N_T = N_0 + N_1 \quad (13)$$

onde N_0 e N_1 representa a concentração de portadores nos estados fundamental e primeiro estado excitado. Considerando uma situação de equilíbrio termodinâmico na estrutura, a concentração de portadores permanece constante (em média) no tempo. As equações de taxa para este sistema serão:

$$\frac{dN_0}{dt} = \frac{N_1}{\tau_r} - G(T)N_0 = 0 \quad (14)$$

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{N_1}{\tau_r} + G(T)N_0 = 0 \quad (15)$$

onde $G(T)$ é a taxa de geração de portadores como efeito da excitação térmica da estrutura.

O tempo de relaxação τ_r é obtido a partir dos tempos característicos (médios) de todos os fenômenos de espalhamento que resultam em relaxação de um elétron excitado, conforme expressão dada pela regra de Mathiessen (ZINOV'EV, 1973) a seguir:

$$\frac{1}{\tau_r} = \sum_i \frac{1}{\tau_i} \quad (16)$$

onde cada termo τ_i representa o tempo característico de um efeito de espalhamento (exemplos: elétron-fônon, elétron-elétron, etc.).

A distribuição de portadores em um sistema quântico em equilíbrio termodinâmico é dado por: $N_0 = N_{0e}f(E_0, T)$, onde $f(E_0, T)$ é a distribuição de probabilidade de ocupação dependente da energia (E) da temperatura (T), N_{0e} é a densidade efetiva de estados que indica a quantidade de estados disponíveis para ocupação em um determinado sistema quântico. A equação abaixo apresentada em (HARRISON, 2005) é utilizada para o cálculo da densidade de estados em uma estrutura de P poços quânticos:

$$N_e = \sum_{i=1}^P \frac{m^*}{\pi \hbar^2 L} \quad (17)$$

onde: L é o comprimento de “ P ” períodos de poço + barreira. Ou seja, a densidade efetiva de estados é independente do número de períodos do dispositivo. A partir desta densidade é possível calcular a quantidade total de partículas nesse sistema, efetuando o cálculo da integral da densidade de estados com a distribuição de probabilidades de ocupação. No caso de QWIPs do tipo N as partículas estudadas são elétrons, que, se tratando de férmions, respeitam a distribuição de probabilidades de Fermi-Dirac. Sendo assim a densidade total de portadores no sistema é dada por:

$$N_e = \frac{m^* K_B T}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^P \ln \left(\exp \left(\frac{E_F - E_i}{K_B T} \right) + 1 \right) \quad (18)$$

onde: E_F é a energia de Fermi do sistema, E_i é a energia de cada estado e K_B é a constante de Boltzmann.

Na situação de equilíbrio termodinâmico a distribuição de portadores é dada por: $N_0 = N_{0e}f(E_0, T)$ e $N_1 = N_{1e}f(E_1, T)$ onde N_e é a densidade efetiva de estados de cada subbanda do sistema. Logo:

$$\frac{N_1}{\tau_r} = G(T)N_0 \Rightarrow \frac{N_1 e f(E_1, T)}{\tau_r} = G(T)N_0 e f(E_0, T) \therefore G(T) = \frac{N_1 e f(E_1, T)}{\tau_r N_0 e f(E_0, T)} \quad (19)$$

Neste caso encontramos uma relação entre a taxa de excitação térmica de elétrons do estado fundamental em função do tempo característico de relaxação e das distribuições termodinâmicas (Fermi ou Boltzmann dependendo das aproximações realizadas).

Considerando agora uma situação em que exista a incidência de fótons a uma taxa constante com certa distribuição em função da frequência, $\Phi(\nu)$, na estrutura da figura 8. As equações de taxa nesta situação serão dadas por:

$$\frac{dN_0}{dt} = \frac{N_1}{\tau_r} - G(T)N_0 - N_0 \int_0^\infty \phi(\nu)\eta(\nu)d\nu \quad (20)$$

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{N_1}{\tau_r} + G(T)N_0 + N_0 \int_0^\infty \phi(\nu)\eta(\nu)d\nu \quad (21)$$

onde $\eta(\nu)$ é a eficiência quântica da estrutura em função da frequência do fóton incidente. A eficiência quântica é uma grandeza que mede a probabilidade de acoplamento (interação) do fóton com um elétron no estado fundamental do poço. Esse coeficiente é dependente da temperatura e dimensões características da estrutura (LEVINE , 1993).

Após um tempo suficientemente longo, o sistema entrará em equilíbrio, tal que a concentração média de portadores não se altera com o tempo. Os valores de $G(T)$ e τ_r permanecem os mesmos da situação anterior, sem fótons incidentes. As equações se tornam:

$$\frac{dN_0}{dt} = \frac{N_1}{\tau_r} - G(T)N_0 - N_0 \int_0^\infty \phi(\nu)\eta(\nu)d\nu = 0$$

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{N_1}{\tau_r} + G(T)N_0 + N_0 \int_0^\infty \phi(\nu)\eta(\nu)d\nu = 0$$

Portanto:

$$\frac{N_1}{\tau_r} = N_0[G(T) + \int_0^\infty \phi(\nu)\eta(\nu)d\nu]$$

e utilizando a equação 1, teremos:

$$N_T - N_0 = N_0 \tau_r [G(T) + \int_0^\infty \phi(\nu) \eta(\nu) d\nu]$$

$$N_0 = \frac{N_T}{\{1 + \tau_r [G(T) + \int_0^\infty \phi(\nu) \eta(\nu) d\nu]\}}$$

(22)

e ainda podemos escrever:

$$N_1 = N_T \left(1 - \frac{1}{\{1 + \tau_r [G(T) + \int_0^\infty \phi(\nu) \eta(\nu) d\nu]\}} \right)$$

(23)

A partir da equação 23, pode se observar que:

- Com um tempo de relaxação muito curto, $\tau_r \rightarrow 0$, os elétrons excitados para o primeiro estado, decairão rapidamente, fazendo com que o quase toda a população de elétrons, esteja no estado fundamental;
- Se tivermos um baixo fluxo de fótons $\Phi(\nu)$ e/ou baixa eficiência quântica $\eta(\nu)$ o sistema se comporta de maneira similar a situação de $\tau_r \rightarrow 0$;

A aplicação de campo elétrico pode ser representada como uma inclinação espacial nas bandas dos materiais semicondutores. Em um dispositivo com contatos formados por placas paralelas esta inclinação será constante para materiais do tipo *bulk*, em regiões distantes das bordas dos contatos e da interface entre metal-semicondutor, para campos elétricos de amplitude moderada, porém em estruturas do tipo super-redes, uma não uniformidade no campo elétrico pode formar-se mesmo a campos elétricos moderados e aumentando com a tensão aplicada. (THIBAudeau, 1996). Para baixas tensões aplicadas, até 0,6V (no caso dos QWIPs considerados neste trabalho), aplica-se com precisão aceitável a consideração de inclinação constante das bandas da estrutura. Esta aproximação será importante para as considerações de simetria no estudo da super-rede, explicados mais adiante neste trabalho. Desta forma, será considerada a aplicação de campo elétrico de baixa intensidade, de forma que o campo elétrico possa ser considerado uniforme.

Para um sistema ideal com 2 níveis, a determinada temperatura T, com incidência de fótons e aplicação de campo elétrico de baixa intensidade F, as equações de taxa serão:

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{N_1}{\tau} + G(F, T)N_0 + N_0 \int_0^{\infty} \phi(v)\eta(F, v)dv = 0 \quad (24)$$

$$\frac{dN_0}{dt} = \frac{N_1}{\tau} - G(F, T)N_0 - N_0 \int_0^{\infty} \phi(v)\eta(F, v)dv = 0 \quad (25)$$

onde τ é o tempo médio composto pelo tempo de captura e relaxação conforme equação , que estão na região do poço. Com aplicação de campo elétrico, a utilização da equação 19 torna-se inviável devido a dificuldade evidente de se calcular o nível de Fermi para cada tensão aplicada.

Para esta situação devemos considerar a dependência da taxa de geração térmica de portadores e da eficiência quântica com a intensidade do campo aplicado, devido à alteração das barreiras (diminuição de uma barreira efetiva), e do próprio poço. Porém, devido à largura da barreira ser muito maior que o poço, a queda de potencial do primeiro é mais significativa.

Na configuração final descrita pelas equações 24 e 25, a concentração de portadores N_1 possui dependência com o campo elétrico, temperatura e fluxo de fótons incidentes, além de uma dependência implícita com as dimensões e material da estrutura. Pode-se descrever o parâmetro N_1 pela equação abaixo:

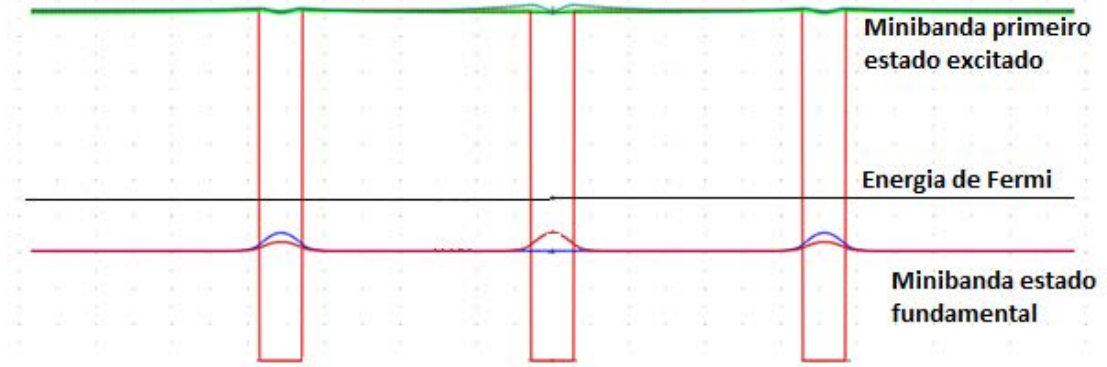
$$\begin{aligned} \frac{N_1}{\tau} &= G(F, T)N_0 + N_0 \int_0^{\infty} \phi(v)\eta(F, v)dv \\ \therefore N_1 &= N_0\tau[G(F, T) + \int_0^{\infty} \phi(v)\eta(F, v)dv] \end{aligned}$$

O valor de densidade de corrente medido neste domínio será dado por: $J=eN_1\vartheta_d$, onde ϑ_d é a velocidade média de deslocamento (drift) dos portadores ao longo da estrutura, e é dependente do campo elétrico aplicado e da mobilidade dos portadores na estrutura (THIBAudeau, 1996). A expressão da densidade de corrente torna-se:

$$J = eN_0\vartheta_d\tau_c[G(F, T) + N_0 \int_0^{\infty} \phi(v)\eta(F, v)dv] \quad (26)$$

A seguir é suposto um conjunto finito de “P” poços quânticos com apenas 2 níveis, conforme apresentado na figura 16.

Figura 16 – estrutura finita de poços quânticos.



Fonte: software QWS (TANAKA et al, 2013).

Supõe-se que todos os poços possuem as mesmas dopagens e que a altura de barreira e a largura de poços sejam iguais ao longo de toda a estrutura. Conclui-se então que $G(F, T)$ e $\eta(F, \nu)$ são iguais para todos os poços. As equações de taxa serão:

$$\frac{dN_{i1}}{dt} = -\frac{N_{i1}}{\tau_r} + G(F, T)N_{i0} + N_{i0} \int_0^{\infty} \phi(\nu)\eta(F, \nu)d\nu = 0$$

$$\frac{dN_{i0}}{dt} = \frac{N_{i1}}{\tau_r} - G(F, T)N_{i0} - N_{i0} \int_0^{\infty} \phi(\nu)\eta(F, \nu)d\nu = 0$$

Considera-se que o estado $|i_1\rangle$ (“i” é um índice representando um poço qualquer da estrutura) possui energia em ressonância com a barreira. As funções de onda dos elétrons possuem alto valor de $|\psi_i|^2$ na região do poço i, quando não houver aplicação de campo elétrico. Neste caso as equações para cada poço i serão idênticas ao resultado obtido para o caso de um poço isolado (equações 24 e 25 com adição de um índice i).

Considerando a aplicação de campo elétrico de baixa intensidade. Existirá a injeção de cargas na estrutura de forma que o número de portadores N_{i0} permanece constante no tempo. Supondo ainda uma incidência homogênea de fótons ao longo da estrutura temos as seguintes equações de taxa:

$$\frac{dN_{i0}}{dt} = \frac{P \cdot N_1}{\tau} + \sum_{i=1}^P N_{i0} [G(F, T) + \int_0^{\infty} \phi(\nu) \eta(F, \nu) d\nu] = 0$$

Onde P é o número de poços na estrutura. Da suposição inicial de que os poços são iguais temos $N_{i0}=N_0$, resultando que:

$$N_1 = N_0 \tau [G(F, T) + \phi(\nu) \eta(F, \nu)]$$

E para a corrente medida desta estrutura obtemos um resultado idêntico à equação 26, ou seja, resultado igual ao de um poço isolado:

$$J = N_0 q_d \tau [G(F, T) + \phi(\nu) \eta(F, \nu)]$$

A partir dos resultados dos casos anteriores vamos escrever as equações de taxa para um poço isolado possuindo K níveis, sendo que a partir do primeiro estado excitado, os níveis estão acima do nível da barreira. Sem aplicação de campo elétrico e sem a incidência de fótons, escrevemos as seguintes equações de taxa:

$$\frac{dN_0}{dt} = -N_0 \sum_{k=1}^K G_k(0, T) + \sum_{k=1}^K \frac{N_k}{\tau_k} = 0 \quad (27)$$

$$\frac{dN_k}{dt} = -N_0 G_k(0, T) - \frac{N_k}{\tau_k} = 0 \quad (28)$$

onde τ_k é o tempo de relaxação do nível $|k\rangle$ para o nível fundamental, e G_k representa a taxa de excitação térmica de portadores do nível $|0\rangle$ para o nível $|K\rangle$. Temos ainda que:

$$\sum_{k=0}^K N_k = N_T$$

A distribuição de cargas na estrutura, considerando o sistema em equilíbrio, ou seja, situação não-transiente, é dada por:

$$N_k = N_{ke} \cdot f(E_k, T)$$

onde N_{ke} é a densidade efetiva de estados no estado $|k\rangle$. A partir das equações 27 e 28, teremos:

$$\begin{aligned} N_k &= N_0 \tau_k G_k(0, T) \\ N_{ke} f(E_k, T) &= N_d \tau_k G_k(0, T) \\ G_k(0, T) &= \frac{N_{ke} f(E_k, T)}{N_d \tau_k} \end{aligned} \tag{29}$$

onde: N_d é a concentração de portadores provenientes da dopagem no poço. Consideramos a aproximação $N_0 = N_d$.

Com um fluxo de fótons constante de baixa intensidade $\Phi(\nu)$ incidente na estrutura, as equações de taxa serão:

$$\begin{aligned} \frac{dN_0}{dt} &= -N_0 \sum_{k=1}^K G_k(0, T) + \sum_{k=1}^K \frac{N_k}{\tau_k} - N_0 \Phi(\nu) \eta(\nu) = 0 \\ \frac{dN_k}{dt} &= N_0 G_k(0, T) - \frac{N_k}{\tau_k} + N_0 \Phi(\nu) \alpha_k(\nu) = 0 \end{aligned}$$

O termo $\alpha_k(\nu)$ refere-se ao coeficiente de absorção do fóton do nível 0 para o nível k , em notação matricial pode-se reescrever:

$$\begin{pmatrix} \tau_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tau_2 & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \tau_k \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} G_1(F, T) \\ G_2(F, T) \\ \cdots \\ G_k(F, T) \end{pmatrix} + \int_0^\infty d\nu \Phi(\nu) \begin{pmatrix} \alpha_1(\nu) \\ \alpha_2(\nu) \\ \cdots \\ \alpha_k(\nu) \end{pmatrix} \right] = \frac{\mathbf{1}}{N_0} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ \cdots \\ N_k \end{pmatrix}$$

que em conjunto com a relação adicional:

$$\sum_{k=0}^K N_k = N_T$$

fornece a solução do problema de distribuição de cargas para cada nível N_k , a partir dos dados de tempo de relaxação, das taxas de excitação térmica, coeficientes de absorção e do número de portadores N_T inseridos na estrutura.

Sabe-se que a polarização do fóton incidente influencia na probabilidade de absorção pelo elétron, e conseqüente excitação deste elétron. Fótons com polarização na direção perpendicular ao sentido de crescimento da heteroestrutura não promovem a excitação entre os níveis diretamente, e seriam necessários espalhamentos adicionais para esta excitação (LIU, 1993). Neste trabalho consideramos a polarização paralela ao sentido de crescimento da heteroestrutura. Define-se por coeficiente de absorção a probabilidade de excitação de um elétron devido à interação com fótons, considerando os efeitos de espalhamentos e a massa efetiva do elétron (LIU, 1993). Os coeficientes de absorção são dados por:

$$\alpha_j = \frac{e^2 \hbar}{4\epsilon_0 \epsilon m^* c} n_{2d} \text{sen}^2 \theta \frac{1}{\pi \delta E} \frac{f_{0j}}{1 + \left[\frac{E_j - E_0 - \hbar \omega}{\delta E} \right]^2}$$

onde f_{0j} é a força de oscilador da transação do nível $|0\rangle$ para $|k\rangle$. O fator de alargamento de linha, δE , é o resultado do efeito dos diversos mecanismos de espalhamento presentes na estrutura (UNUMA, 2003).

Para este caso, podemos escrever a densidade de corrente como:

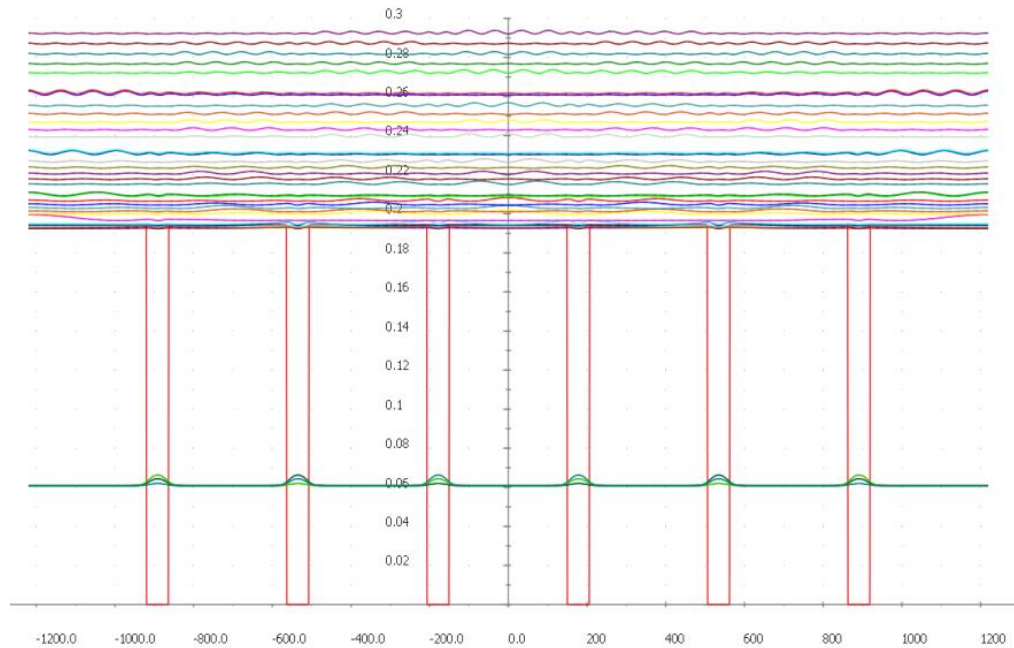
$$J = \vartheta_d \sum_{k=1}^K N_k \Rightarrow J = N_0 \vartheta_d \sum_{k=1}^K \tau_k [G_k(F, T) + \phi(\nu) \alpha_k(\nu)] \quad (30)$$

onde ϑ_d é a velocidade de deriva do elétron, que é a velocidade dos elétrons em um material sob ação de um campo elétrico, em uma aproximação semi-clássica.

4.3. APLICAÇÃO DE EQUAÇÕES DE TAXA EM DISPOSITIVOS QWIPS

Considerando uma estrutura típica de QWIP de poços quânticos quadrados simétricos e os vários níveis acima das barreiras. Uma representação desta estrutura é mostrada na figura 17.

Figura 17 – estrutura finita de poços quânticos, estrutura típica de um dispositivo QWIP.



Fonte: software QWS (TANAKA et al, 2013).

Nessas estruturas típicas de QWIPs o número de poços está entre 30 e 50. Neste caso, podemos considerar que os estados acima da barreira formam minibandas, ou seja, não se tratam de estados localizados, mas um contínuo de estados. Na figura 17 é possível identificar a existência do agrupamento de estados e a formação de minibandas.

As estruturas QWIPs operam a temperaturas abaixo de 300K, tal que a temperatura de operação depende do comprimento de onda de pico de absorção desejado, para valores entre 9-10 μ m esta temperatura está em torno de 77K. Os cálculos de forças de oscilador mostram que a absorção de fótons e consequente transição do estado fundamental para estados “muito” acima da barreira possuem probabilidade desprezível de ocorrência.

Com as considerações do regime de operação acima, o desenvolvimento de equações para esta estrutura irá considerar as minibandas acima do nível da barreira como uma única minibanda. Nesta aproximação, estamos assumindo para todos os estados acima da barreira os mesmos tempos médios de captura, emissão térmica e relaxamento.

As equações de taxa serão:

$$\frac{dN_0}{dt} = \frac{N_1}{\tau} - N_0 G(F, T) = 0 \quad (31)$$

onde N_1 representa a concentração de portadores na minibanda acima das barreiras da estrutura. A corrente de escuro desta estrutura (devido a efeitos térmicos) é dada por:

$$J = e \mathcal{G}_d \tau N_{i0} G(F, T)$$

4.4. CÁLCULO AUTOCONSISTENTE

O interesse de estudo deste documento está em estruturas típicas de dispositivos QWIP sem incidência de fótons (tratados na seção 4.3).

A partir de medidas experimentais de corrente de escuro em dispositivos QWIPs, de parâmetros do material, como mobilidade eletrônica e tempo de relaxação obtidos em literatura, é possível obter parâmetros de probabilidade de captura e tempos característicos de emissão térmica e captura de elétrons pelo poço. Com esse objetivo, é proposto um cálculo autoconsistente utilizando-se das equações:

$$\frac{N_1}{\tau_c} = \frac{N_0}{\tau_G} \quad (32)$$

$$g_n = \frac{N_1}{p_e N_{sc}} = \frac{N_1 (\tau_G + \tau_{trans})}{\tau_{trans} N_{sc}} \quad (33)$$

$$g_n = \frac{\left(1 - \frac{p_c}{2}\right)}{(P+1)p_c} + \frac{1 - (1 - p_c)^{P+1}}{p_c (P+1)^2 [1 - (1 - p_c)^P]} \quad (34)$$

A equação 33 é obtida através da definição de ganho de ruído: o número de portadores no circuito pelo número de portadores emitidos pelo poço por efeitos térmicos. A equação 34 é dada em literatura (ERSHOV, 1999), e é a escrita do ganho de ruído em termos de uma probabilidade de captura p_c , que se relaciona com o tempo de captura por:

$$p_c = \frac{\tau_{trans}}{\tau_{trans} + \tau_{capt}} = \frac{1}{1 + \frac{\mathcal{G}_d \tau_{capt}}{L_w}}$$

Consideramos que a quantidade média de portadores no estado fundamental no interior dos poços não se altera com o campo elétrico aplicado. Os poços quânticos atuam como semicondutores degenerados já que a energia de Fermi encontra-se no interior do poço.

As equações 34 e 35 representam o mesmo fenômeno e formam uma igualdade, ou seja, temos na verdade duas equações para o cálculo autoconsistente, de um lado a equação 32 e de outro 33+34. Os parâmetros determinados neste cálculo serão o tempo de captura τ_c e o tempo de emissão térmica τ_G . O valor de N_1 é obtido a partir de resultados experimentais de corrente de escuro e da equação:

$$J = e\vartheta_d N_1$$

Em (LHULLIER, 2009) a velocidade de drift é dada por:

$$\vartheta_d = \frac{\mu F}{\sqrt{1 + \left(\frac{\mu F}{\vartheta_{sat}}\right)^2}} \quad (35)$$

onde: μ é a mobilidade eletrônica, F é o campo elétrico aplicado e ϑ_{sat} é a velocidade de saturação das cargas na estrutura, que é um parâmetro empírico do material.

A seguir são descritos os passos para a realização do cálculo proposto:

1. Definição de τ_G ;

2. Resolução da equação: $\tau_c = \frac{N_1}{\left(\frac{N_0}{\tau_G} - \frac{N_1}{\tau_r}\right)}$

3. Obtenção da probabilidade de captura: $p_c = \frac{1}{1 + \frac{\vartheta_d \tau_c}{L_w}}$

4. Obtenção do ganho: equação 34.

5. Obtenção do tempo de emissão térmico τ_G : equação 33.

Os cálculos são encerrados quando os erros entre uma iteração e a próxima para os parâmetros de p_c , g , τ_G e τ_c forem menores que o critério de convergência estabelecido.

5 RESULTADOS

As amostras utilizadas para efetuar o cálculo autoconsistente proposto no item 4.4 foram construídas com as ligas AlGaAs/GaAs com dados apresentados na tabela 1. Os perfis das bandas de condução das amostras utilizadas são idênticos ao da figura 17.

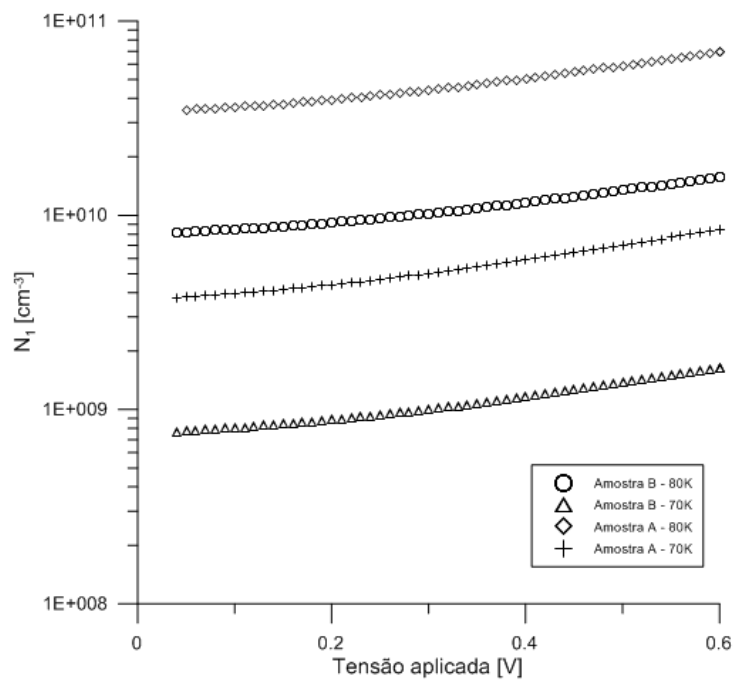
Tabela 1 – dados das amostras utilizadas para aplicação das equações de taxa.

	Amostra A	Amostra B
Barreira:	Al _{0,19} Ga _{0,81} As [300Å]	Al _{0,201} Ga _{0,799} As [300Å]
Poço:	GaAs [56.5Å]	GaAs [56.5Å]
Energia Fermi [eV]:	0,078	0,080
Estado fundamental [eV]:	0,056	0,061
Energia barreira [eV]:	0,182	0,191

Os poços são dopados com Si na concentração 10^{18} cm^{-3} e os valores das energias descritas na tabela acima, foram obtidos a partir de cálculo realizado no programa QWS (TANAKA, 2013). As medidas experimentais de corrente de escuro estão registradas na seção 8.1. As temperaturas utilizadas no cálculo para esse trabalho foram 70 e 80K.

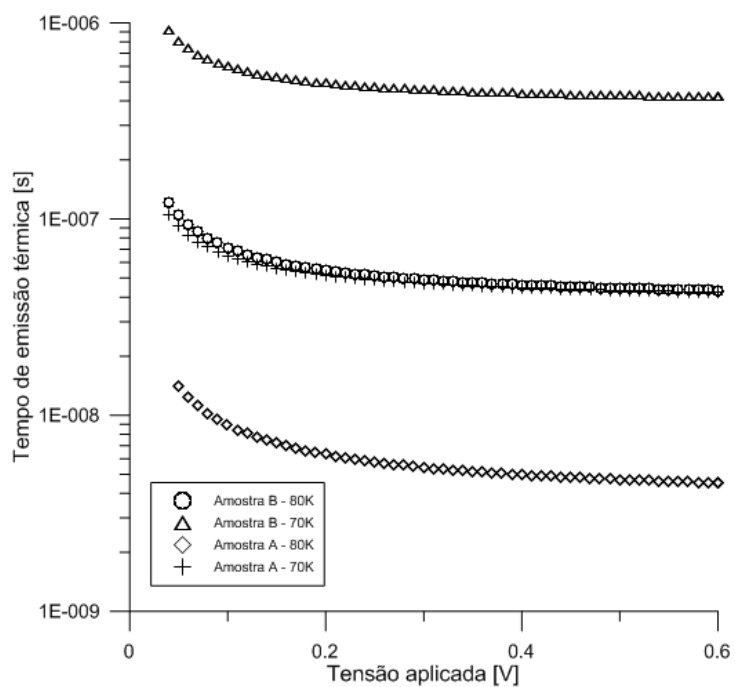
Os resultados cálculos apresentados a seguir consideraram mobilidade $\mu = 10^3 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ e velocidade de saturação $\vartheta_{\text{sat}} = 5.10^6 \text{ cm/s}$.

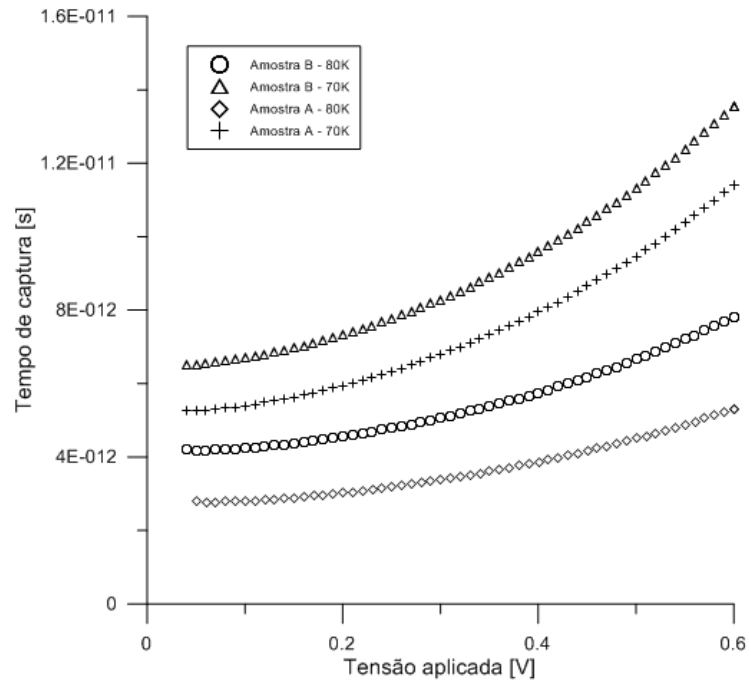
Figura 18 – Concentração bidimensional de portadores acima da barreira.



Fonte: Autor.

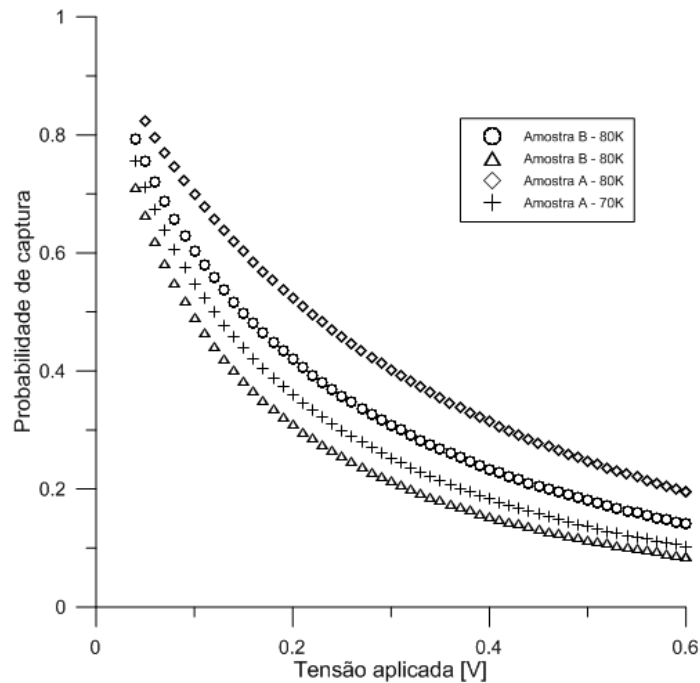
Figura 19 – Tempo de emissão térmica e tempo de captura de um elétron por um poço.





Fonte: Autor.

Figura 20 – Probabilidade de captura de um elétron por um poço.



Fonte: Autor.

O tempo de emissão térmica está relacionado ao espalhamento dos elétrons (a partir do estado fundamental do poço) majoritariamente por fônons da estrutura, ou seja, depende da característica do material cristalino e da temperatura em que o dispositivo se encontra. No

processo físico real, o tempo de emissão térmica (a ser encontrado no final do cálculo autoconsistente) não deve variações consideráveis com o valor de tensão aplicada (para campos aplicados de baixa intensidade). Este resultado é observado na figura 19.

Os dispositivos não possuem os mesmos tempos característicos de emissão térmica. Este comportamento entre os dispositivos pode ser explicado pela diferença na energia do estado fundamental e a energia da barreira (ΔE). No dispositivo A, com o menor ΔE , o tempo característico de emissão térmica é menor do que para o dispositivo B. Entre as diferentes temperaturas (70 e 80K), o tempo médio de emissão térmica é maior para a menor temperatura, isto é, a emissão térmica de elétrons ocorre a uma taxa menor para temperaturas mais baixas.

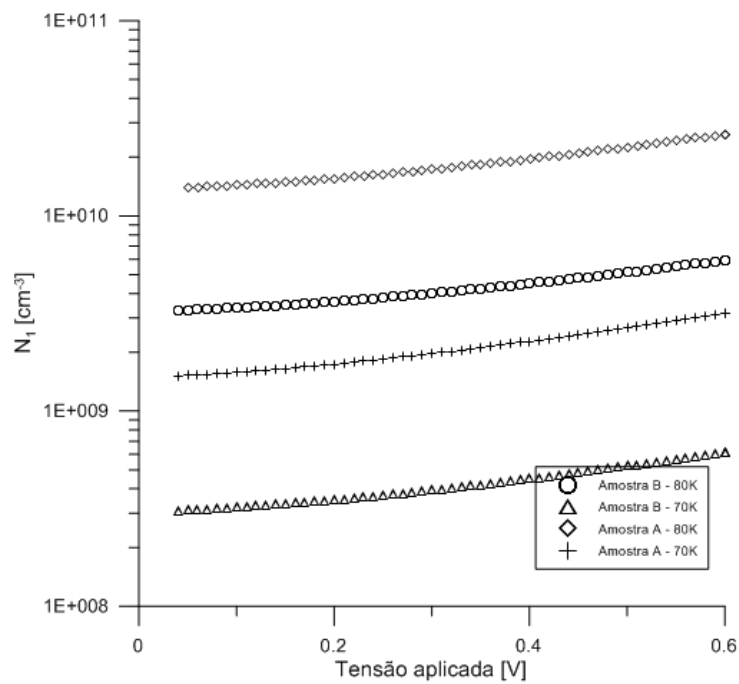
O valor de N_1 para o dispositivo A é maior do que para o dispositivo B, cálculo obtido diretamente dos valores de corrente de escuro. Esse comportamento é esperado já que a diferença de energia do estado fundamental para o nível da barreira é menor para o dispositivo A, ou seja, para uma mesma temperatura a excitação de elétrons para níveis acima da barreira é mais favorável para A do que para B. Para os dois dispositivos foram consideradas as mesmas propriedades de mobilidade e velocidade de saturação. As dimensões de poço e barreira são as mesmas, logo o tempo (médio) de trânsito do elétron é o mesmo para os dois dispositivos. Este tempo de trânsito é independente da temperatura, assumindo a mobilidade também *constante* com a temperatura.

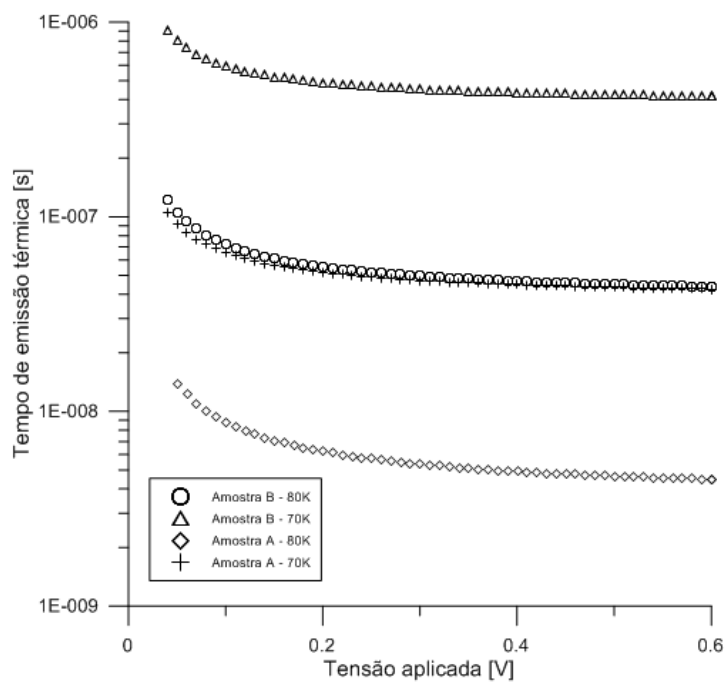
O tempo de captura (τ_c) aumenta conforme aplicação de campo elétrico. Com aumento do campo elétrico, os elétrons possuirão maior energia cinética e atravessarão a região do poço com menor probabilidade de espalhamento. O espalhamento de elétrons é o fator causador da captura de elétrons pelo poço.

Conforme discussão apresentada em (UNUMA, 2003), o principal mecanismo de espalhamento de elétrons em trânsito acima da barreira é gerado por defeitos de interface de material entre poço e barreira. A probabilidade de captura de elétrons é, portanto, uma propriedade dos materiais constituintes do dispositivo. Os dispositivos A e B foram construídos com mesmo material de poço e barreira, e os resultados obtidos para o tempo médio de captura para os dispositivos A e B estão bem próximos entre si, confirmando a previsão anteriormente citada sobre a dependência do tempo médio de captura com o material.

Apesar do valor de mobilidade igual $1000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ser amplamente aceito para a mobilidade de QWIPs de AlGaAs/GaAs, um novo cálculo foi efetuado utilizando novos valores de mobilidade e velocidade de saturação obtidos em (FRAENKEL et al, 1994) $\mu = 2500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ e $v_{\text{sat}} = 1,6 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$. Este novo cálculo visa permitir a avaliação do comportamento do método para diferentes mobilidades. Os resultados do processo autoconsistente são apresentados a seguir:

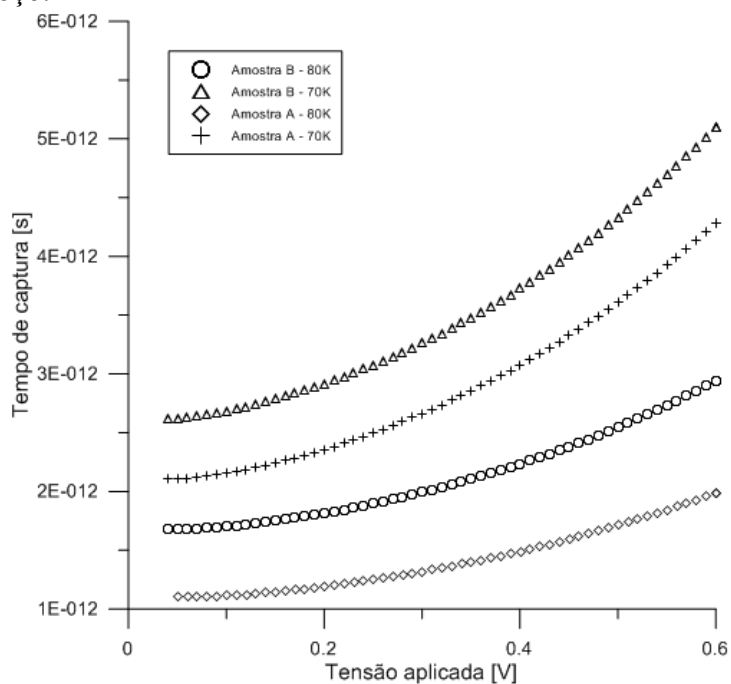
Figura 21 – Densidade bidimensional de portadores acima da barreira e tempo de emissão térmica.

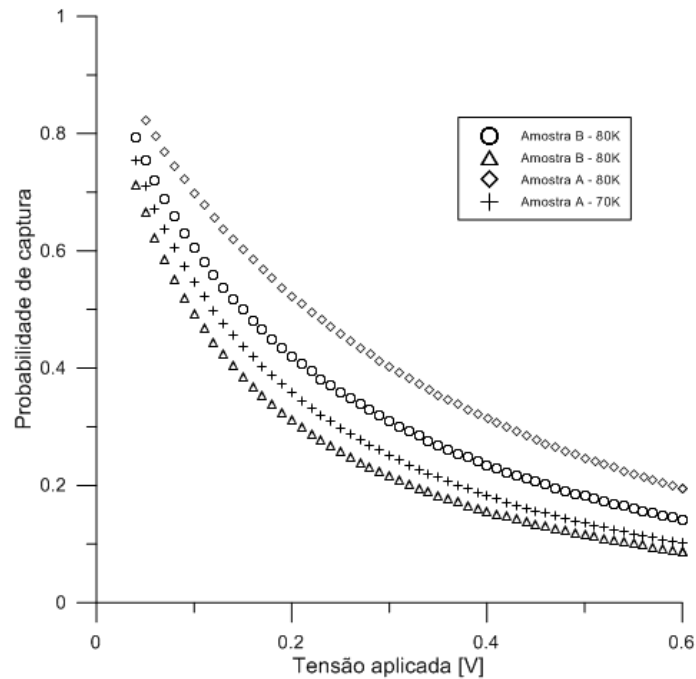




Fonte: Autor.

Figura 22 – Tempo de captura de elétrons na região do poço e probabilidade de captura de elétrons na região do poço.





Fonte: Autor.

Novamente, os resultados obtidos com os novos valores de mobilidade e velocidade de saturação são fisicamente consistentes ao menos qualitativamente. Comparando-se os resultados obtidos com mobilidade de 1000 e 2500 cm^2/Vs identificamos um mesmo comportamento qualitativo. Quando assumimos maior valor de mobilidade, estamos assumindo um material com menor probabilidade de espalhamento de portadores de carga em trânsito pelo dispositivo, justificando assim a diferença de valores encontrados entre os tempos de captura. O tempo de emissão térmica não possui uma dependência tão estreita com a mobilidade por não envolver portadores livres (que formam a corrente medida pelo experimento considerado). Esta previsão sobre a invariância do tempo de emissão térmica pode ser verificado nas figuras 19 e 21.

Devido a escassez de dados na literatura para os parâmetros envolvidos neste trabalho que sejam obtidos em amostras iguais às estudadas aqui, iremos efetuar comparações com dados de literatura obtidos em amostras semelhantes.

Primeiramente iremos comparar o valor da probabilidade de captura com valores mostrados na literatura (LEVINE, 1992). No gráfico abaixo, o autor aponta um gráfico do valor médio de probabilidade de captura, para três configurações de dispositivos construídos com AlGaAs/GaAs. As amostras A e B possuem características intermediárias entre as

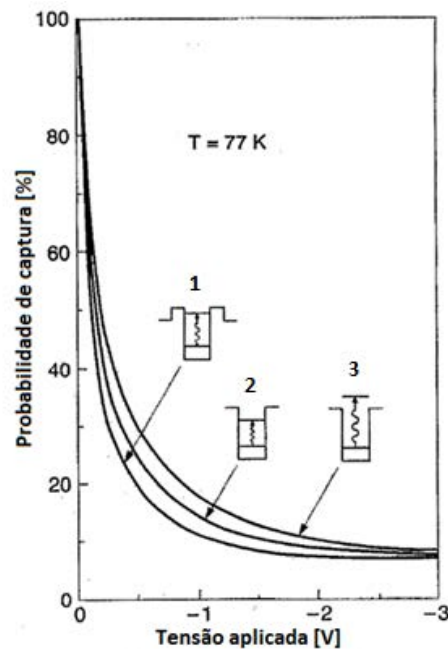
amostras 2 e 3, apresentadas na figura 23, já que o primeiro estado excitado nas amostras A e B está em ressonância com o nível da barreira.

Tabela 4 – Propriedades das amostras tratadas por Levine (1992).

Amostra	Lw (nm)	Lb (nm)	%Al	Dopagem (cm ⁻³)	Períodos
1	500	500	30	4.20E+17	25
		5000	26		
2	400	5000	25	1.60E+18	50
3	500	5000	26	4.20E+17	25

Fonte: (LEVINE, 1992)

Figura 23 - Probabilidade de captura em função da tensão aplicada.



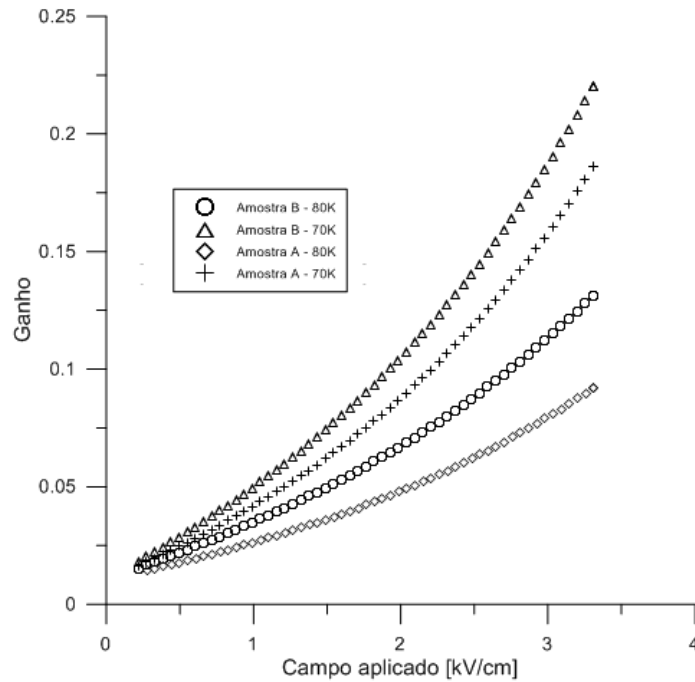
Fonte: (LEVINE, 1992)

Na figura 23, é possível perceber a existência de uma queda de um valor próximo de 100% para aproximadamente 30% em 0.5V. Nos gráficos dos resultados apresentados na figura 23 possuem comportamento próximo chegando a 40% em 0.6V. Lembrando que os valores apresentados estão sujeitos a influência de outras variáveis não consideradas nesse trabalho como, por exemplo: a pureza do material constituinte das amostras, efeitos dos demais estados além do primeiro estado excitado.

Realizamos os cálculos do ganho de ruído (figura 24) conforme apresentado em Ershov (1999) utilizando os parâmetros obtidos pelo método de equações de taxa apresentado com

mobilidade igual $1000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, e encontramos valores entre 0,08 a 0,18 (considerando as amostras A e B, nas temperaturas de 70 e 80K) para um campo máximo aplicado de 3 kV/cm (cerca de $0,6\text{v}$). Os resultados são mostrados abaixo:

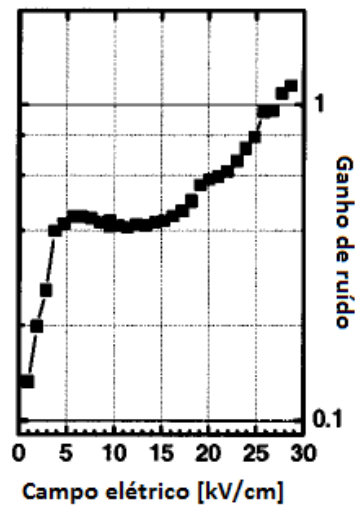
Figura 24 – Ganho de ruído calculado com equação dada por Ershov (1999) utilizando os parâmetros obtidos pelo método de equações de taxa apresentado com mobilidade igual a $1000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$.



Fonte: Autor.

Conforme dados experimentais apresentados por Steinkogler et al (2003), o ganho possui um comportamento crescente. A amostra trabalhada por Steinkogler et al (2003) é construída de $\text{In}_{0,28}\text{Ga}_{0,72}\text{As} / \text{GaAs}$, com barreiras de $47,5\text{nm}$ e poços de $4,5\text{nm}$. Os poços são dopados com $8,4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ de Si, e possui 100 períodos de poços e barreiras. Este QWIP possui detecção de pico em $9,2\mu\text{m}$ com tensão aplicada de 8V . O QWIP estudado por Steinkogler et al (2003) possui diferenças com nossas amostras A e B, porém podem nos dar indicativos de que os valores obtidos pelo modelo apresentado neste trabalho são compatíveis quantitativamente. Os resultados de Steinkogler et al (2003) para o ganho são apresentados abaixo:

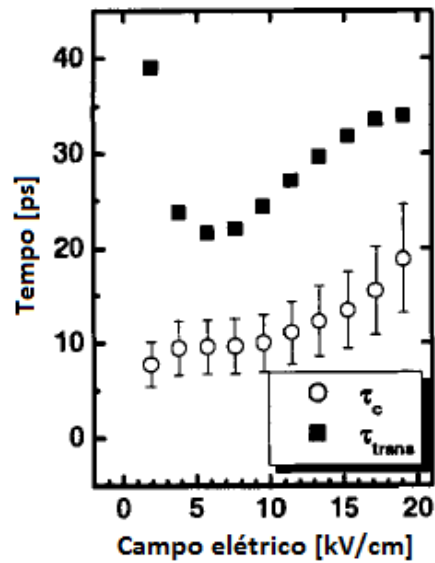
Figura 25 – Ganho de ruído.



Fonte: (STEINKOGLER et al, 2003)

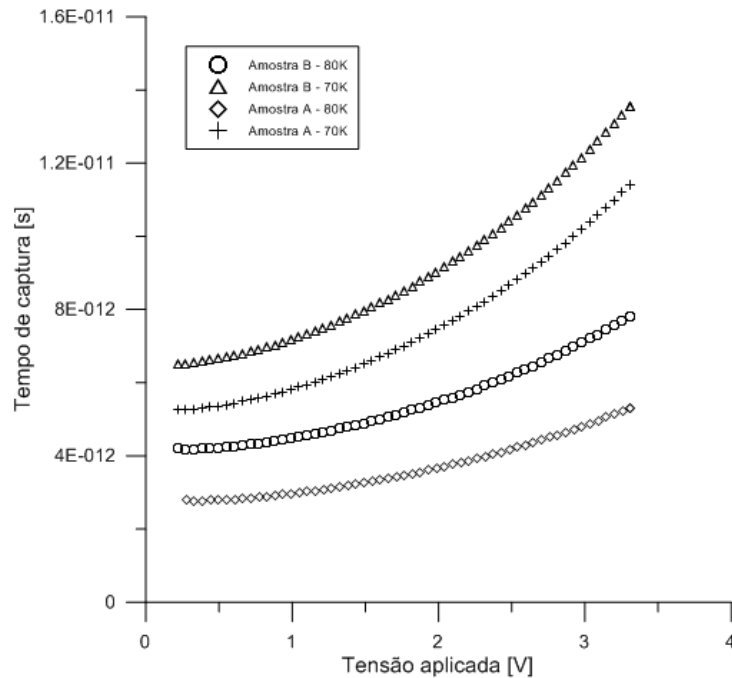
A amostra trabalhada por Steinkogler et al (2003) de InGaAs/GaAs possui mobilidade maior do que as amostras trabalhadas nesse artigo, cerca de $6100 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Logo, os valores obtidos de ganho de ruído e tempo de captura deverão ser maiores que, o que obtivemos, isso por que maiores mobilidades significam menor probabilidade de espalhamento, e conseqüentemente maior tempo de captura. O tempo de captura obtida por Steinkogler et al (2003), está mostrada abaixo.

Figura 26 – Tempo de captura (τ_c) e tempo de trânsito (τ_{trans}) obtidos por Steinkogler et al (2003).



Fonte: (STEINKOGLER et al, 2003).

Figura 27 – Tempo de captura (τ_c) obtido com mobilidade igual a $1000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$.



Fonte: Autor.

Na figura 26, o autor apresenta o tempo de captura e o tempo de trânsito, e na figura 27 o resultado do tempo de captura obtido com mobilidade igual a $1000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. O tempo de

trânsito é referente ao tempo de travessia sobre todo o dispositivo. Como Steinkogler et al (2003) trabalha com campos elétricos de alta intensidade o efeito da saturação na velocidade pode ser observado no comportamento crescente do tempo de trânsito com o campo elétrico aplicado. O tempo de captura para um campo elétrico de 2kV/cm (cerca de 1V) o tempo de captura foi de 8ps para a amostra de InGaAs/GaAs. A amostra de AlGaAs/GaAs possui menor mobilidade e espera-se um menor tempo de captura, como se observa na figura 27. Pelo método das equações de taxa apresentado, obtivemos um valor entre 4ps e 14ps para uma tensão aplicada de 0,6V. Logo, os valores obtidos pelo método das equações de taxa estão coerentes fisicamente.

6 COMENTÁRIOS, CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

O método apresentado nesse trabalho visa obter por meio de um processo autoconsistente algumas características próprias do material e do dispositivo. Essas características são: tempo médio de excitação térmica de elétrons no poço quântico, tempo médio de captura de elétrons e probabilidade de captura de elétrons que estão em trânsito pela região acima da barreira. Tais parâmetros não são triviais de se medir experimentalmente.

O método autoconsistente utiliza de equações de taxa com os estados discretos dos poços quânticos, de uma equação para cálculo de ganho de ruído (dada em literatura) e definições (para a probabilidade de captura e ganho) dadas também em literatura. Os principais dados de entrada do método são medidas experimentais de corrente de escuro em função da tensão aplicada. Por considerarmos uma variação espacial linear da energia da banda, estamos considerando que a tensão aplicada ao dispositivo é baixa ($<0,6V$).

Os resultados obtidos com o processo autoconsistente proposto estão satisfatoriamente condizentes com as expectativas físicas dos parâmetros desejados. Existe uma dificuldade de se comparar tais resultados quantitativamente com a literatura devido à escassez de dados dos parâmetros com tensão aplicada, exceto para a probabilidade de captura, que foi devidamente comparada e mostra-se compatível com aquelas apresentadas em (LEVINE, 1992).

Um próximo passo para este trabalho será refinar as considerações físicas para o cálculo, como por exemplo: incluir tratamento individual dos demais estados que não apenas o primeiro estado excitado, considerações de campo elétrico não uniforme com a tensão aplicada, individualização dos mecanismos de espalhamento, dentre outros. Atualmente, não consideramos um tempo transiente entre o elétron excitado do poço, e a corrente injetada no dispositivo devido ao mecanismo de ganho. Esse “atraso” irá acrescentar mais um termo em nossa equação de taxa e que é evidente para tratamento de dispositivos sujeitos a aplicação de altas tensões (STEINKOGLER et al, 2003). Atualmente este método é aplicável somente a estruturas de poços retangulares com barreiras simétricas, outras considerações devem ser feitas para abranger outras possíveis estruturas.

Os trabalhos futuros descritos nos parágrafos acima serão tema de proposta para trabalho em mestrado.

Para divulgação dos resultados aqui apresentados estão sendo preparadas algumas propostas de apresentação em congressos da área e possivelmente um artigo para publicação em periódico.

REFERÊNCIAS

BECK, W.A. Photoconductive gain and generation-recombination noise in multiple quantum well infrared detectors, **Applied Physics Letters**, v. 63, p. 3589-3592, Out. 1993.

DONATI, S. **Photodetectors: Devices and Applications**. New Jersey: Prentice-Hall, 1999. 432 p.

ERSHOV, M.; LIU, H. C. Low-frequency noise-gain and photocurrent gain in quantum well infrared photodetectors, **Journal of Applied Physics**, v. 86, p. 6580-6586, Set. 1999.

FRAENKEL, A. et al Vertical drift mobility of excited carriers in multi quantum well structures, **Journal of Applied Physics**, v. 75, p. 3536-3544, Dez. 1994.

GRIFFITHS, D. J. **Introduction to electrodynamics** 3 ed. New Jersey: Prentice-hall Inc., 1999, 576 p.

GUNAPALA, S.D.; BANDARA, S.V.; Significance of the first excited state position in quantum well infrared Photodetectors, **Microelectronics Journal**, v. 30, p. 1057-1065, Out. 1999.

HAMANN, R. **Telas quânticas**: elas ainda vão substituir as atuais. Disponível em: <http://www.tecmundo.com.br/qd-led/8895-telas-quanticas-elas-ainda-vao-substituir-as-atuais.htm>. Acesso em: 10/10/2013.

HARRISON, P. **Quantum wells, wires and dots**: theoretical and computational physics. 1 ed. San Francisco: John Wiley and Sons, 2005. 480 p.

INDJIN, D. et al Self-consistent scattering theory of transport and output characteristics of quantum cascade lasers, **Journal of Applied Physics**, v. 91, p. 9019-9027, Maio 2002.

LEVINE, B. F. et. al. Photoexcited escape probability, optical gain and noise in quantum well infrared Photodetectors, **Journal of Applied Physics**, v. 72, p. 4429-4444, Jul. 1992.

LEVINE, B. F. Quantum-well infrared photodetectors, **Journal of Applied Physics**, v. 74, p. 1-71, Jan. 1993.

LIU, H. C.; Noise gain and operating temperature of quantum well infrared photodetectors, **Applied Physics. Letters.**, v. 60, p. 1507-1510, Jan. 1992.

LIU, H. C. Dependence of absorption spectrum and responsivity on the upper state position in quantum well intersubband photodetectors, **Journal of Applied Physics**, v. 73, p. 3062-3072, Maio 1993.

LHUILIER, E. Ultimate performance of quantum well infrared photodetectors in the tunneling regime, **Infrared Physics & Technology**, v. 59, p. 132-137, Jul. 2009.

PEDROSO, D.M., VIEIRA, G.S., PASSARO, A. Analysis of an inverse problem in QWIP device. In: International Symposium on applied Electromagnetics and mechanics, 16, 2013, Quebec City Canada. **Annals of 16th Symposium on Applied Electromagnetics and Mechanics**, Quebec City: Laval University, 2013.

ROGALSKY, A. **Infrared Detectors**, 2 ed. Boca Raton: Taylor and Francis Group, 2011. 900 p.

SCHNEIDER, H.; LIU, H. C. **Quantum Well Infrared Detectors: physics and application**. Heidelberg: Springer, 2007, 256 p.

SKATRUD, D. D. et al. **Uncooled Infrared Imaging Arrays and Systems**. San Diego: Academic Press, 1997. 341 p.

STREEMAN, B. G. **Solid State Electronic Devices**, 6 ed., New Jersey: Pearson Education, 2006. 604 p.

SZE, S. M., KWOK, K. N. **Physics of semiconductor devices**, 3 ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2007. 763 p.

STEINKOGLER, S et al. Determination of the electron capture time in quantum-well infrared photodetectors using time-resolved photocurrent measurements, *Applied Physics Letters*, v. 82, p. 3925-3927, Jun. 2003.

SVELTO, O. **Principles of lasers**. 5 ed. Heidelberg: Springer, 2010. 620 p.

TANAKA, R. Y. et al. Computer program for analysis and design of nanostructured semiconductor devices. In: International Microwave and Optoelectronic Conference, 15, 2013, Rio de Janeiro. **Proceedings of 15th International Microwave and Optoelectronic Conference**, Rio de Janeiro, 2013.

THIBAudeau, L.; BOIS, P.; DUBOZ, J. Y. A self-consistent model for quantum well infrared photodetectors, **Journal of Applied Physics**, v. 79, p. 446-454, Jan. 1996.

UNUMA, T. et al. Intersubband absorption linewidth in GaAs quantum wells due to scattering by interface roughness, phonons, alloy disorder, and impurities, **Journal of Applied Physics**, v. 93, p. 1586-1598, Maio 2003.

VIEIRA, G. S. Resonantly enhanced photon-assisted tunneling in a multiple quantum well superlattice, **Physical Review B**, v. 58, p. 7136-7140, Jul. 1998.

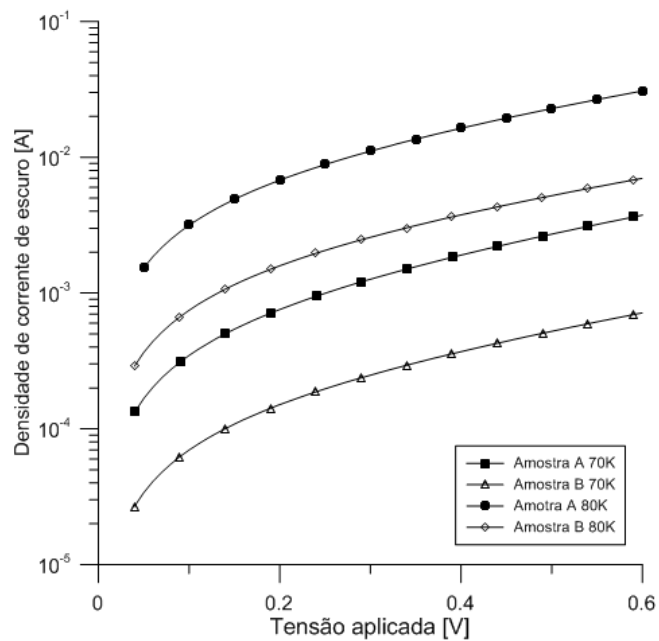
ZINOV'EV, V .E. et al. Mathiessen rule and high temperature electrical resistivity of solid solutions of silicon in iron, **Soviet Physics JETP**, v. 36, p. 1174-1176, Jun. 1973.

ANEXO - MEDIDAS DE CORRENTE DE ESCURO NAS AMOSTRAS A E B

As medidas experimentais foram obtidas pela equipe de trabalho do Laboratório de Caracterização de Dispositivos Semicondutores (LCDS) no Instituto de Estudos Avançados (IEAv) do DCTA em São José dos Campos.

No gráfico apresentado, os símbolos identificadores das curvas estão colocados a cada cinco pontos experimentais dados. A figura 28 fornece o valor médio das medidas obtidas.

Figura 28 – Medidas experimentais de densidade de corrente de escuro obtidas para as amostras A e B a temperaturas de 70 e 80K.



Fonte: Laboratório de Caracterização de Dispositivos Semicondutores, IEAv DCTA