



Ministério da
Ciência e Tecnologia



INPE-15354-TDI/1390

METODOLOGIA COMPUTACIONAL PARA PROJETO DE DISPOSITIVOS SEMICONDUTORES NANOESTRUTURADOS

Roberto Yuji Tanaka

Dissertação do Curso de Pós-Graduação em Computação Aplicada, orientada pelos
Drs. Stephan Stephany e Angelo Passaro, aprovada em 15 de agosto de 2008.

Registro do documento original:

<<http://urlib.net/sid.inpe.br/mtc-m18@80/2008/07.21.13.26>>

INPE
São José dos Campos
2008

PUBLICADO POR:

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE

Gabinete do Diretor (GB)

Serviço de Informação e Documentação (SID)

Caixa Postal 515 - CEP 12.245-970

São José dos Campos - SP - Brasil

Tel.:(012) 3945-6911/6923

Fax: (012) 3945-6919

E-mail: pubtc@sid.inpe.br

CONSELHO DE EDITORAÇÃO:**Presidente:**

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação Observação da Terra (OBT)

Membros:

Dr^a Maria do Carmo de Andrade Nono - Conselho de Pós-Graduação

Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho - Centro de Tecnologias Especiais (CTE)

Dr^a Inez Staciarini Batista - Coordenação Ciências Espaciais e Atmosféricas (CEA)

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Dr. Ralf Gielow - Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos (CPT)

Dr. Wilson Yamaguti - Coordenação Engenharia e Tecnologia Espacial (ETE)

BIBLIOTECA DIGITAL:

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação de Observação da Terra (OBT)

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Jefferson Andrade Ancelmo - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Simone A. Del-Ducca Barbedo - Serviço de Informação e Documentação (SID)

REVISÃO E NORMALIZAÇÃO DOCUMENTÁRIA:

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Marilúcia Santos Melo Cid - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Yolanda Ribeiro da Silva Souza - Serviço de Informação e Documentação (SID)

EDITORAÇÃO ELETRÔNICA:

Viveca Sant´Ana Lemos - Serviço de Informação e Documentação (SID)



Ministério da
Ciência e Tecnologia



INPE-15354-TDI/1390

METODOLOGIA COMPUTACIONAL PARA PROJETO DE DISPOSITIVOS SEMICONDUTORES NANOESTRUTURADOS

Roberto Yuji Tanaka

Dissertação do Curso de Pós-Graduação em Computação Aplicada, orientada pelos
Drs. Stephan Stephany e Angelo Passaro, aprovada em 15 de agosto de 2008.

Registro do documento original:

<<http://urlib.net/sid.inpe.br/mtc-m18@80/2008/07.21.13.26>>

INPE
São José dos Campos
2008

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

153m Tanaka, Roberto Yuji.

Metodologia computacional para projeto de dispositivos semicondutores nanoestruturados/ Roberto Yuji Tanaka. – São José dos Campos: INPE, 2008.

107p. ; (INPE-15354-TDI/1390)

Dissertação (Mestrado em Computação Aplicada) – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, 2008.

1. Heteroestruturas semicondutoras. 2. Métodos dos elementos finitos. 3. Nanotecnologia. 4. Métodos numéricos. 5. Autoconsistência. I. Título.

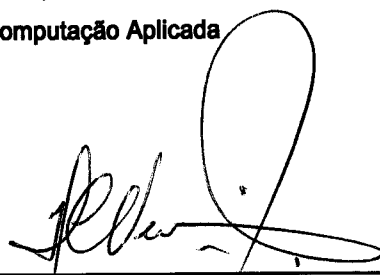
CDU 551.58

Copyright © 2008 do MCT/INPE. Nenhuma parte desta publicação pode ser reproduzida, armazenada em um sistema de recuperação, ou transmitida sob qualquer forma ou por qualquer meio, eletrônico, mecânico, fotográfico, microfílmico, reprográfico ou outros, sem a permissão escrita da Editora, com exceção de qualquer material fornecido especificamente no propósito de ser entrado e executado num sistema computacional, para o uso exclusivo do leitor da obra.

Copyright © 2008 by MCT/INPE. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, microfilming, recording or otherwise, without written permission from the Publisher, with the exception of any material supplied specifically for the purpose of being entered and executed on a computer system, for exclusive use of the reader of the work.

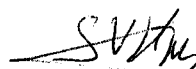
Aprovado (a) pela Banca Examinadora
em cumprimento ao requisito exigido para
obtenção do Título de Mestre em
Computação Aplicada

Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho



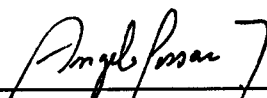
Presidente / INPE / São José dos Campos - SP

Dr. Stephan Stephany



Orientador(a) / INPE / SJC Campos - SP

Dr. Angelo Pássaro



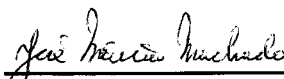
Orientador(a) / IEAv/CTA / SJC Campos - SP

Dr. Joaquim José Barroso de Castro



Membro da Banca / INPE / SJC Campos - SP

Dr. José Márcio Machado



Convidado(a) / UNESP/SJRP / São José do Rio Preto - SP

Aluno (a): Roberto Yuji Tanaka

São José dos Campos, 15 de agosto de 2008

“I,
a universe of atoms,
an atom of the universe.”

Richard P. Feynman (1918-1988)

What Do You Care What Other People Think?

The Value of Science (p. 243)

W.W. Norton & Company, Inc. New York, New York, USA.1988

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos que de alguma forma, mesmo que indiretamente, contribuíram para o andamento deste trabalho. Em particular, agradeço ao Dr. Angelo Passaro, meu orientador científico, cujas excepcionais qualidades científicas e humanas tornaram a realização deste trabalho numa tarefa bem mais empolgante. Tenho a certeza de que sem seus ensinamentos e conselhos esta dissertação não teria sido realizada. À Dra. Nancy Mieko Abe, cujas contribuições foram várias e inestimáveis. Ao Dr. Stephan Stephany, meu orientador acadêmico, cujos incentivos foram determinantes para o bom termo deste trabalho. Ao Dr. Gustavo Soares Vieira que tornou, “menos nebulosa”, a física quântica do problema. Ao Dr. José Maria Villas-Bôas que forneceu o código fonte do Método de Expansão Hamiltoniana e do cálculo de massa efetiva e energia potencial de bandas de materiais semicondutores. Ao Dr. Ademar Muraro Jr. e ao Me. Onofre Felix de Lima Neto pelas produtivas discussões. Agradeço também ao meu amor, Vanusa Candia de Souza, pela compreensão, carinho e paciência.

Finalmente, dedico este trabalho à minha irmã Marina Tanaka e à minha mãe, Toshiko Tanaka pelo forte apoio e incentivo. Sem elas eu não teria sequer me graduado. À minha sobrinha, Jaqueline Saiuri Tanaka, que vi crescer desde pequena. Dedico também à memória do meu pai, Seishi Tanaka, que cultivou em mim o gosto pela ciência.

RESUMO

Nanoestruturas semicondutoras como poços, fios e pontos quânticos possuem inúmeras aplicações de interesse tecnológico. Como exemplo pode-se citar sua utilização em lasers, detectores de infravermelho, transistores, spintrônica, na medicina e, prevê-se que, futuramente, sejam essenciais na computação quântica. O domínio dessa tecnologia é visado por diversos países, sendo que no Brasil, a fabricação e caracterização de dispositivos a poços e pontos quânticos vem sendo realizados por meio de uma cooperação entre várias universidades e institutos de pesquisa do país. O presente trabalho busca contribuir para o projeto e análise dessas nanoestruturas para fotodetectores de infravermelho, complementando a capacitação já existente para a sua fabricação e caracterização. Foi desenvolvida uma metodologia computacional com códigos que permitem projetar e analisar essas nanoestruturas semicondutoras por meio do Método dos Elementos Finitos. Também foram implementados e validados cálculos autoconsistentes do perfil de energia da banda de condução dessas nanoestruturas alterado pelas cargas elétricas adicionadas por dopantes. Os resultados dos testes de validação e de outras aplicações são apresentados. Embora o foco do trabalho sejam fotodetectores de infravermelho, a metodologia proposta pode ser usada para modelar nanoestruturas semicondutoras de outros dispositivos. A metodologia desenvolvida neste trabalho servirá como base para o projeto ótimo de fotodetectores de infravermelho a poços quânticos.

COMPUTATIONAL METHODOLOGY FOR THE DESIGN OF NANOSTRUCTURED SEMICONDUCTOR DEVICES

ABSTRACT

Semiconductor nanostructures like quantum wells, quantum wires and quantum dots have many technological applications, such as lasers, infrared photodetection, transistors, spintronics, medical imaging. It is foreseen that such nanostructures will have a fundamental role in quantic computing. Several countries do research on the design and manufacturing of semiconductor nanostructures. In Brazil, this research is being carried out jointly by universities and research institutes. The current work intends the contribute for the design and analysis of nanostructures for infrared photodetector devices, enhancing the existing knowledge about their characterization and manufacture. A methodology was implemented by means of computer codes for the design and analysis of semiconductor nanostructures using the Finite Element Method. Codes for the autoconsistent calculation of the energy profile of the conductive band of the considered nanostructures were also implemented considering the influence of electrical charges due to the addition of dopants. Evaluation test results and some applications of the method are shown. The proposed methodology focuses nanostrucures for infrared photodetectors, but can be employed in other nanostructured devices. The presented methodology will be used for the optimal design of quantum well infrared photodetectors.

SUMÁRIO

Pág.

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

LISTA DE SÍMBOLOS

1	INTRODUÇÃO	23
2	DISPOSITIVOS SEMICONDUTORES NANOESTRUTURADOS	29
2.1	Estrutura Cristalina e Bandas de Semicondutores	32
2.2	Poços, Fios e Pontos Quânticos	33
2.3	Dopantes	38
2.4	Densidade de Estados	40
2.5	Autoconsistência	41
2.6	Detectores de Infravermelho	45
3	METODOLOGIA E FORMULAÇÃO	49
3.1	Normalização das Equações Diferenciais	54
3.1.1	Normalização da Equação de Schrödinger	54
3.1.2	Normalização da Equação de Poisson	55
3.1.3	Cálculo da Força de Oscilador	57
4	PROGRAMA COMPUTACIONAL	59
5	RESULTADOS	67
5.1	Resultados de Validação	67
5.1.1	Validação do Módulo 1D para Poços Quânticos	67
5.1.2	Validação do Módulo 2D para Fios Quânticos	69
5.1.3	Validação do Módulo 2D com Simetria Axial para Pontos Quânticos ...	75
5.1.4	Validação do Cálculo Autoconsistente para Poços Quânticos	77
5.2	Resultados	88
5.2.1	Múltiplos Poços Quânticos Assimétricos	88
5.2.2	Poço-Ponto Quântico Acoplados	90
5.2.3	Poços Quânticos Acoplados	93
6	CONCLUSÕES, CONTRIBUIÇÕES E TRABALHOS FUTUROS	97
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	101

LISTA DE FIGURAS

2.1 – Estrutura cristalina.....	32
2.2 – Potencial unidimensional $V(z)$ da heterojunção.	33
2.3 – (a) Heteroestrutura formada com os materiais semicondutores A e B. (b) representação da banda eletrônica da heteroestrutura ao longo do eixo z.....	34
2.4 – (a) Quatro primeiros estados do poço quadrado infinito. (b) Os gráficos das densidades de probabilidade correspondentes.....	35
2.5 – Vista expandida de fio quântico simples.....	38
2.6 – Pontos quânticos. (a) Vista expandida de ponto quântico simples. (b) Pontos quânticos.....	38
2.7 – Esquema de dopagem tipo n. Dopantes de arsênio no silício.	39
2.8 – Fluxograma da resolução autoconsistente das energias das subbandas.....	44
2.9 – Esquema das transições interbanda e intrabanda.	46
4.1 – Esquema geral da biblioteca de classes SDK-LEVSOFT.....	59
4.2 – Diagrama de classes derivadas de <i>CLevPhenomenon</i> . As classes marcadas na cor cinza fazem parte do SDK-LEVSOFT enquanto que as apresentadas com fundo branco foram criadas neste trabalho e inseridas na biblioteca.	61
4.3 – Diagrama de classe da derivada de <i>CProject_Solver</i> . As caixas cinzas são classes existentes e as caixas brancas, classes criadas nesse trabalho.....	62
4.4 – Tela principal do QWS.	63
4.5 – Janela para definição de materiais e tamanho de camadas.....	64
4.6 – Janela para análise de resultados.....	64
4.7 – Definição dos parâmetros para execução do cálculo por elementos finitos.	65
5.1 – Autoestados para poços quânticos simples de comprimento (a) 50 Å e (b) 300 Å, obtidos com o programa QWS.....	69
5.2 – Precisão da solução MEF de ordem 1 em função da densidade da malha, comparada com as computadas por HEF e em (MACHADO et al., 2000). Caso do poço com 300 Å de largura. (a) Energia do estado fundamental. (b) Energia do sexto autoestado.....	69
5.3 – Modelo bidimensional do poço quântico simples. (a) Aplicação das condições de contorno. (b) Atribuição de materiais.....	70
5.4 – Detalhes das malhas utilizadas no poço de largura 300Å.....	71
5.5 – Soluções do poço quântico simples.....	72
5.6 – Modelo geométrico do fio quântico. (a) Atribuição de materiais. (b) Atribuição das condições de contorno.	73
5.7 – (a) Autovalores de um fio quântico em função da altura da barreira. (b) Detalhe de (a) evidenciando a quebra das degenerescências.....	74
5.8 – Gráfico do autoestado (3,1).....	75
5.9 – Autovalores e autofunções para pontos quânticos de diferentes formatos.	76
5.10 – Modelo geométrico do ponto quântico em forma de lente. (a) Malha de elementos finitos. (b) Condições de contorno.	76
5.11 – Esquema do caso do poço quântico simples com dopagem modulada.	78
5.12 – Formato final do potencial da banda de condução, valores de energia de elétrons e energia de fermi para densidade de dopantes de 10^{16} cm^{-3} . (a) Resultado obtido pelo QWS. (b) Resultado de (RAM-MORAN, 2002).	78
5.13 – Formato final do potencial da banda de condução, valores de energia de elétrons e energia de fermi para densidade de dopantes de 10^{17} cm^{-3} . (a) Resultado obtido pelo QWS. (b) Resultado de (RAM-MORAN, 2002).	79
5.14 – Formato final do potencial da banda de condução, valores de energia de elétrons e energia de fermi para densidade de dopantes de 10^{18} cm^{-3} . (a) Resultado obtido pelo QWS. (b) Resultado de (RAM-MORAN, 2002).	79
5.15 – Formato final do potencial da banda de condução, valores de energia de elétrons e energia de fermi para densidade de dopantes de 10^{19} cm^{-3} . (a) Resultado obtido pelo QWS. (b) Resultado de (RAM-MORAN, 2002).	80

5.16 – Diagrama de alinhamento da banda de condução.	81
5.17 – Variação da densidade de carga de elétrons no poço em função da largura do espaçador.	82
5.18 – Gráfico dos resultados obtidos para um poço de 150 Å e $w=300$ Å. (a) Resultado obtido com o código implementado neste trabalho. (b) Resultado de (CAETANO, 2003).	82
5.19 – Variação das energias dos autoestados, da energia de Fermi e do tamanho da região de depleção em função da largura do espaçador w	83
5.20 – Perfil da energia da banda de condução do sistema de poços quânticos assimétricos acoplados (HUANG; et al., 1995).	84
5.21 – Diferença de energia entre o primeiro e o segundo estado em função da largura do poço da esquerda.	85
5.22 – Esquema do poço quântico duplo simétrico.	86
5.23 – Gráfico dos resultados, autoestados obtidos. (a) Resultado obtido com o código implementado neste trabalho. (b) Resultado de (UNGAN; et al, 2005).	87
5.24 – Autoestados do caso de multipoços quânticos.	89
5.25 – Detalhe da região de interesse.	89
5.26 – Precisão da solução MEF de ordem 1 em função da densidade de elementos da malha, comparada com as computadas por HEF. (a) variação da energia do estado fundamental. (b) variação da energia do terceiro autoestado.	90
5.27 – Detalhe da malha na região do ponto quântico.	91
5.28 – Autoestados do sistema poço ponto quântico acoplado. (a) Primeiro estado do ponto quântico. (b) Primeiro estado do poço quântico.	92
5.29 – Sistema de dois poços acoplados a um poço central.	94
5.30 – Sistema de quatro poços acoplados a um poço central.	94
5.31 – Sistema de seis poços acoplados a um poço central.	95

LISTA DE TABELAS

2.1 – Classificação do espectro da radiação infravermelha.	46
3.1 – Valores de constantes utilizadas no trabalho.	55
5.1 – Valores dos parâmetro do material.	68
5.2 – Autovalores para um poço de 300 Å de comprimento, massa efetiva $m^*=(0,067+0,083x)m_0$, onde $x=0,32$ é a quantidade de Al. A espessura da barreira é de 300 Å.	68
5.3 – Autovalores, em eV, calculados pelo MEF 2D com duas malhas diferentes, comparadas com a referência (MACHADO et al., 2000).	71
5.4 – Valores dos parâmetro do material.	73
5.5 – Níveis de energia do elétron no fio quântico GaAs/Al _{0,37} Ga _{0,63} As de 10x5nm ²	74
5.6 – Energia do estado fundamental do elétron no ponto quântico Ga _{0,47} In _{0,53} As/InP.	75
5.7 – Autovalores, em eV, para o caso do poço simples com densidade de dopantes de 10 ¹⁹	80
5.8 – Valores dos parâmetro do material.	81
5.9 – Valores dos parâmetro do material calculados no QWS.	85
5.10 – Valores de parâmetro dos materiais, calculados pelo QWS.	86
5.11 – Valores de energia dos autoestados.....	87
5.12 – Valores dos parâmetro do material calculados pelo QWS.	88
5.13 – Autovalores para o sistema de múltiplos poços quânticos.	89
5.14 – Autovalores para o sistema de múltiplos poços quânticos calculados com o MEF 1D e com o MEF 2D-Axial.....	92

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

Al	Elemento químico Alumínio
As	Elemento químico Arsênio
Ga	Elemento químico Gálio
exp	Função exponencial
HEMT	“High Electron Mobility Transistor”
In	Elemento químico Índio
MEF	Método dos Elementos Finitos
MQW	“Multiple Quantum Well”
N	Elemento químico Nitrogênio
QDIP	“Quantum Dot Infrared Photodetector”
QWIP	“Quantum Well Infrared Photodetector”
QWS	“Quantum Well Software”
Si	Elemento químico Silício
WKB	Método de “Wentzel-Kramers-Brillouin”

LISTA DE SÍMBOLOS

e	Carga elementar
D_d	Densidade de dopantes
E	Energia de partículas em eV
E_d	Energia de doação do elétron de valência em eV
E_F	Energia de Fermi
E_g	Largura da banda de energia proibida em eV
ε	Permissividade elétrica
γ	Elemento do Método dos Elementos Finitos
h	Constante de Planck
$\hbar$	Constante de Planck sobre 2π
k_B	Constante de Boltzmann
λ	Comprimento de onda
m^*	Massa efetiva da partícula
N	Função de Base do Método dos Elementos Finitos
n	Quantidade de autoestados
n_d	Total de cargas positivas
n_e	Total de cargas negativas
n_p	Número de pontos nodais de um elemento
P	Peso do Método dos Resíduos Ponderados
ψ	Função de onda
ψ^*	Complexo conjugado da função de onda
r	Coordenadas da partícula
R	Resíduo do Método dos Resíduos Ponderados
ρ	Densidade de carga total
ρ_d	Densidade de carga de dopantes
ρ_e	Densidade de carga de elétrons
Ω	Domínio do problema
T	Temperatura em Kelvin
θ	Função degrau de Heaviside
V	Energia potencial relativa em eV
x	Eixo da coordenada cartesiana x
y	Eixo da coordenada cartesiana y
z	Eixo da coordenada cartesiana z

1 INTRODUÇÃO

Nanoestruturas semicondutoras como poços, fios e pontos quânticos possuem inúmeras aplicações de interesse tecnológico. Como exemplo pode-se citar sua utilização em lasers, detectores de infravermelho, transistores, spintrônica, na medicina e, prevê-se que, futuramente, sejam essenciais na computação quântica. O domínio dessa tecnologia é visado por diversos países e, no Brasil, há um grande interesse no desenvolvimento de detectores de infravermelho nacionais a poços e pontos quânticos pois esses dispositivos estão sujeitos a rígidas restrições de importação. Pesquisas para o desenvolvimento de processos de fabricação e caracterização de fotodetectores de infravermelho a poços e pontos quânticos estão, atualmente, em andamento, baseadas na cooperação entre várias universidades e institutos de pesquisa do País: Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio), Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Instituto de Estudos Avançados (IEAv/CTA), Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) e Universidade de São Paulo-São Carlos (USP-São Carlos). Esse esforço já permitiu o desenvolvimento de sensores a poços quânticos com respostas comparáveis às dos produtos lançados no mercado internacional e dos primeiros resultados com o uso da tecnologia de pontos quânticos (SOUZA et al., 2007). Deve-se ressaltar que esta última tecnologia ainda não alcançou o amadurecimento necessário para a criação de produtos.

Para determinar as características dos dispositivos a poços, fios e pontos quânticos é essencial que se tenha um método de cálculo das estruturas de banda de semicondutores. Entre esses métodos, pode-se citar o método da aproximação da função envelope (HARRISON, 2005), (KADUKI; BATTY, 2000), (DARGAM et al., 1997), (ALTARELLI; EKENBERG, 1985), (BASTARD, 1981), (WHITE; SHAM, 1981), o modelo “Tight-Binding” (SCHULMAN; CHANG, 1986) e a teoria “Density Functional” (BAUER; ANDO, 1986). No estudo de poços quânticos, a Função Envelope baseada na aproximação da massa

efetiva é um dos métodos mais utilizados. Ela é uma adaptação da aproximação k.P (VURGAFMAN et al., 2001) usada na teoria da estrutura de banda de semicondutores tipo “bulk” e fornece uma descrição razoável das subbandas de condução e de valência dos semicondutores a poços quânticos, principalmente para dimensões de poço e barreiras maiores que 5 nm (DARGAM et al., 1997). Dentro da aproximação de massa efetiva, o cálculo dos autoestados (autovalores e autofunções) se resume na resolução da equação de Schrödinger. Vários métodos computacionais tem sido estudados e desenvolvidos utilizando a Função Envelope com aproximação de massa efetiva, tais como o método variacional, o método da Matriz de Transferência, a aproximação W.K.B. (“Wentzel-Kramers-Brillouin”) e o método de resolução de “Kronig–Penney”. Para citar alguns exemplos: (BALDERESCHI; LIPARI, 1973) utiliza o método variacional no cálculo numérico dos estados das impurezas rasas aceitadoras em heteroestruturas semicondutoras com bandas de valência degeneradas; (ANDREANI et al., 1987) utiliza também o método variacional para calcular as subbandas de energia dos buracos de um poço quântico de GaAs/Al_xGa_(1-x)As; (RAM-MOHAN et al., 1988) apresenta o método Matriz de Transferência para o cálculo das funções de onda e dos valores de energia das bandas de duas heteroestruturas, uma de GaAs/Al_xGa_(1-x) As e a outra de HgTe/CdTe; (JONSSON; ENG, 1990) aplica um algoritmo baseado também no método da Matriz de Transferência para resolver a equação de Schrödinger em poços quânticos de potenciais arbitrários; já (SINGH, 1986) utiliza o método de Monte Carlo para resolver o problema variacional em poços quânticos de potenciais arbitrários. Uma explicação detalhada dos métodos de Matriz de Transferência, da aproximação W.K.B. (Wentzel-Kramers-Brillouin), e do método de Kronig-Penney pode ser encontrada em (CHOI, 1997).

Muitas estruturas semicondutoras são dopadas com o intuito de alterar a sua condutividade. Estes dopantes acrescentam elétrons e/ou lacunas que alteram o perfil de energia potencial da banda de condução e o cálculo destas energias passa a ser feita por meio de um processo iterativo chamado cálculo

autoconsistente. Em geral, técnicas numéricas mais complexas, tais como o método de diferenças finitas ou o método de elementos finitos (método adotado neste trabalho), são utilizadas para o cálculo autoconsistente. Além disso, grande parte dos trabalhos com cálculos autoconsistentes consideram a região de depleção¹ fixa, igual ao tamanho da região dopada e se concentram em estruturas específicas, tais como heterojunções simples de materiais semicondutores (TAN et al., 1990), poço quântico simples (BROUNKOV et al., 1996), poços quânticos duplos assimétricos (LYO, et al., 1998) e simétricos (SAHU; PATNAIK, 2000). Atualmente, há trabalhos que já tratam problemas autoconsistentes em múltiplos poços quânticos arbitrários (SAFONOVA et al., 2004) e calculam a região de depleção (TRELLAKIS; et al., 1997), (RAM-MOHAN et al., 2004).

Nesse contexto, este trabalho propõe uma metodologia computacional para o projeto e análise de dispositivos nanoestruturados baseados em poços, fios e pontos quânticos, aplicados a fotodetetores de infravermelho. Utiliza-se o modelo k.P com aproximação de massa efetiva, que se resume na resolução da Equação de Schrödinger, implementada pelo Método dos Elementos Finitos.

Com isso, espera-se ampliar a capacitação já existente no País para fabricação dos dispositivos com a utilização de técnicas mais sofisticadas para o projeto e a análise dos dispositivos assistidos por computador. Dentre os aspectos importantes que foram abordados nos cálculos computacionais para o projeto destes dispositivos encontram-se a avaliação dos estados eletrônicos em poços quânticos, os cálculos autoconsistentes, incluindo as técnicas mais modernas como o cálculo da região de depleção, e as forças de oscilador para absorção de fótons.

¹ Região em que os átomos das impurezas se ionizam, doando ou recebendo elétrons, dependendo do tipo de impureza introduzido.

Futuramente, pretende-se utilizar este software como base para um trabalho de otimização destas heteroestruturas. É interessante ressaltar que esse código computacional não se restringe apenas ao estudo dos fotodetectores de infravermelho, podendo ser utilizado para análise de outros dispositivos nanoestruturados baseados em poços, fios e pontos quânticos.

O Método dos Elementos Finitos é um método efetivo e amplamente utilizado em várias áreas de pesquisa e em Engenharia, capaz de produzir resultados bastante confiáveis. A adoção desse método neste trabalho se deve não só à facilidade com que o método trata geometrias complexas, com obtenção de resultados confiáveis, mas também se deve à familiaridade com o método por já ter sido aplicado em trabalhos anteriores (PASSARO et al., 2006) e por estar implementado no framework SDK-LEVSOFT, uma biblioteca multifísica desenvolvida no Laboratório de Engenharia Virtual do IEAv/CTA, orientada a objeto, escrita em C++ e multiplataforma (pode ser utilizado com os sistemas operacionais Windows e Linux, em máquinas com um processador ou em clusters). O SDK-LEVSOFT engloba classes para manipular vetores, listas, matrizes esparsas, métodos de resolução de sistemas lineares com e sem pré-condicionamento, dois métodos de resolução de sistemas de autovetores, um baseado na biblioteca ARPACK e outro no MATLAB, além das classes para elementos finitos. Esta biblioteca é utilizada para resolver diversos tipos de problemas físicos tais como eletrostático, transferência de calor, magnetismo, óptica, etc.

Esta dissertação é organizada em seis capítulos. No Capítulo 1 foi apresentada uma introdução geral da área em que este trabalho de mestrado se insere, com citação a referências de revisão e outras que indicam o estado da arte. No Capítulo 2 são apresentados os conceitos básicos, informações relativas a poços quânticos, estados de energia, dopagem, transições de energia, cálculo autoconsistente, e como isto está relacionado com a energia que se pretende medir na região do infravermelho. O Capítulo 3 apresenta a metodologia e formulação numérica utilizados neste trabalho, a formulação via Método de

Elementos Finitos e a normalização das equações diferenciais utilizadas nessa dissertação. O Capítulo 4 apresenta o programa de computador desenvolvido, denominado QWS, e o diagrama de classes referente à implementação. O Capítulo 5 apresenta os resultados e os testes de validação e no Capítulo 6 encontram-se a conclusão, as contribuições desta dissertação e previsão de trabalhos futuros.

2 DISPOSITIVOS SEMICONDUTORES NANOESTRUTURADOS

A mecânica quântica, desenvolvida no início do século 20, possibilitou compreender diversos fenômenos no nível atômico e subatômico. Esses fenômenos, tais como, tunelamento quântico e confinamento eletrônico em poços, fios e pontos quânticos, são amplamente utilizados no desenvolvimento de tecnologias de semicondutores, circuitos e componentes eletrônicos. Durante a década de 70, o desenvolvimento de novos métodos de crescimento de heteroestruturas possibilitou a construção de poços quânticos uniformes, com baixa rugosidade. O contínuo aperfeiçoamento dessas técnicas de fabricação foi fundamental para o crescente uso da tecnologia de nanoestruturas semicondutoras em diversos tipos de dispositivos devido às suas propriedades eletrônicas (SOLLNER et al., 1983), (BONNEFOI et al., 1985) e optoeletrônicas (MILLER et al., 1985). Como exemplos, (ROSENBERG et al., 1985) descreve um transistor HEMT (“High Electron Mobility Transistor”) utilizando um poço quântico simples de $\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}/\text{GaAs}$. Esse artigo mostrou também a viabilidade de se fabricar heterojunções com $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$, aumentando o número e a variedade de materiais disponíveis para o projeto desses dispositivos que, até então, utilizavam basicamente $\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$. Atualmente, HEMT e poços quânticos têm sido muito utilizados em amplificadores de baixo ruído e circuitos de microondas. (DUPUIS et al., 1978) reporta um dispositivo laser com um poço quântico de $\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}/\text{GaAs}$ de aproximadamente 200 Å de largura capaz de funcionar, com resultados satisfatórios, à temperatura ambiente (300°K). Hoje, encontram-se lasers a poços quânticos em sistemas de comunicação óptica, leitores de código de barra e nos sistemas de leitura dos DVDs de alta capacidade tais como o utilizado no sistema Blu-ray™. Outro dispositivo a poços quânticos que vem gerando, recentemente, resultados interessantes é o fotodetector de infravermelho, que será discutido mais adiante. Um histórico muito interessante sobre a evolução dos dispositivos a poços quânticos pode ser encontrado em (ALFEROV, 1998). Estudos recentes envolvendo aplicações dos poços

quânticos podem ser encontrados em: (SELIUTA, et al., 2008) que relata o projeto e a fabricação de múltiplos poços quânticos de GaAs/AlAs com dopagem- δ de berílio e silício para dispositivos receptadores compactos de radiações com frequência da ordem de terahertz; (DAVID et al., 2008) estuda a distribuição de cargas em múltiplos poços quânticos de InGaN/GaN utilizados em diodos emissores de luz de alta radiância; (MATSUBARA et al., 2008) descreve um novo projeto de fabricação de uma fonte emissora de laser com comprimento de onda na faixa do espectro azul-violeta utilizando múltiplos poços quânticos de InGaN; (AMO, et al., 2008) apresenta uma configuração experimental que permite o controle da fotoluminescência de éxcitons (par elétron-lacuna ligados por interação coulombiana) em poços quânticos. Esse controle é uma característica chave para o desenvolvimento desses dispositivos em optoeletrônica. (CHITTA et al., 2006) apresenta dados de medições das resistências Hall e longitudinal em um poço quântico de PbTe. (DACAL et al., 2005) apresenta um estudo da condutância quântica balística em fios quânticos tridimensionais. Os fios e pontos quânticos, tecnologias mais recentes, também possuem grande potencial de aplicações.

A tecnologia de poços, fios e pontos quânticos possibilita controlar parâmetros fundamentais, tais como o espectro de energia do elétron. Por outro lado, cria novos desafios característicos da escala nanométrica, na qual os efeitos quânticos tornam-se evidentes. Alguns dispositivos a poços quânticos necessitam de dopagens para fornecer as cargas que irão ocupar os estados quânticos dentro da banda de condução. As alterações no potencial devido aos dopantes, ganha um peso maior na escala nanométrica. Considerando uma concentração uniforme de dopantes de 10^{18} cm^{-3} , um dispositivo de 10^3 nm^3 teria apenas um átomo. Dessa forma, qualquer flutuação de dopantes resulta em um dispositivo com características bem diferentes, como mostrado em (UNGAN et al., 2005) e (UNGAN et al., 2007) que evidenciam a variação das propriedades eletrônicas de um poço quântico duplo devido as diferenças nas concentrações de dopantes. O cálculo dos estados em poços fios e pontos

quânticos considerando as alterações que a distribuição dos elétrons devido aos dopantes provoca nos potenciais dos poços é chamado de cálculo autoconsistente que será explicado mais adiante neste capítulo.

Na área de fotodetectores de infravermelho, os poços quânticos adquiriram um papel fundamental. Até recentemente, a pesquisa em fotodetectores de infravermelho era melhor caracterizada como um ramo da ciência dos materiais do que como um ramo da física. Para se detectar radiação de um comprimento de onda particular, eram pesquisados compostos semicondutores de diferentes larguras de banda proibida, até se obter um material que absorvesse a radiação com o comprimento de onda desejado. Desta forma, apesar dos processos físicos de detecção serem bem conhecidos, era essencial um melhor conhecimento da correlação entre os procedimentos de preparação do material fotodetector para aumentar o desempenho do detector resultante. Isto é particularmente verdadeiro para materiais detectores mais complexos, tais como HgCdTe (LEVINE, 1993). Isso também é relatado em (BOSCHETTI et al., 2001) que mostra os resultados do crescimento de PbTe e PbSnTe diretamente sobre substrato de Si(1 0 0) com a técnica “Molecular Beam Epitaxial” para utilização em fotodetectores de infravermelho.

Os recentes avanços na tecnologia de detectores de infravermelho a poços quânticos (QWIP: “Quantum Well Infrared Photodetector”) mudou completamente esse panorama. Estes detectores são baseados nas transições ópticas dentro de uma única banda de energia e são portanto, independentes da largura de banda proibida do material detector. Nos QWIPs, a absorção infravermelha ocorre via transições intersubbandas. A transição de energia é determinada pelos níveis de energia de cada poço quântico. Por sua vez, os níveis de energia são dependentes das dimensões do poço e do tipo de material utilizado. Tanto as dimensões quanto o tipo de material podem ser facilmente alterados no processo de fabricação (CHOI, 1997).

Esse capítulo apresenta os conceitos básicos que foram estudados ou trabalhados na realização desta dissertação de mestrado. Nisso se incluem os parâmetros da estrutura de bandas, a densidade de estados e a estatística de ocupação dos estados. Também serão apresentadas as propriedades fundamentais das heteroestruturas formadas com materiais semicondutores, os poços, fios e pontos quânticos e como isso se relaciona com os detectores de infravermelho. Os trabalhos de (BASTARD, 1992), (CHOI, 1997), (VURGADTMAN et al., 2001), (RAM-MOHAN, 2002), (SINGH, 2003), (HAUG; KOCH, 2004), (HARRISON, 2005) contêm muitas outras informações e um maior aprofundamento nos assuntos aqui apresentados.

2.1 Estrutura Cristalina e Bandas de Semicondutores

A maioria das teorias de bandas, tais como o modelo multibanda k.P (SINGH, 2003), no qual se baseiam os valores de parâmetros utilizados neste trabalho, assume que o semicondutor pode ser representado por um arranjo periódico perfeito de átomos com estrutura cristalina semelhante à mostrada na Figura 2.1. Embora incorreta, essa suposição permite representar as partículas, dentro da estrutura cristalina, agindo como se estivessem no vácuo, exceto por uma relação energia-momento efetivo modificada. Essa diferença é introduzida em um parâmetro empírico chamado massa efetiva. A aproximação da massa efetiva (ASHCROFT; MERMIN, 1976)-(BLAKEMORE, 1985) é amplamente utilizada na física de semicondutores e oferece uma boa aproximação para os problemas abordados nesta dissertação.

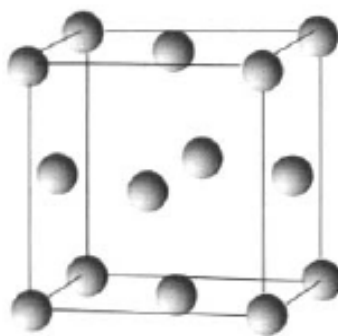


Figura 2.1 – Estrutura cristalina.

Além da massa efetiva, a estrutura eletrônica de bandas de um semicondutor contém informações sobre uma série de parâmetros essenciais para um bom entendimento dos dispositivos a poços, fios e pontos quânticos, tais como mínimo de energia da banda de condução e máximo de energia da banda de valência. Porém, determinar esses parâmetros tanto por meio do cálculo da estrutura de bandas quanto por meio da análise de resultados experimentais conduzem, freqüentemente, não a um valor específico, mas a uma faixa de valores aceitáveis para cada um destes parâmetros. Conseqüentemente, muitas ligas e materiais semicondutores não possuem valores de parâmetros únicos universalmente aceitos.

Neste trabalho, são adotados os valores de parâmetros de materiais e ligas semicondutoras apresentados em (VURGAFMAN et al., 2001). Baseado em revisões de vários artigos, esse trabalho apresenta uma lista atualizada e consistente dos valores dos parâmetros de banda dos principais compostos semicondutores da família III-V da tabela periódica

2.2 Poços, Fios e Pontos Quânticos

Quando dois materiais semicondutores são crescidos um sobre o outro diz-se que eles formam uma heterojunção e a descontinuidade, tanto da banda de valência, quanto da banda de condução, pode ser representada por um termo potencial constante como mostrado na Figura 2.2. Nesta figura, a direção de crescimento é a direção z e a diferença do valor de potencial corresponde ao ponto de junção do crescimento de dois materiais distintos.

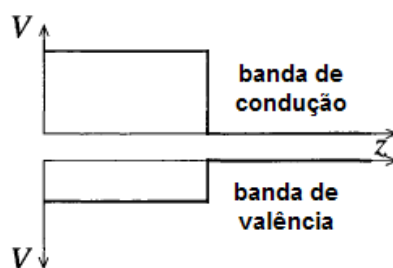


Figura 2.2 – Potencial unidimensional $V(z)$ da heterojunção.

Múltiplas heterojunções formam uma heteroestrutura dando possibilidade a infinitas combinações. Se uma fina camada de um material 'A', com largura de banda proibida, E_{gA} , é crescida no meio de outro material 'B' com largura de banda proibida, E_{gB} , como mostra a Figura 2.3 e, se a camada 'A' é fina o suficiente para que as propriedades quânticas tornem-se evidentes, ou seja, da ordem do comprimento de onda de de Broglie² dos portadores (geralmente elétrons e lacunas), então esse alinhamento de banda é chamado de poço quântico simples.

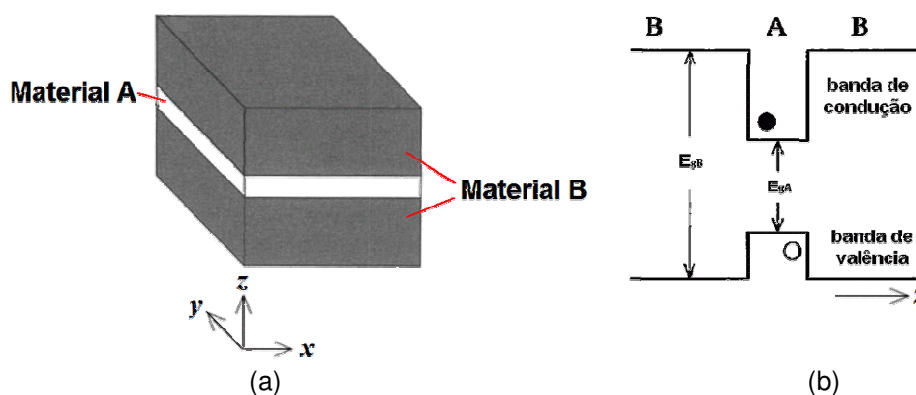


Figura 2.3 – (a) Heteroestrutura formada com os materiais semicondutores A e B. (b) representação da banda eletrônica da heteroestrutura ao longo do eixo z.

Caso existam cargas elétricas na banda de condução, seja elas produzidos pelo aumento da temperatura (sistema intrínseco), ou resultantes de átomos dopantes (sistema extrínseco), a tendência é que elas ocupem os menores estados de energia. Portanto, nesse exemplo, qualquer elétron, representado na Figura 2.3 por um círculo preto, será coletado pelo poço quântico. O poço quântico força a partícula a ocupar uma região planar (xy), restringindo seu

² O comprimento de onda de de Broglie é dada pela *relação de de Broglie*: $\lambda = \frac{h}{p}$, em que o

momento da partícula é relacionado com o conceito ondulatório de comprimento de onda λ por meio da Constante de Planck (h)

movimento em uma das dimensões espaciais (z). Neste caso, no modelo k.P com aproximação de massa efetiva, a estrutura eletrônica dos poços quânticos pode ser representada pela Equação de Schrödinger unidimensional, independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (2.1)$$

na qual os autovalores (E) representam as energias possíveis da partícula dentro do poço; a cada autovalor há um autovetor associado (ψ) que descreve o formato da função de onda da partícula; $\hbar$ é a Constante de Planck dividida por 2π ; m^* é a massa efetiva da partícula e V é a energia potencial relativa.

As funções de onda (ψ) descrevem os estados do sistema. A Figura 2.4 mostra as quatro primeiras funções de onda do poço de potencial quadrado infinito e a densidade de probabilidade desses quatro autoestados. A partir da função de onda calcula-se a probabilidade de diversos fenômenos, como por exemplo, a probabilidade de se encontrar o elétron em uma determinada posição. A densidade de probabilidade, $P(z)$ é uma expressão bilinear em ψ e ψ^* , o complexo conjugado de ψ , dada pela Equação 2.2.

$$P(z) = \psi^*(z)\psi(z). \quad (2.2)$$

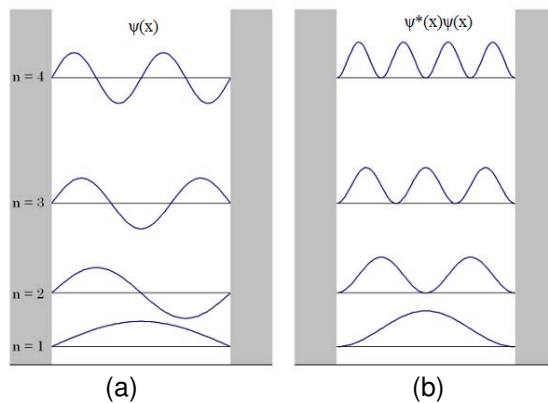


Figura 2.4 – (a) Quatro primeiros estados do poço quadrado infinito. (b) Os gráficos das densidades de probabilidade correspondentes.

A soma das probabilidades de qualquer evento deve ser igual a 1, portanto, as funções de onda são normalizadas de tal forma que

$$\int \psi^*(z)\psi(z)dz = 1. \quad (2.3)$$

O valor esperado $\bar{\phi}$ de uma grandeza física $\phi(z)$ é dado pela Equação 2.4.

$$\bar{\phi} = \int \psi^*(z)\phi(z)\psi(z)dz, \quad (2.4)$$

e como

$$\int \psi^*(z)\phi(z)\psi(z)dz = \int \psi'^*(z)\phi(z)\psi'(z)dz, \quad (2.5)$$

as funções de onda $\psi'(z)$ deslocados de uma fase em relação a $\psi(z)$ descrevem o sistema tão bem como a própria função $\psi(z)$. Portanto, se $\psi(z)$ é função de onda de um sistema, $\psi'(z)$ também é.

Neste trabalho, assume-se aproximação da função envelope (BASTARD, 1981)-(BASTARD, 1992) que tem por base dois pontos importantes:

- que o método de aproximação da massa efetiva descreve de forma aceitável o material semiconductor; e
- que heterojunções entre materiais diferentes, ambos bem representados pelo método da aproximação de massa efetiva, podem ser reconhecidas pela diferença na largura de banda da energia proibida desse materiais, de onde derivam seus potenciais.

A validade da aproximação da função envelope tem sido discutido na literatura (LONG; HAGSTON, 1996)-(DARGAM et al., 1997)-(BURT, 1999)-(KADUKI; BATTY, 2000). Como já foi apresentado no Capítulo de Introdução, o método da aproximação da função envelope tem limitações para camadas muito finas de material, menores que 5 nm. Os materiais são compostos de grande

quantidade de potenciais atômicos portanto, quando se trabalha com camada muito fina, o potencial de cada átomo torna-se significativo e a média global que representa o potencial do cristal deixa de ser uma representação adequada do que o elétron, ou lacuna, percebem. Contudo, essa aproximação tem bons resultados para os casos estudados nesse trabalho, como será apresentado no Capítulo de Resultados.

Com relação ao grau de liberdade do elétron, um poço quântico é um sistema bidimensional, pois o elétron é livre no plano xy . Quando esse grau de liberdade é reduzido de uma unidade temos um fio quântico e quando ele se torna zero temos um ponto quântico, pois o confinamento ocorre em todas as três dimensões espaciais.

A Figura 2.5 mostra um fio quântico simples, onde se vê que o elétron é livre para se mover em apenas uma direção, neste caso ao longo do eixo y . A Figura 2.6-(a) mostra um ponto quântico simples, onde as cargas sofrem confinamento em todas as três dimensões espaciais. Um método comum de crescimento de pontos quânticos consiste em depositar uma fina camada de um material semiconductor sobre um substrato que tenha uma constante de rede um pouco diferente desse material. Dessa forma, átomos dessa fina camada se aglutinam, tentando minimizar energia total devido à tensão gerada pelo descasamento das constantes de rede, formando pontos quânticos como mostrado esquematicamente na Figura 2.6-(b). Essa fina camada, que forma os pontos quânticos, não desaparece totalmente, restando uma camada ainda mais fina chamada de “wet layer”.

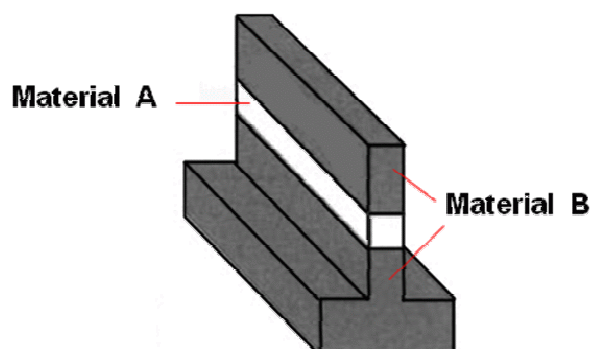


Figura 2.5 – Vista expandida de fio quântico simples.

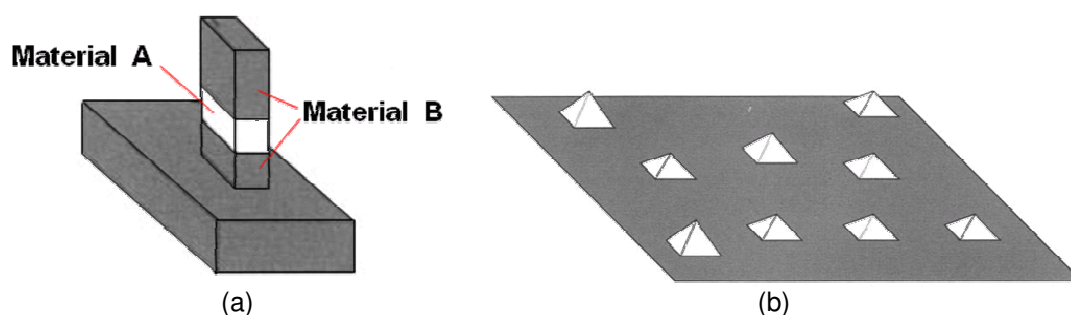


Figura 2.6 – Pontos quânticos. (a) Vista expandida de ponto quântico simples. (b) Pontos quânticos

A estrutura eletrônica dos fios e pontos quânticos é tratada pelas Equação de Schrödinger bi e tri-dimensional, respectivamente, de forma semelhante aos poços quânticos. Todas as discussões feitas anteriormente para o caso de poços são válidos também para fios e pontos quânticos.

Uma vantagem do método k.P com aproximação de massa efetiva é permitir o estudo isolado da banda de condução e da banda de valência em heteroestruturas. Dessa forma, neste trabalho serão tratados apenas os poços, fios e pontos quânticos formados na banda de condução dos materiais semicondutores.

2.3 Dopantes

A condutividade dos semicondutores pode ser controlada introduzindo uma quantidade de impurezas, chamados dopantes. Dessa forma, a fim de melhorar

a sua condutividade, costuma-se dopar certos dispositivos semicondutores, tais como os fotodetectores de infravermelho.

Os dopantes podem ser aceitadores (dopagem tipo-p) ou doadores de elétrons (dopagem tipo-n). Os cálculos com dopagem tipo-p não serão tratados neste trabalho.

As cargas adicionais geradas pelos dopantes criam uma energia potencial elétrica, e alteram o perfil de energia da banda de condução. Para se obter o perfil de energia da banda de condução resultante é feito um cálculo iterativo em um processo autoconsistente, que será explicado adiante.

A dopagem tipo-n é exemplificada na Figura 2.7 em que um átomo pentavalente (As) é introduzido em um cristal de silício. Os átomos de Si possuem quatro elétrons de valência, por isso, os quatro elétrons de valência do átomo de As formam ligações covalentes tetraédricas com átomos de Si e o quinto elétron fica fracamente ligada ao átomo.

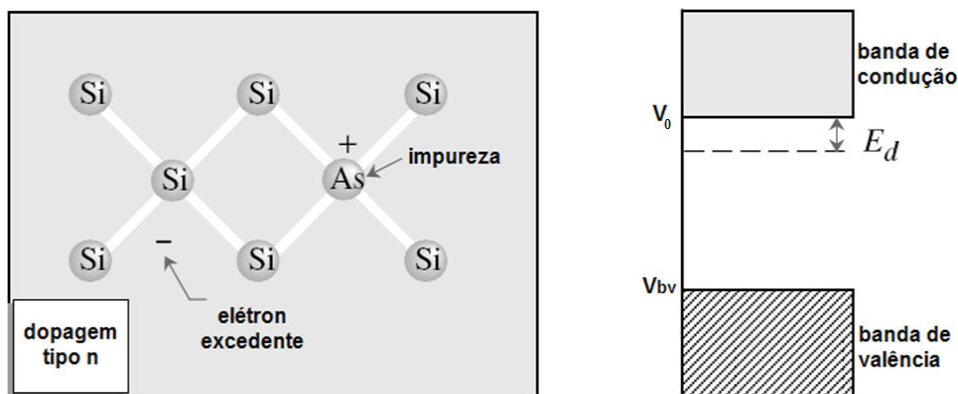


Figura 2.7 – Esquema de dopagem tipo n. Dopantes de arsênio no silício.

O valor da energia de doação (E_d) do elétron de valência excedente do átomo da impureza é dado por (SINGH, 2003):

$$\begin{aligned}
E_d &= V_0 - \frac{e^4 m_e^*}{32\pi^2 \varepsilon^2 \hbar^2} \\
&= V_0 - 13,6 \frac{m_e^*}{\varepsilon^2}
\end{aligned} \tag{2.6}$$

no qual V_0 é o valor da energia da banda de condução do material semiconductor, ε o valor de sua permissividade relativa e m_e^* a massa efetiva do elétron. De acordo com a Equação 2.6, o nível da energia de doação depende somente do material semiconductor hospedeiro (ε e m_e^*) e não da natureza do dopante. Dessa forma, para o GaAs, considerando os seguintes valores de parâmetro: $m_e^* = 0,067$ e $\varepsilon = 13,2$, temos:

$$E_d(\text{GaAs}) = V_0 - 0,00523. \tag{2.7}$$

2.4 Densidade de Estados

A densidade de estados é uma grandeza que permite obter a quantidade de estados de cada nível de energia disponíveis para ocupação. A Equação 2.8 (Harrison, 2005) fornece a densidade de estados para um poço quântico com n estados confinados.

$$\rho^{2D} = \sum_{i=1}^n \frac{m^*}{\pi \hbar^2}. \tag{2.8}$$

O número total de cargas (n_e) em um sistema de poço quântico é dado pela integral do produto da probabilidade de ocupação do estado pela densidade de estados. Para férmions, como elétrons, a probabilidade de ocupação de um estado é dado pela estatística de Fermi-Dirac dada pela Equação :

$$f^{FD} = \begin{cases} \left(\exp\left(\frac{E_F - E}{k_B T}\right) + 1 \right)^{-1}, & \text{para } T \neq 0 \\ \theta(E_F - E), & \text{para } T = 0 \end{cases}, \tag{2.9}$$

no qual E_F representa a Energia de Fermi, T a temperatura, k_B a constante de Boltzmann e θ é a função degrau de Heaviside.

Integrando o produto, o número total de cargas dentro de um sistema de poço quântico, com n estados confinados, é dado pela Equação 2.10 (RAM-MOHAN, 2002)-(HARRISON, 2005).

$$n_e = \begin{cases} \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^n \ln \left(\exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) + 1 \right), & \text{para } T \neq 0 \\ \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^n \theta(E_F - E_i), & \text{para } T = 0 \end{cases} \quad (2.10)$$

2.5 Autoconsistência

A resolução da Equação de Schrödinger considerando apenas o potencial da banda eletrônica dos materiais semicondutores refere-se a uma solução que não leva em conta a interação das cargas entre si e com o potencial da banda eletrônica dos semicondutores. Esse modelo é inadequado para descrever dispositivos que trabalham com grande número de cargas como, por exemplo, poços quânticos dopados. Nesses casos, o potencial é formado pela superposição do potencial relativo à banda eletrônica do material semiconductor, chamado aqui de V_0 , e do potencial eletrostático gerado pela cargas dos íons e elétrons resultantes da ionização dos átomos inseridos na dopagem. Para verificar a influência dessas cargas nos limites de banda de heteroestruturas é necessário resolver o problema eletrostático desse sistema. O termo adicional da energia potencial das cargas elétricas, $V_c(z)$, pode ser encontrado resolvendo-se a Equação de Poisson:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} V_c(z) = -\frac{|e| \rho(z)}{\epsilon}, \quad (2.11)$$

no qual $\rho(z)$ é a densidade de cargas e e é a carga da partícula que é multiplicada à Equação de Poisson para se obter diretamente a energia potencial em eV, em lugar do potencial eletrostático.

A distribuição espacial das cargas é dada pela seguinte expressão:

$$\rho(z) = \rho_d(z) + \rho_e(z) \quad (2.12)$$

no qual $\rho_e(z)$, dada pela Equação 2.13, é a densidade de cargas negativas, sendo que n_e é dada pela Equação 2.10 e $\rho_d(z)$ é a densidade de cargas positivas, gerada por átomos ionizados das impurezas, dada pelas Equações 2.14 (RAM-MOHAN; et al., 2004), para $T = 0$ e $T \neq 0$.

$$\rho_e(z) = n_e |\psi_i(z)|^2 \quad (2.13)$$

$$\rho_d(z) = \begin{cases} \frac{|e|D_d(z)}{1 + 2 \exp \frac{E_F + E_D - V(z)}{k_B T}}, & \text{para } T \neq 0 \\ |e|D_d(z) \theta(V(z) - E_D - E_F), & \text{para } T = 0 \end{cases} \quad (2.14)$$

na qual $D_d(z)$ é a densidade de dopantes e E_D é a energia que liga o elétron de valência no átomo introduzido como dopante, obtida por meio da Equação 2.6:

$$\begin{aligned} E_D &= V_0 - E_d \\ &= 13,6 \frac{m_e^*}{\epsilon^2} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Os autoestados são calculados incorporando a energia potencial elétrica devido às cargas ao perfil de energia da banda de condução na Equação de Schrödinger:

$$V(z) = V_c(z) + V_0(z). \quad (2.16)$$

A Equação de Schrödinger é resolvida com esse nova energia potencial $V(z)$ que leva em conta a energia potencial elétrica das cargas, obtendo novos valores de energia e funções de onda associadas. Contudo, as novas funções de onda alteram a distribuição de cargas sendo necessário portanto, um processo iterativo de resolução, cujo fluxograma está ilustrado na Figura 2.8.

Dois métodos de resolução foram implementados no cálculo autoconsistente, aqui chamados de A1 e A2. O primeiro método supõe que toda a região de dopagem encontra-se ionizada. Já o outro método, proposto por (TRELLAKIS; et al., 1997) e modificado por (RAM-MOHAN; et al., 2004), calcula essa região de depleção, na qual os átomos dopantes se ionizam, ao invés de considerar toda região dopada ionizada.

Independente do método, ambos iniciam o processo com o cálculo dos parâmetros de energia relativa da banda de condução (V_0) e massa efetiva do elétron de cada material semiconductor. A Equação de Schrödinger é resolvida com o V_0 inicial para se ter uma primeira idéia da distribuição de elétrons na nanoestrutura. Neste trabalho, selecionou-se os n estados com funções de onda cuja integral na região de poços seja maior que 50%. Dependendo da região dopada e o efeito dessa dopagem no nível de energia das barreiras, estados confinados podem ser obtidos no poço fictício criado entre o ponto onde é aplicada a condição de contorno, função de onda $\psi = 0$ nos extremos da heteroestrutura, e a região de depleção, ou seja, fora da região dos poços. Isso poderia ser resolvido aumentando consideravelmente a largura das barreiras. No entanto, neste trabalho, optou-se por realizar essa filtragem que resolve os problemas aqui tratados sem onerar, de forma significativa, o tempo de processamento.

Daqui em diante há diferenças entre os métodos. O Método A1, que considera toda a região dopada como região de depleção, determina, o valor da energia de Fermi com base na Equação 2.10, na qual n_e é calculada pela seguinte equação:

$$n_e = n_d = \int_{\Omega} D_d(z) dz. \quad (2.17)$$

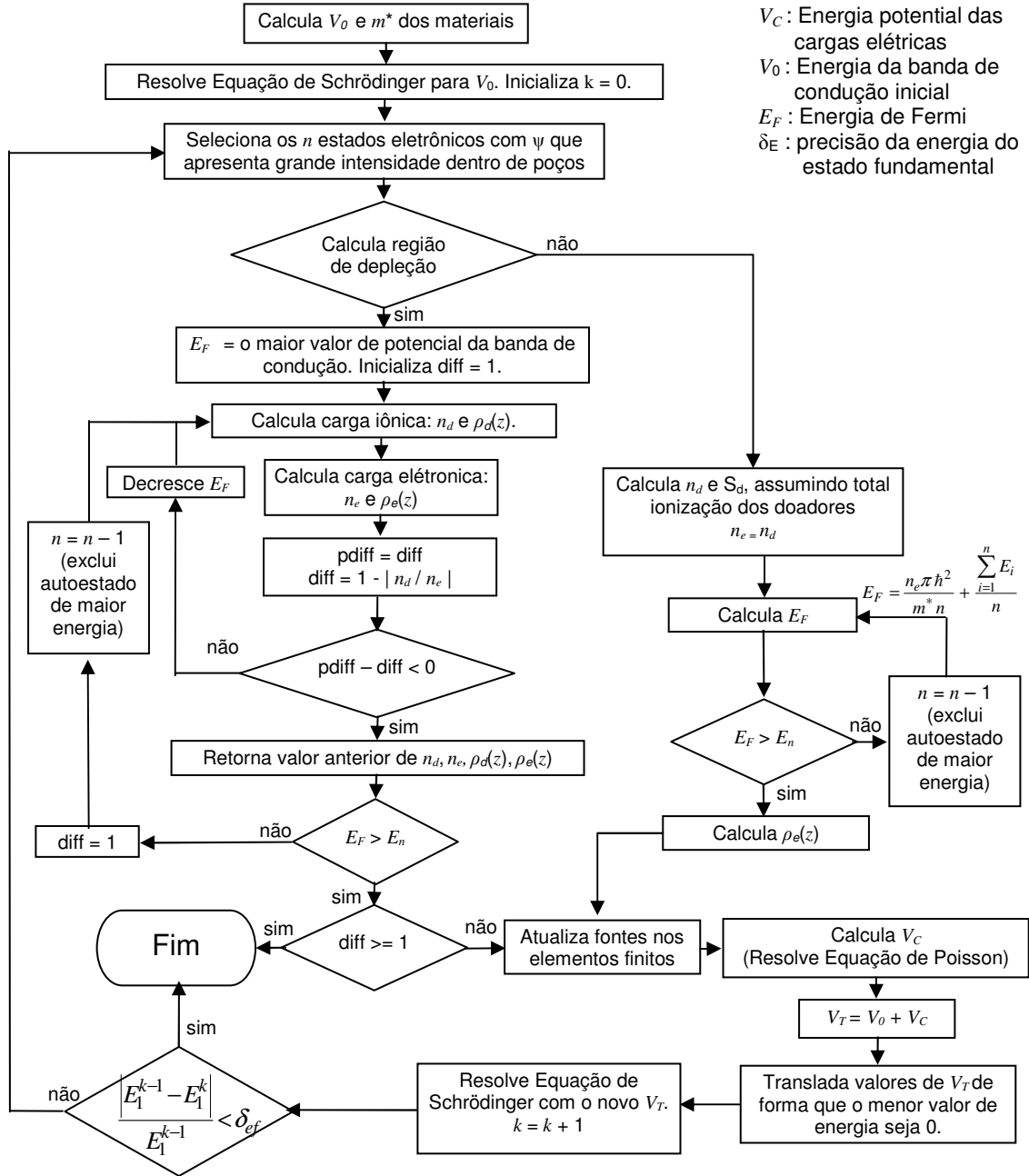


Figura 2.8 – Fluxograma da resolução autoconsistente das energias das subbandas.

Já o Método A2 calcula a Energia de Fermi por meio de um processo iterativo. Neste processo, a Energia de Fermi é variada até que a Equação 2.18 seja satisfeita, mantendo a neutralidade de cargas.

$$n_e = n_d \quad (2.18)$$

Encontrada a Energia de Fermi, verifica-se se esta é maior que o valor de energia do maior estado dentro do poço. Caso negativo, todo o cálculo da região de depleção ou da Energia de Fermi é realizado novamente, retirando dos cálculos esse estado de maior energia ($n=n-1$), pois o fato do valor desta ser maior que o valor da Energia de Fermi indica que esse estado não é populado.

Durante o cálculo da região de depleção ou da Energia de Fermi, a densidade de cargas de elétrons e íons também é calculada, tendo como base as funções de onda obtidas da resolução da Equação de Schrödinger. Essa densidade de cargas é dado de entrada da Equação de Poisson, cuja resolução dá a energia potencial elétrica (V_C) resultante dessas cargas. Essa energia potencial é somada com a energia relativa da banda de condução (V_0) resultando em um novo perfil da banda de condução (V_T). Os valores de energia desse novo perfil da banda de condução são transladados para que o menor valor de energia seja 0. Isso não é necessário, mas facilita a leitura dos dados resultantes.

A Equação de Schrödinger é resolvida novamente com V_T e o programa verifica se houve ou não a convergência da energia do estado fundamental de acordo com o seguinte critério:

$$\frac{|E_1^{k-1} - E_1^k|}{E_1^{k-1}} < \delta_{ef} \quad (2.19)$$

no qual E_1^{k-1} é a energia do estado fundamental da iteração anterior, E_1^k é a energia do estado fundamental da iteração atual e δ_{ef} é a precisão desejada.

2.6 Detectores de Infravermelho

O espectro da radiação infravermelha pode ser classificado da forma mostrada na Tabela 2.1.

Tabela 2.1 – Classificação do espectro da radiação infravermelha.

Designação	Abreviação	Comprimento de onda (μm)
Infravermelho próximo	NIR	0,75 a 3,00
Infravermelho médio	MIR	3,00 a 6,00
Infravermelho distante	FIR	6,00 a 15,00
Infravermelho extremo	XIR	15,00 a 1000,00

Os detectores de infravermelho a poços e pontos quânticos se baseiam nas transições intrabanda, esquematizadas na Figura 2.9, que ocorrem no interior destas estruturas confinantes. Neste trabalho serão consideradas apenas as transições intrabanda que ocorrem na banda de condução destes nanodispositivos.

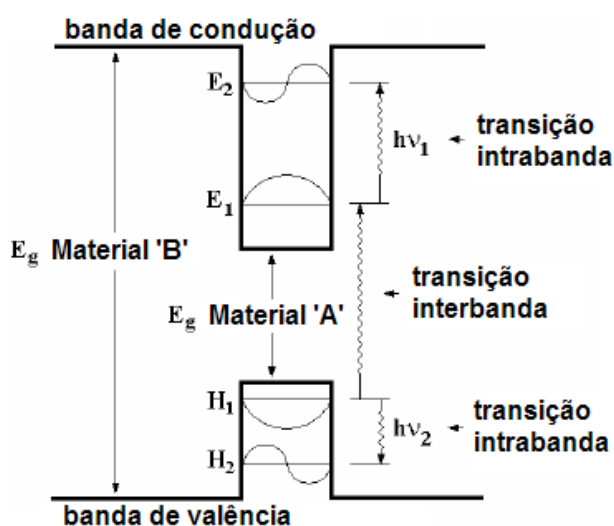


Figura 2.9 – Esquema das transições interbanda e intrabanda.

A energia do comprimento de onda da radiação eletromagnética que se deseja detectar é dada pela Equação 2.20.

$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.20)$$

em que h é a Constante de Planck igual a $4,136 \times 10^{-15}$ eV·s, e c , a velocidade da luz no vácuo, igual a $2,998 \times 10^{14}$ μm. Então temos:

$$E = \frac{1,240}{\lambda} \text{ [eV]} \quad (2.21)$$

Portanto, simplificadamente, de acordo com a Equação 2.21, para se detectar uma radiação na faixa do infravermelho médio, com comprimento de onda de 4 μm , será necessário construir um dispositivo capaz de absorver fótons com transições intrabanda com energia de:

$$E = \frac{1,240}{4,00} = 0,31 \text{ eV} \quad (2.22)$$

3 METODOLOGIA E FORMULAÇÃO

Na aproximação de massa efetiva, o cálculo dos autoestados (autovalores e funções de onda) de poços quânticos se resume na resolução da Equação de Schrödinger independente do tempo, mostrada na Equação 3.1.

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left(\frac{1}{m^*(r)} \nabla \psi(r) \right) + V(r) \psi(r) = E \psi(r). \quad (3.1)$$

Nesta equação, r representa as coordenadas da partícula.

Desenvolvendo a Equação 3.1 temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\nabla \left(\frac{1}{m^*(r)} \right) \nabla \psi(r) + \frac{1}{m^*(r)} \nabla^2 \psi(r) \right] + V(r) \psi(r) - E \psi(r) = 0, \quad (3.2)$$

sujeita às seguintes condições de contorno: $\begin{cases} \psi(r) = \psi_s \text{ em } \Gamma_1 \\ \frac{\partial \psi(r)}{\partial n} = f_s \text{ em } \Gamma_2 \end{cases}.$

Definindo resíduos para solução aproximada:

$$R_1 = -\frac{\hbar^2}{2} \left[\nabla \left(\frac{1}{m^*(r)} \right) \nabla \psi(r) + \frac{1}{m^*(r)} \nabla^2 \psi(r) \right] + V(r) \psi(r) - E \psi(r), \quad (3.3)$$

$$R_2 = \psi(r) - \psi_s, \quad (3.4)$$

$$R_3 = \frac{\partial \psi(r)}{\partial n} - f_s, \quad (3.5)$$

e aplicando Método dos Resíduos Ponderados temos:

$$\begin{aligned}
I = & -\frac{\hbar^2}{2} \left[\int_{\Omega} P_1 \nabla \left(\frac{1}{m^*(r)} \right) \nabla \psi(r) d\Omega + \int_{\Omega} P_1 \frac{1}{m^*(r)} \nabla^2 \psi(r) d\Omega \right] \\
& + \int_{\Omega} P_1 V_T(r) \psi(r) d\Omega - \int_{\Omega} P_1 E \psi(r) d\Omega \\
& + \int_{\Gamma_1} P_2 (\psi(r) - \psi_s) dS \\
& + \int_{\Gamma_2} P_3 \left(\frac{\partial \psi(r)}{\partial n} - f_s \right) dS \\
= & 0
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Aplicando a primeira Identidade de Green na Equação 3.6 resulta:

$$\begin{aligned}
I = & -\frac{\hbar^2}{2} \left[\int_{\Omega} P_1 \nabla \left(\frac{1}{m^*(r)} \right) \nabla \psi(r) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \left(\frac{P_1}{m^*(r)} \right) \nabla \psi(r) d\Omega \right] \\
& + \int_{\Omega} P_1 V_T(r) \psi(r) d\Omega - \int_{\Omega} P_1 E \psi(r) d\Omega \\
& - \frac{\hbar^2}{2} \int_{\Gamma_1} \frac{P_1}{m^*(r)} \frac{\partial \psi(r)}{\partial n} dS \\
& + \int_{\Gamma_1} P_2 (\psi(r) - \psi_s) dS \\
& + \int_{\Gamma_2} \left(P_3 - \frac{\hbar P_1}{2m^*(r)} \right) \frac{\partial \psi(r)}{\partial n} dS \\
& - \int_{\Gamma_2} P_3 f_s dS \\
= & 0
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Como as funções de ponderação são arbitrárias podemos escolher $P_3 = \frac{\hbar P_1}{2m^*(r)}$

de forma a eliminar a penúltima integral e impor que P_1 seja identicamente nula na superfície Γ_1 , eliminando a quinta integral. Assume-se também que a condição de contorno em Γ_2 seja homogênea ($f_s = 0$). Dessa forma, ficamos com:

$$\begin{aligned}
I = & -\frac{\hbar^2}{2} \left[\int_{\Omega} P_1 \nabla \left(\frac{1}{m^*(r)} \right) \nabla \psi(r) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \left(\frac{P_1}{m^*(r)} \right) \nabla \psi(r) d\Omega \right] \\
& + \int_{\Omega} P_1 V(r) \psi(r) d\Omega - \int_{\Omega} P_1 E \psi(r) d\Omega \\
= & 0
\end{aligned} \tag{3.8}$$

No MEF, o domínio é subdividido em elementos de geometria simples, tais como, linhas e curvas em simulações 1D, triângulos e retângulos para simulações 2D, tetraedros, paralelepípedos e prismas para simulações 3D. As variáveis nodais, isto é, as variáveis dependentes e, quando necessário, suas derivadas, são calculadas em cada ponto nodal. O número de variáveis nodais depende da formulação adotada para a solução de um dado problema. Dentro de cada elemento, γ , as funções de onda são expandidas em termos de um conjunto compacto de funções de base, N_i :

$$\psi^\gamma(r) = \sum_{i=1}^{n_p} N_i^\gamma \psi_i^\gamma = \{N^\gamma\}^T \{\psi^\gamma\}, \tag{3.9}$$

em que n_p é o número de pontos nodais no elemento finito e i representa os

valores das funções de onda calculados em cada ponto nodal, $\{N^\gamma\} = \begin{Bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ \vdots \\ N_{n_p} \end{Bmatrix}$

corresponde ao conjunto de funções de base na notação matricial e

$\{\psi^\gamma\} = \begin{Bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{n_p} \end{Bmatrix}$ corresponde aos valores nodais da variável de estado.

As funções de base possuem as seguintes propriedades nos pontos nodais:

$$N_i^\gamma(r_i) = \delta_{ij} \tag{3.10}$$

na qual δ_{ij} é o delta de Kronecker. As funções de base para um determinado elemento γ são válidas somente dentro dos limites deste elemento. Os valores que ψ assume no interior de um elemento são obtidos com a Equação 3.9. Neste trabalho foram utilizados elementos finitos do tipo Lagrange de primeira ordem (funções de base lineares) ou de segunda ordem (funções de base quadráticas) que apresentam continuidade C^0 nos limites do elemento.

Expandindo a Equação 3.8 em termos das funções de base, para cada elemento finito γ :

$$\begin{aligned}
 I^\gamma = & -\frac{\hbar^2}{2} \left[\sum_{i=1}^{n_p} \int_{\Omega^\gamma} P_1 \nabla \left(\frac{1}{m^{*\gamma}} \right) \nabla N_i^\gamma \psi_i^\gamma d\Omega^\gamma + \sum_{i=1}^{n_0} \int_{\Omega^\gamma} \nabla \left(\frac{P_1}{m^{*\gamma}} \right) \nabla N_i^\gamma \psi_i^\gamma d\Omega^\gamma \right] \\
 & + \sum_{i=1}^{n_p} \int_{\Omega^\gamma} P_1 V^\gamma N_i^\gamma \psi_i^\gamma d\Omega^\gamma - \sum_{i=1}^{n_p} \int_{\Omega^\gamma} P_1 E N_i^\gamma \psi_i^\gamma d\Omega^\gamma \\
 = & 0
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Aplicando o Método de Galerkin, em que as funções peso no interior de cada elemento são escolhidas iguais às funções de base utilizadas para descrever as variáveis de estado ($P_i^\gamma = N_j^\gamma$), e considerando que dentro de cada elemento a massa efetiva e o potencial sejam constantes temos para cada elemento γ :

$$\begin{aligned}
 I^\gamma = & -\frac{\hbar^2}{2} \left[\sum_{i=1}^{n_p} \int_{\Omega^\gamma} \frac{1}{m^{*\gamma}} \nabla N_j^\gamma \nabla N_i^\gamma \psi_i^\gamma d\Omega^\gamma \right] \\
 & + V^\gamma \sum_{i=1}^{n_p} \int_{\Omega^\gamma} N_j^\gamma N_i^\gamma \psi_i^\gamma d\Omega^\gamma - E \sum_{i=1}^{n_p} \int_{\Omega^\gamma} N_j^\gamma N_i^\gamma \psi_i^\gamma d\Omega^\gamma \text{ com } j = 1, \dots, n_p \\
 = & 0
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

Explicitando para o caso bidimensional com elementos finitos triangulares do tipo Lagrange de 1ª ordem e aplicando a notação de vetor definida na Equação 3.9, temos três equações a três incógnitas por elemento:

$$\left\{ \begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m^{*\gamma}} \left[\int_{\Omega^\gamma} \nabla N_1^\gamma \nabla \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \right] \{\psi^\gamma\}^T + V_T^\gamma \int_{\Omega^\gamma} N_1^\gamma \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \{\psi^\gamma\}^T = \\ & \quad = E \int_{\Omega^\gamma} N_1^\gamma \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \{\psi^\gamma\}^T \\ & -\frac{\hbar^2}{2m^{*\gamma}} \left[\int_{\Omega^\gamma} \nabla N_2^\gamma \nabla \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \right] \{\psi^\gamma\}^T + V_T^\gamma \int_{\Omega^\gamma} N_2^\gamma \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \{\psi^\gamma\}^T = \\ & \quad = E \int_{\Omega^\gamma} N_2^\gamma \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \{\psi^\gamma\}^T \\ & -\frac{\hbar^2}{2m^{*\gamma}} \left[\int_{\Omega^\gamma} \nabla N_3^\gamma \nabla \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \right] \{\psi^\gamma\}^T + V_T^\gamma \int_{\Omega^\gamma} N_3^\gamma \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \{\psi^\gamma\}^T = \\ & \quad = E \int_{\Omega^\gamma} N_3^\gamma \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \{\psi^\gamma\}^T \end{aligned} \right. \quad (3.13)$$

O conjunto de equações pode ser escrito, como segue:

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m^{*\gamma}} \left[\int_{\Omega^\gamma} \nabla \{N^\gamma\}^T \nabla \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \right] \{\psi^\gamma\}^T + V_T^\gamma \int_{\Omega^\gamma} \{N^\gamma\}^T \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \{\psi^\gamma\}^T = \\ & \quad = E \int_{\Omega^\gamma} \{N^\gamma\}^T \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \{\psi^\gamma\}^T, \end{aligned} \quad (3.14)$$

ou

$$\mathbf{A} \{\psi^\gamma\}^T + \mathbf{B} \{\psi^\gamma\}^T = E \mathbf{C} \{\psi^\gamma\}^T, \quad (3.15)$$

no qual

$$\mathbf{A} = -\frac{\hbar^2}{2m^{*\gamma}} \int_{\Omega^\gamma} \nabla \{N^\gamma\}^T \nabla \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma, \quad (3.16)$$

$$\mathbf{B} = V_T^\gamma \int_{\Omega^\gamma} \{N^\gamma\}^T \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma \text{ e} \quad (3.17)$$

$$\mathbf{C} = \int_{\Omega^\gamma} \{N^\gamma\}^T \{N^\gamma\} d\Omega^\gamma. \quad (3.18)$$

3.1 Normalização das Equações Diferenciais

A fim de trabalhar com as grandezas usuais em sistemas quânticos (angstrom para a dimensão espacial e eV para a energia dos autoestados), a Equação de Schrödinger independente do tempo e a Equação de Poisson foram normalizadas conforme mostrado a seguir.

3.1.1 Normalização da Equação de Schrödinger

Partindo da Equação de Schrödinger (Equação 3.1):

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left(\frac{1}{m^*(r)} \nabla \psi(r) \right) + V(r) \psi(r) = E \psi(r),$$

definindo $r' = \frac{r}{a_0}$ e dividindo a equação pela carga elementar, $|e|$, resulta:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^* a_0^2 |e|} \nabla^2 \psi(r') + \frac{V_T(r') \psi(r')}{|e|} = \frac{E \psi(r')}{|e|} \quad (3.19)$$

no qual a_0 e V_0 são constantes de normalização. Fazendo $m^* = m_0 (m^*)'$,

$V'(r) = \frac{V(r)}{|e|}$, $E'(r) = \frac{E}{|e|}$, $\beta = -\frac{\hbar^2}{2m_0 a_0^2 |e|}$, temos:

$$\beta \frac{1}{(m^*)'} \nabla^2 \psi(r') + V'(r') \psi(r') = E' \psi(r'). \quad (3.20)$$

Nota-se que a equação normalizada apresenta a mesma forma da equação original (Equação 3.1), de forma que a formulação por elementos segue o mesmo procedimento apresentado anteriormente, apenas com a substituição

do termo $-\frac{\hbar^2}{2}$ por β .

Utilizando os valores de constantes da Tabela 3.1, obtém-se $\beta = -3,81$. As energias passam a ser dadas em elétron-Volt e as dimensões espaciais em angstrom.

Tabela 3.1 – Valores de constantes utilizadas no trabalho.

Constante	Valor
a_0	$10^{-10} m$
c	$2,9979 \times 10^8 m/s$
$ e $	$1,602 \times 10^{-19} C$
ε_0	$8,8542 \times 10^{-12} F/m$
$\hbar$	$1,054 \times 10^{-34} J.s$
k_B	$1,3807 \times 10^{-23} J/K$
m_0	$9,105 \times 10^{-31} kg$
π	3,1416

3.1.2 Normalização da Equação de Poisson

Partindo da Equação de Poisson:

$$\nabla[\varepsilon_0 \varepsilon_r(r) \nabla \phi(r)] = -\rho(r), \quad (3.21)$$

na qual $\varepsilon_r(r)$ é o valor da permissividade relativa do meio, ε_0 é o valor da permissividade do vácuo, $\phi(r)$ é o potencial eletrostático e $\rho(r)$ é a densidade de carga.

Definindo $r' = \frac{r}{a_0}$, multiplicando a equação pela carga do elétron ($-|e|$) e substituindo $V_c = |e|\phi$, onde V_c é a energia potencial em eV, resulta:

$$\frac{1}{a_0^2} \nabla[\varepsilon_0 \varepsilon_r(r') \nabla V_c(r')] = |e| \rho(r'). \quad (3.22)$$

Substituindo a Equação 2.12, $\rho(z) = \rho_d(z) + \rho_e(z)$, na Equação 3.22:

$$\nabla[\varepsilon_0 \varepsilon_r(r') \nabla V_c(r')] = a_0^2 |e| [\rho_e(r') + \rho_d(r')]. \quad (3.23)$$

Substituindo as Equações 2.13 e 2.14 na Equação 3.23 e a Equação 2.10 na equação resultante temos:

$$\nabla[\varepsilon_0 \varepsilon_r(r') \nabla V_c(r')] = f(T, E_F, E_D, \{E\}, \{\psi\}, \{V\}) = f(...), \quad (3.24)$$

com

$$f(...) = a_0^2 |e| \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^n |\psi_i(r')|^2 \ln \left(\exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) + 1 \right) \right. \\ \left. + \frac{|e| D_d(r')}{1 + 2 \exp \frac{E_F + E_D - V(r')}{k_B T}} \right), \quad \text{para } T \neq 0 \\ \left(\frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^n |\psi_i(r')|^2 \theta(E_F - E_i) \right. \\ \left. + |e| D_d(r') \theta(V(r') - E_D - E_F) \right), \quad \text{para } T = 0 \end{array} \right\},$$

Normalizando a densidade número n_d pela densidade carga típica $n_{d,16} = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ e usando os valores da Tabela 3.1, e lembrando também que

$$1[J] = 1 \left[\frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}^2} \right] = 6,2415 \times 10^{18} \text{ eV}, \text{ temos:}$$

$$f(...) = -5,7674 \times 10^{-15} \frac{m^*}{m_0} T \sum_{i=1}^n |\psi_i(r')|^2 \ln \left(\exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) + 1 \right) \\ + 1,6022 \times 10^{-17} \frac{D_d(r')}{1 + 2 \exp \frac{E_F + E_D - V(r')}{k_B T}}, \quad \text{para } T \neq 0$$

e

$$f(\dots) = -6,6924 \times 10^{-11} \frac{m^*}{m_0} \sum_{i=1}^n |\psi_i(r')|^2 \theta(E_F - E_i) \\ + 1,6022 \times 10^{-17} \frac{D_d(r')}{n_{d,16}} \theta(V(r') - E_D - E_F), \quad \text{para } T = 0$$

3.1.3 Cálculo da Força de Oscilador

A força de oscilador é uma medida adimensional que expressa a força relativa de transição entre autoestados em sistemas quânticos. Ela fornece a probabilidade de transição entre dois autoestados, i e j , e é calculada como

$$f_{ij} = \frac{m^*}{\hbar} \left(\int_{\Omega} \psi_i^* r \psi_j dr \right)^2 (E_j - E_i), \quad (3.25)$$

onde os símbolos já foram definidos anteriormente.

4 PROGRAMA COMPUTACIONAL

O programa de computador desenvolvido neste trabalho é parte de um esforço para desenvolver uma biblioteca de classes SDK-LEVSOFT. O SDK-LEVSOFT é um conjunto de classes reutilizáveis escritas em Linguagem C++, para manipulação de vetores, listas e matrizes esparsas. Ela contém também métodos de resolução de sistemas lineares esparsos que permitem o uso de técnicas de pré-condicionamento, se desejado, além das classes para elementos finitos. A Figura 4.1 mostra um esquema geral do SDK-LEVSOFT com o nome de pacotes componentes. As caixas brancas indicam os locais onde foram criadas ou modificadas classes para a realização deste trabalho.

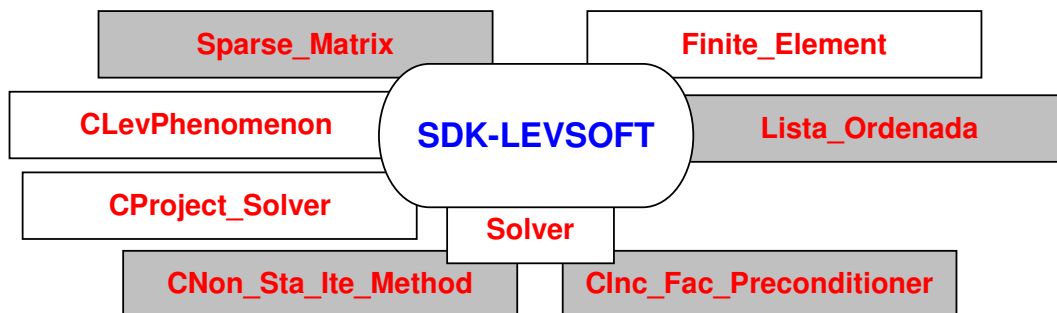


Figura 4.1 – Esquema geral da biblioteca de classes SDK-LEVSOFT.

No pacote *Finite_Element* foram modificados métodos de algumas classes associadas a elementos finitos unidimensionais, uniformizando seu funcionamento com respeito às classes de elementos finitos bi e tridimensionais. Em *Solver* foram incluídas uma função e classes para resolução de sistemas de autovalores. A função é baseada na biblioteca do Matlab e utiliza o método *sptarn*. Já as classes foram criadas no Laboratório de Engenharia Virtual do IEAv e encapsulam as funções da biblioteca ARPACK.

Para o estudo de fenômenos quânticos em poços, fios e pontos quânticos, foram implementadas classes derivadas de *CLevPhenomenon* e *CProject_Solver*: *CLev_Phen_Schrodinger*, *CLev_Phen_SelfConsistent_QWIP* e *CProject_Schrodinger*.

As classes *CLev_Phen_Schrodinger* e *CLev_Phen_SelfConsistent_QWIP* são derivadas de *CLevPhenomenon* e possuem a estrutura mostrada no diagrama de classes UML da Figura 4.2. As caixas cinzas são classes já existentes no SDK-LEVSOFT e as caixas brancas representam classes que foram criadas nesse trabalho. A classe *CLev_Phen_Schrodinger* monta e resolve por elementos finitos, com funções de base polinomiais (interpolação linear ou quadrática) (Ram-Mohan, 2002), (Paes et al., 2003), a Equação de Schrödinger para poços, fios e pontos quânticos. O método *Build_Local_Matrices()* monta as matrizes A, B e C da Equação 3.15, que recai em um problema de autovalores resolvido com o método *Solve()*. Esse método utiliza, a critério do usuário, a função *sptarn()*, derivada do Matlab ou a biblioteca ARPACK, ambas integradas ao programa executável desenvolvido. O método *OscillatorStrain()* calcula a força de oscilador definida de acordo com a Equação 3.25.

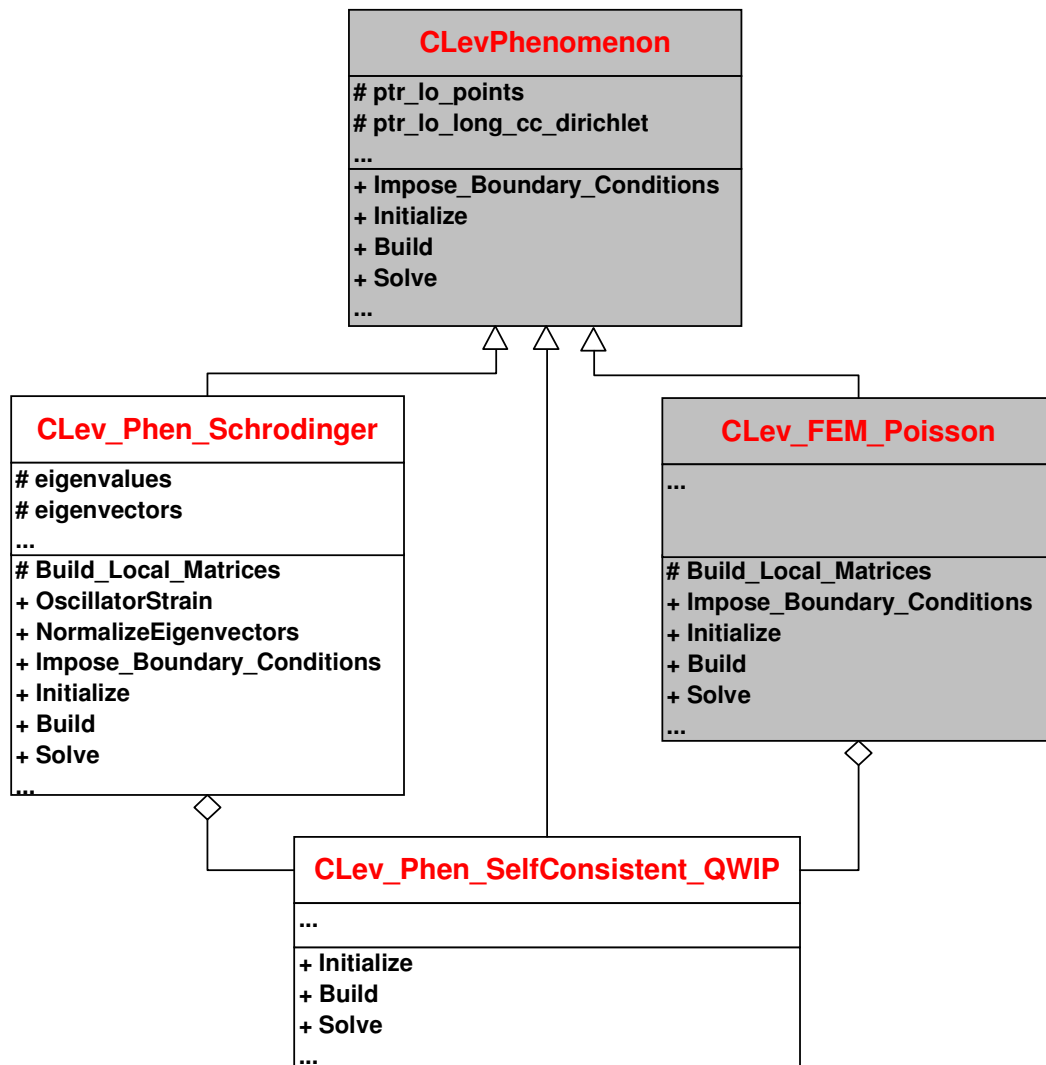


Figura 4.2 – Diagrama de classes derivadas de *CLevPhenomenon*. As classes marcadas na cor cinza fazem parte do SDK-LEVSOFT enquanto que as apresentadas com fundo branco foram criadas neste trabalho e inseridas na biblioteca.

A classe *CLev_Phen_SelfConsistent_QWIP* também derivada de *CLevPhenomenon* é uma agregação das classes *CLev_Phen_Schrodinger* e *CLev_FEM_Poisson*, esta última resolve a Equação de Poisson pelo método dos elementos finitos. O método *Solve()* da classe *CLev_Phen_SelfConsistent_QWIP* implementa o algoritmo mostrado na Figura 2.8, resolvendo iterativamente a Equação de Schrödinger e a Equação de Poisson. O termo da densidade de cargas da Equação de Poisson

implementada segue as Equação 2.14, para temperatura diferente ou igual a zero Kelvin.

Foi criada uma derivada da classe *CProject_Solver*, chamada *CProject_Schrodinger*, como mostra o diagrama de classes UML na Figura 4.3. Essas classes são responsáveis por toda leitura e gravação em disco do programa.

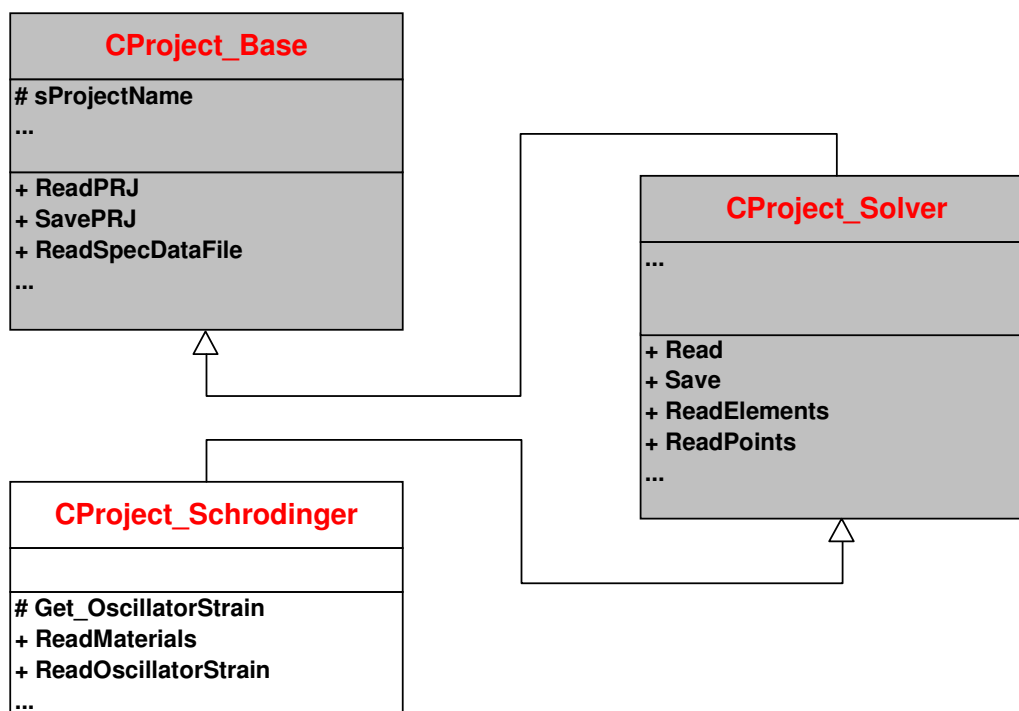


Figura 4.3 – Diagrama de classe da derivada de *CProject_Solver*. As caixas cinzas são classes existentes e as caixas brancas, classes criadas nesse trabalho.

Para análise de poços quânticos com modelo unidimensional, foi criada uma interface gráfica simples e amigável ao usuário, chamada QWS (“Quantum Well Software”), que permite, por meio de menus e caixas de diálogos, atribuir os parâmetros que definem as camadas e barreiras que compõem os dispositivos, tais como, espessura das camadas e composição de materiais. Os materiais utilizados neste trabalho são compostos de ligas binárias, ternárias e quaternárias da família III-V. Os parâmetros dos materiais e das ligas, como discutido anteriormente, foram obtidos de (VURGAFTMAN et al., 2001). O

programa permite também a entrada manual para os valores destes parâmetros. A interface gráfica permite a definição de estruturas periódicas. O perfil de energia da banda de condução, incluindo a tensão relativa ao descasamento dos parâmetros de rede de diferentes materiais, é calculado automaticamente quando necessário. A Figura 4.4 mostra a tela principal do QWS, em que se vê o menu, a caixa de seleção das camadas definidas e de dispositivo e a caixa de mensagens. A definição das camadas é feita com a janela mostrada na Figura 4.5, na qual é possível definir se o material é binário, terciário ou quaternário e a composição das ligas.

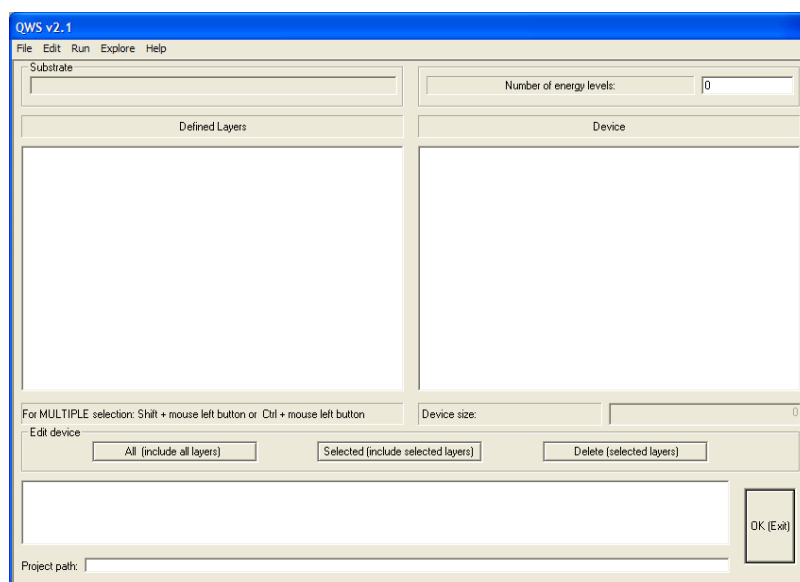


Figura 4.4 – Tela principal do QWS.

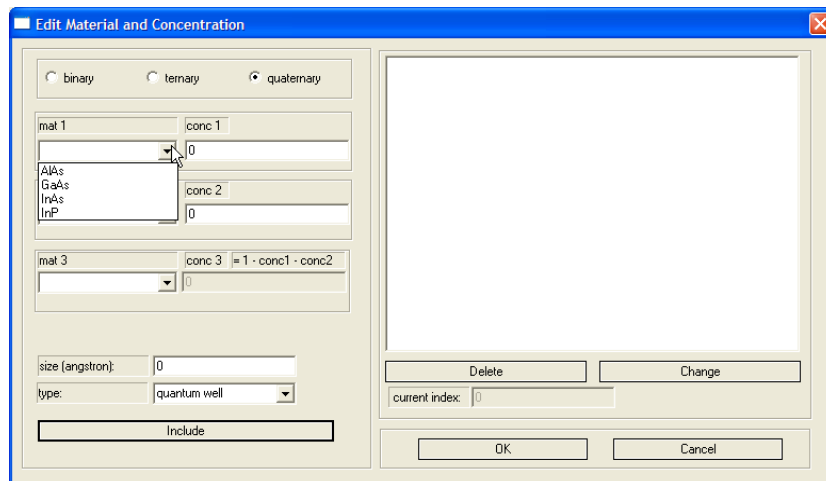


Figura 4.5 – Janela para definição de materiais e tamanho de camadas.

O perfil da energia da banda de condução de cada camada, os autovalores e os autovetores são também apresentados graficamente a fim de permitir sua análise. As autofunções são apresentadas superpostas no nível de energia do respectivo estado quântico. As opções de visualização permitem pôr em evidência cada um dos autovalores e autofunções, Figura 4.6.

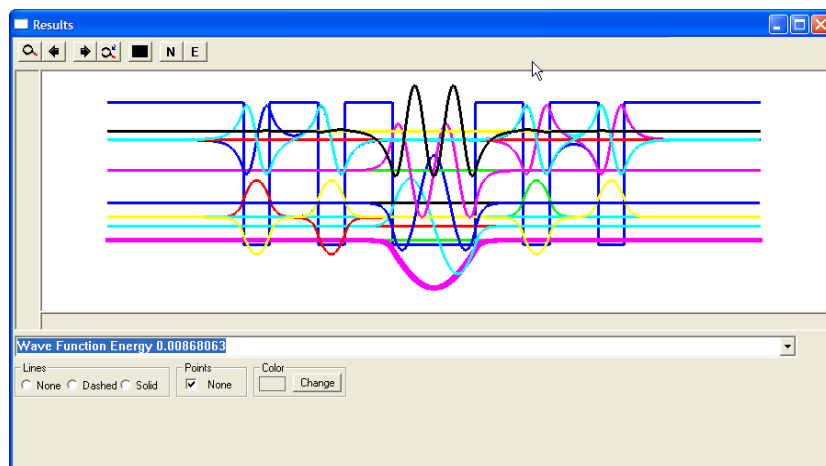


Figura 4.6 – Janela para análise de resultados.

No QWS foi implementado também um gerador automático de malha unidimensional, cujos parâmetros como a densidade de pontos e ordem dos elementos finitos podem ser facilmente alterados na janela mostrada na Figura 4.7, que aparece no momento da execução da resolução por elementos finitos.

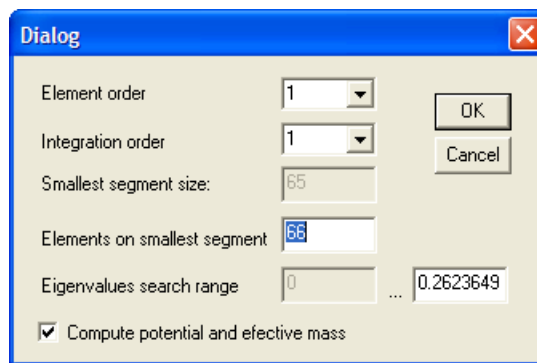


Figura 4.7 – Definição dos parâmetros para execução do cálculo por elementos finitos.

Além do Método dos Elementos Finitos, um segundo método, que utiliza a expansão hamiltoniana tendo como base as soluções de um poço infinito com barreiras muito maiores que a região de interesse (uma caixa unidimensional) seguida por uma diagonalização das equações resultantes (CALIFANO; HARRISON, 2000), (LIM et al., 2005) também foi incluído no QWS, visando aumentar a confiabilidade das simulações. Esse último método teve como base um programa escrito em Fortran que foi convertido para a Linguagem C para ser adaptada ao QWS.

Os módulos de elementos finitos para a resolução da Equação de Schrödinger nas aproximações 2D e 2D com simetria axial, utilizados para análise de fios e pontos quânticos, respectivamente, não possuem interfaces gráficas especializadas. Para modelagem, geração da malha de elementos finitos e visualização dos resultados desses módulos é utilizado o LEVSOFT (ABE et al., 2002), (ABE et al., 2006), (SANTOS et al., 2006).

O cálculo autoconsistente das energias não foi, até o término da escrita dessa dissertação, incluída no programa QWS.

5 RESULTADOS

Este capítulo é dividido em duas seções. A primeira apresenta os resultados de validação do módulo de resolução por elementos finitos da Equação de Schrödinger para poços (1D), fios (2D) e pontos quânticos (2D com simétrica axial) implementados. Apresenta também os resultados obtidos com a implementação do cálculo autoconsistente para poços quânticos, que tem como base o módulo de resolução da Equação de Schrödinger 1D. A segunda seção apresenta resultados de estudos de caso utilizados para compreender o funcionamento da configuração de algumas nanoestruturas. Todos os resultados foram gerados em um computador com processador Pentium 4 de 3 GHz e 512 MB de memória RAM.

5.1 Resultados de Validação

Esta seção apresenta testes de validação para avaliar a precisão e acuidade do código computacional dos elementos finitos implementado com casos da Literatura de poços, fios e pontos quânticos, além de casos de poços quânticos com cálculo autoconsistente.

5.1.1 Validação do Módulo 1D para Poços Quânticos

Os resultados para um poço quântico retangular simples de GaAs/ $\text{Al}_{0,32}\text{Ga}_{0,68}\text{As}$ foram obtidos com o Métodos dos elementos Finitos e com o Método da Expansão Hamiltoniana e foram comparados com as soluções apresentadas em (MACHADO et al., 2000) onde um método sem malha foi empregado. O efeito da discretização do domínio e a ordem de aproximação dos elementos finitos também serão apresentados.

Diferentes poços quânticos com espessura variado de 50 a 300 Å foram utilizados. Os valores dos parâmetro de material utilizados são apresentados na Tabela 5.1. A Tabela 5.2 apresenta uma comparação dos seis autovalores obtidos para o poço quântico de 300 Å de espessura. Foi utilizada uma malha de 1100 elementos finitos de primeira ordem. A Figura 5.1 mostra o gráfico dos

autoestados para o caso dos poços de: (a) 50 Å e (b) 300 Å. A Figura 5.2 ilustra o comportamento da solução MEF em função da densidade da malha comparada com os autovalores calculados por HEF e com os apresentados em (MACHADO et al., 2000). A densidade da malha é definida como o número de elementos finitos 1D na camada de menor tamanho dividido pela largura dessa camada. Neste gráfico, verifica-se que obtêm-se valores razoáveis para o estado fundamental mesmo para uma baixa densidade de pontos de 0,25. No caso do sexto autoestado, necessita-se de uma densidade um pouco maior de pontos para se obter valores razoáveis, mesmo assim, é possível obter autoestados com valores aceitáveis ainda com uma densidade de pontos abaixo de 0,5. O fato do cálculo do sexto autoestado necessitar de mais pontos do que o estado fundamental já era esperado visto que quanto mais alto o nível de energia, mais complexa é a autofunção associada.

Tabela 5.1 – Valores dos parâmetro do material.

Material	Massa efetiva do elétron	Potencial (eV)
Al _{0,32} Ga _{0,68} As	0,0919	0,225
GaAs	0,0670	0,000

Tabela 5.2 – Autovalores para um poço de 300 Å de comprimento, massa efetiva $m^*=(0,067+0,083x)m_0$, onde $x=0,32$ é a quantidade de Al. A espessura da barreira é de 300 Å.

Estado	QWS MEF (eV)	QWS HEF (eV)	Ref. (MACHADO et al., 2000) (eV)
1º	0,0049	0,0050	0,005
2º	0,0197	0,0201	0,020
3º	0,0443	0,0451	0,045
4º	0,0785	0,0800	0,079
5º	0,1220	0,1245	0,122
6º	0,1736	0,1779	0,174

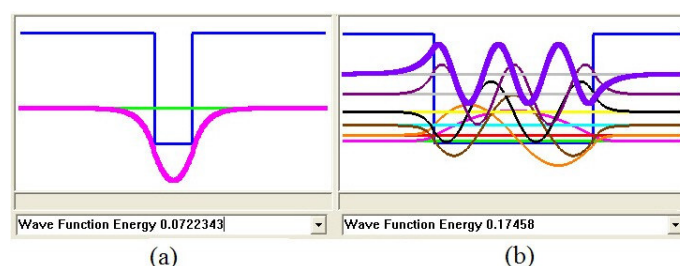


Figura 5.1 – Autoestados para poços quânticos simples de comprimento (a) 50 Å e (b) 300 Å, obtidos com o programa QWS.

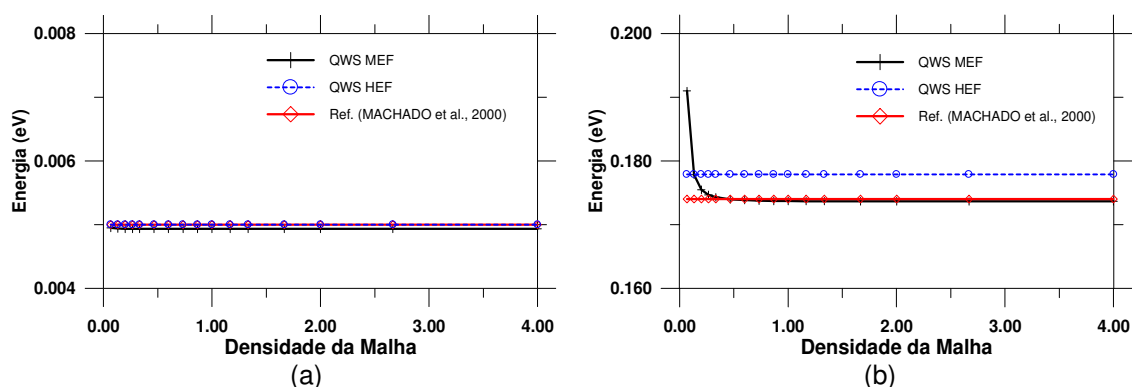


Figura 5.2 – Precisão da solução MEF de ordem 1 em função da densidade da malha, comparada com as computadas por HEF e em (MACHADO et al., 2000). Caso do poço com 300 Å de largura. (a) Energia do estado fundamental. (b) Energia do sexto autoestado.

Para o caso do poço de largura 300 Å foi utilizada uma malha de 4400 elementos finitos 1D de primeira ordem, e o tempo médio de execução de cada caso deste teste é de aproximadamente 3 segundos.

5.1.2 Validação do Módulo 2D para Fios Quânticos

Essa seção apresenta dois casos utilizados para validar o módulo de resolução da Equação de Schrödinger 2D. O primeiro caso é de um poço quântico simples modelado bidimensionalmente. O segundo caso é de um fio quântico apresentado em (RAM-MOHAN, 2002). Para criar o modelo bidimensional foi utilizado o programa LEVSOFT, que permite atribuir materiais, condições de contorno e gerar a malha de modelos geométricos 2D. A visualização dos resultados também é feita pelo LEVSOFT.

5.1.2.1 Poços Quânticos Simples

Este é o caso do poço quântico simples apresentado em 5.1.1. O modelo bidimensional desse poço quântico é exibido na Figura 5.3, que mostra: (a) a aplicação das condições de contorno e, (b) a atribuição de materiais. Os contornos verticais hachurados na Figura 5.3 (a) indicam a atribuição de condição de contorno de Dirichlet homogênea ($\psi = 0$). Nenhuma condição é imposta explicitamente aos contornos horizontais o que, na formulação de elementos finitos utilizada, corresponde à condição de contorno de Neumann homogênea $\frac{\partial \psi}{\partial n} = 0$. Dessa forma a variação da função de onda na direção perpendicular ao contorno é igual a zero. Todas as funções de onda que interessam, no caso de poços quânticos, obedecem a esta condição pois são contínuas ao longo do eixo vertical. Porém, outras soluções obtidas na aproximação bidimensional, sem sentido físico para os poços quânticos, também obedecem estas condições de contorno. A identificação dos estados não físicos é feita por inspeção visual das funções de ondas resultantes. Na Figura 5.3 (b) a área escura corresponde ao poço de largura W e as áreas claras às barreiras, de largura $W_b = 300 \text{ \AA}$.

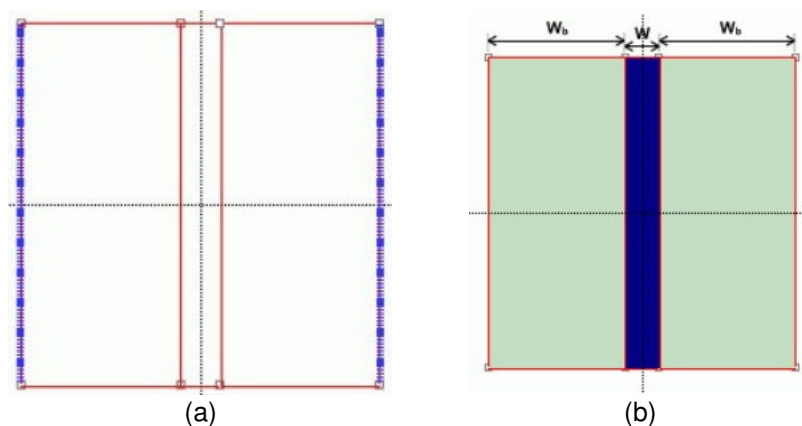


Figura 5.3 – Modelo bidimensional do poço quântico simples. (a) Aplicação das condições de contorno. (b) Atribuição de materiais.

Na Tabela 5.3 há duas colunas para o poço com largura de $300 \text{ \AA}$ diferenciadas pelos rótulos M1 e M2. A coluna M1 refere-se aos autovalores

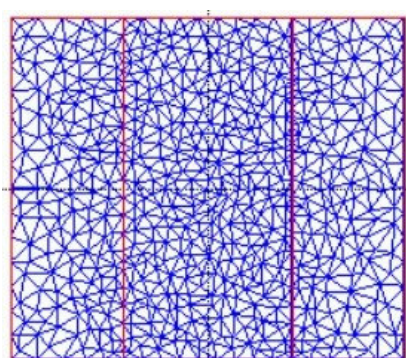
obtidos com a malha mostrada na Figura 5.4, que tem 1278 elementos finitos 2D de primeira ordem (a) e M2 aos autovalores obtidos com a malha mais densa mostrada na Figura 5.4, que tem 53273 elementos finitos 2D de primeira ordem (b).

Tabela 5.3 – Autovalores, em eV, calculados pelo MEF 2D com duas malhas diferentes, comparadas com a referência.

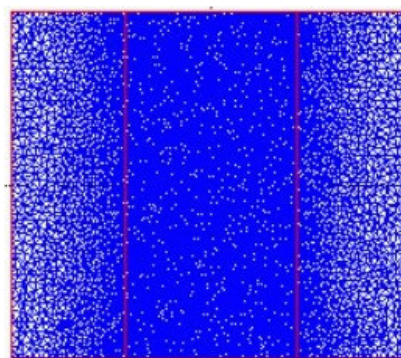
Estado	MEF 2D M1 (eV)	MEF 2D M2 (eV)	Ref. MACHADO et al. (2000) (eV)
1º	0,0051	0,0049	0,005
2º	0,0208	0,0199	0,020
3º	0,0479	0,0448	0,045
4º	0,0853	0,0795	0,078
5º	NE*	0,1236	0,120
6º	NE*	0,1762	0,174

* Não Encontrado

Fonte: Machado et al. (2000)



(a) Malha M1



(b) Malha M2

Figura 5.4 – Detalhes das malhas utilizadas no poço de largura 300Å.

A Figura 5.5 mostra as soluções do primeiro e do sexto estado do poço quântico simples obtidas com a malha M2. As curvas abaixo das imagens representam as intensidades das respectivas funções de onda ao longo de um eixo horizontal. Nota-se que estas curvas são semelhantes às obtidas com a solução unidimensional.

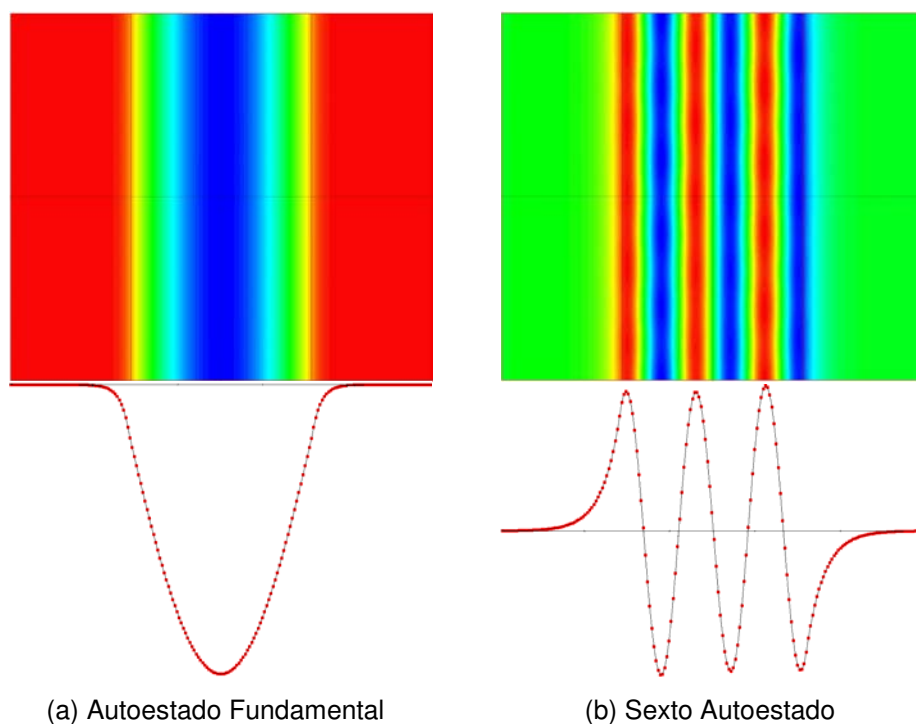


Figura 5.5 – Soluções do poço quântico simples.

Para a malha M1 o tempo de execução é de aproximadamente 6 segundos e, para a malha M2, de aproximadamente 17 segundos.

5.1.2.2 Fio Quântico

A implementação bidimensional do método dos elementos finitos da Equação de Schrödinger possibilita a simulação de fios quânticos. Aqui são reproduzidos alguns casos testes apresentados em (RAM-MOHAN, 2002) para os níveis de energia do elétron em um fio quântico de GaAs/AlGaAs. Foram estudados fios quânticos com seção transversal em formato retangular. A Figura 5.6 mostra o modelo geométrico do fio quântico utilizado para a resolução do problema. A região clara na Figura 5.6-(a) corresponde à barreira de AlGaAs e a região escura ao fio quântico de GaAs. O retângulo maior tem dimensões de (700 x 650) Å e o retângulo menor de (100 x 50) Å. As linhas hachuradas na Figura 5.6-(b) indicam a atribuição da condição de contorno de Dirichlet homogênea ($\psi = 0$). Os valores dos parâmetro de material utilizados são apresentados na Tabela 5.4.

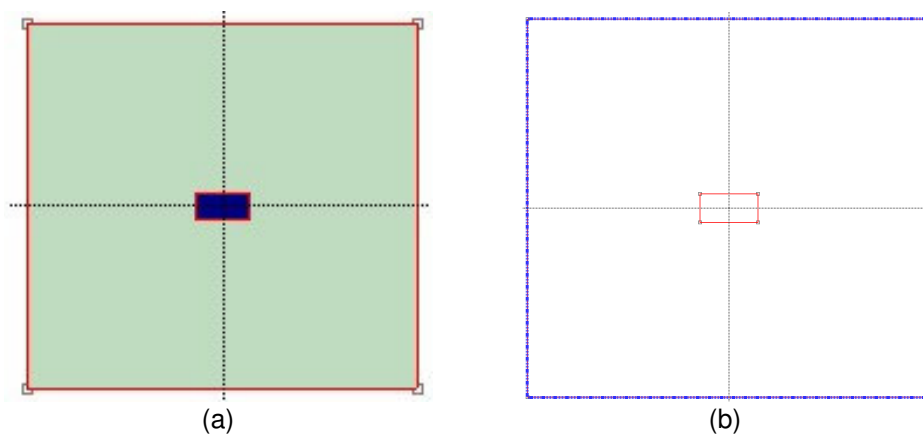


Figura 5.6 – Modelo geométrico do fio quântico. (a) Atribuição de materiais. (b) Atribuição das condições de contorno.

Tabela 5.4 – Valores dos parâmetro do material.

Material	Massa efetiva do elétron	Potencial (eV)
$\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}$	0,0858	0,2760
GaAs	0,0665	0,0000

Como em (RAM-MOHAN, 2002), a quebra das degenerescências de certos níveis do fio quântico de seção transversal retangular quando a altura da barreira corresponde ao deslocamento da banda do meio envolvente é evidenciado, como mostra a Figura 5.7 que apresenta os valores de energia em função da altura do potencial das barreiras. Em (RAM-MOHAN, 2002) são apresentados valores de energia do elétron calculados também pelo método dos elementos finitos, mas usando elementos do tipo Hermite, que garantem a continuidade da função de onda e suas derivadas nas interfaces dos elementos finitos (continuidade C^1). A Figura 5.7 apresenta os resultados obtidos neste trabalho comparados com os publicados em (RAM-MOHAN, 2002) para o fio quântico de $100 \times 50 \text{ \AA}$. Os níveis de energia são nomeados usando números quânticos associados com o poço quântico infinito 1D nas direções x e y , (n_x, n_y) . A concordância é excelente, apesar deste trabalho usar elementos finitos lineares de Lagrange (continuidade C^0). A Tabela 5.5 mostra os valores de energia dos estados do fio quântico cujo modelo bidimensional é mostrada na Figura 5.6. A Coluna “MEF 2D” apresenta os valores de energia calculados pelo programa desenvolvido neste trabalho e a última coluna apresenta os

valores calculados na referência (RAM-MOHAN, 2002). Os números (x,y) que representam os estados se referem quantidade de lóbulos nas direções espaciais x e y , respectivamente. Por exemplo, (3,1) representada na Figura 5.8 corresponde a 3 lóbulos na direção x e 1 lóbulo na direção y .

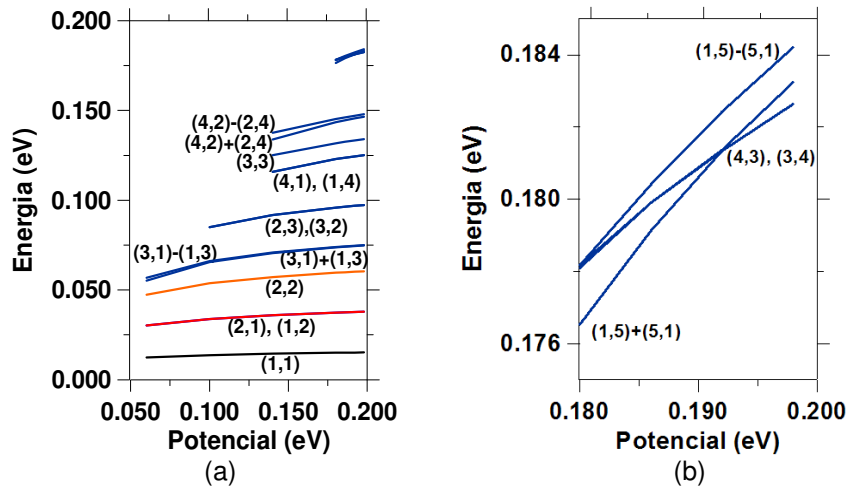


Figura 5.7 – (a) Autovalores de um fio quântico em função da altura da barreira. (b) Detalhe de (a) evidenciando a quebra das degenerescências.

Tabela 5.5 – Níveis de energia do elétron no fio quântico GaAs/ $\text{Al}_{0,37}\text{Ga}_{0,63}\text{As}$ de $10 \times 5 \text{ nm}^2$

Estado	MEF 2D (eV)	Ref. (RAM-MOHAN, 2002) (eV)
1,1	0,0309	0,0309
2,1	0,0531	0,0531
3,1	0,0896	0,0895
1,2	0,0974	0,0974
2,2	0,1191	0,1190
4,1	0,1383	0,1382
3,2	0,1541	0,1540
1,3+5,1	0,1826	0,1828

A Figura 5.8 mostra o gráfico da solução (3,1) do fio quântico.

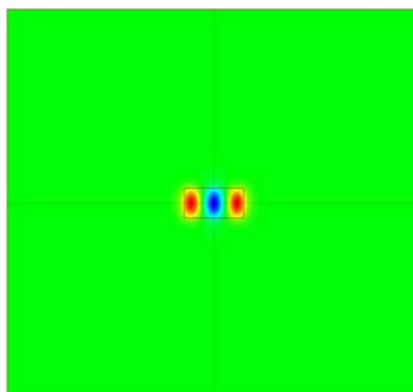


Figura 5.8 – Gráfico do autoestado (3,1).

Neste caso foi utilizada uma malha com 2414 elementos finitos 2D de primeira ordem, e o tempo médio de execução de cada caso deste teste é de aproximadamente 10 segundos.

5.1.3 Validação do Módulo 2D com Simetria Axial para Pontos Quânticos

O módulo MEF 2D com simetria axial permite a simulação de pontos quânticos. Este módulo, embora operacional, requer mais testes e algumas implementações adicionais.

A Tabela 5.6 mostra os valores de energia do elétron, para o estado fundamental, dentro de diferentes formatos de ponto quântico: cilindro, lente e cone. Esse caso reproduz os resultados de (LEE; et al., 2004), em que se nota que quanto menor o volume do ponto, maiores são as energia de confinamento. A Figura 5.9 mostra o modelo geométrico utilizado e os dois primeiros autoestados para cada um dos três formatos de ponto quântico pesquisados.

Tabela 5.6 – Energia do estado fundamental do elétron no ponto quântico $\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}/\text{InP}$.

Formato	MEF 2D-Axial (eV)	Ref. (LEE; et al., 2004) (eV)
Cilindro	0,0696	0,0707
Lente	0,0838	0,0852
Cone	0,1200	0,1216

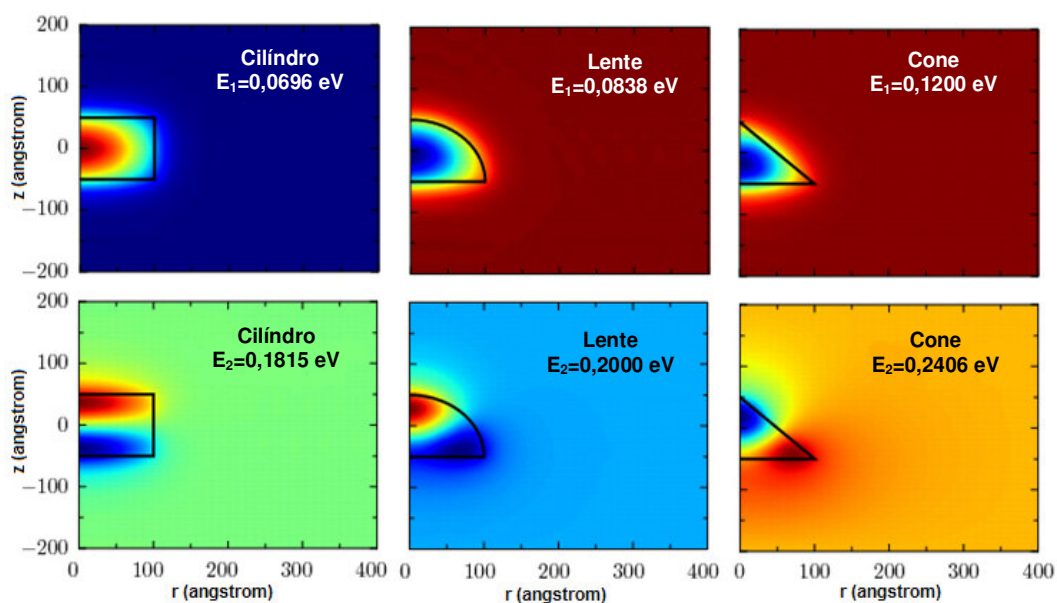


Figura 5.9 – Autovalores e autofunções para pontos quânticos de diferentes formatos.

A Figura 5.10-(a) mostra a imagem da malha de elementos finitos utilizada na resolução do ponto quântico em forma de lente, com 40485 elementos triangulares de primeira ordem. Na Figura 5.10-(b) as linhas hachuradas mostram a atribuição da condição de contorno de Dirichlet homogênea ($\psi = 0$).

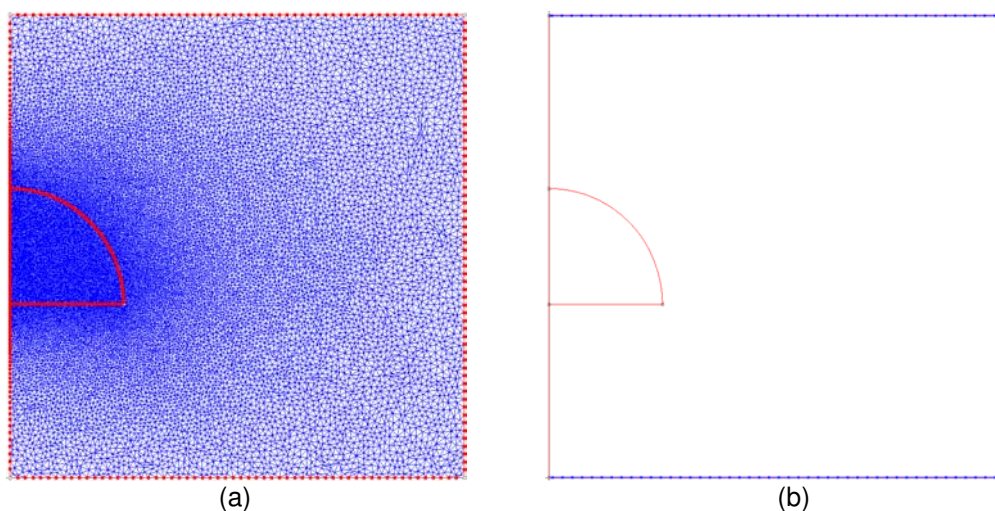


Figura 5.10 – Modelo geométrico do ponto quântico em forma de lente. (a) Malha de elementos finitos. (b) Condições de contorno.

Neste caso foram utilizados elementos finitos 2D com simetria axial de primeira ordem. Para o ponto quântico com formato de cone foi montada uma malha

com 17.552 elementos cujo tempo de execução é de aproximadamente 67 segundos. Para o ponto quântico com formato de cilindro foi montada um malha com 40.360 elementos cujo tempo de execução é de aproximadamente 195 segundos. Para o ponto quântico com formato de lente foi montada um malha com 30.436 elementos cujo tempo de execução é de aproximadamente 147 segundos.

5.1.4 Validação do Cálculo Autoconsistente para Poços Quânticos

Esta seção apresenta os resultados dos casos de validação do módulo que realiza o cálculo autoconsistente do potencial, funções de onda e energias de elétrons na banda de condução de poços quânticos dopados.

5.1.4.1 Poço Quântico Simples

Esse caso é apresentado em (RAM-MOHAN, 2002) onde são calculadas as energias e os potenciais de um poço quântico simples de GaAs/Al_{0,35}Ga_{0,65}As com dopagem modular, tipo *n* com átomos de Si, e com densidade uniforme de impurezas nas barreiras vizinhas do poço quântico variando de 10^{16} até 10^{19} cm^{-3} , como mostra o esquema da Figura 5.11. Esse tipo de montagem é muito utilizado em dispositivos HEM (“High Electron Mobility”) pois nestes dispositivos o canal de condução e a localização das impurezas separa as cargas eletrônicas aumentando a mobilidade dos elétrons. A largura do poço é de 100 Å. A precisão adotada para avaliação do processo de convergência dos cálculos, conforme definida na Equação 2.19, foi de 10^{-4} .

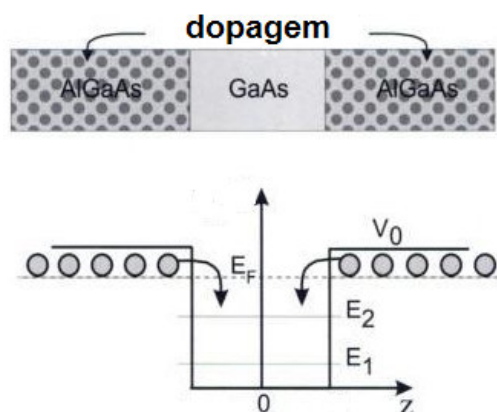


Figura 5.11 – Esquema do caso do poço quântico simples com dopagem modulada.

A Figura 5.12-(a) mostra o resultado obtido com o código implementado para o caso com concentração de dopantes de 10^{16} cm^{-3} e a Figura 5.12-(b) o resultado obtido por (RAM-MORAN, 2002). As Figuras 6.20 a 6.22 mostram, no mesmo esquema, os resultados para concentração de dopantes de 10^{17} cm^{-3} a 10^{19} cm^{-3} . A Tabela 5.7 mostra os valores de energia dos estados confinados para o caso com densidade de dopantes de 10^{19} cm^{-3} . A Coluna “QWS” mostra os valores calculados pelo programa desenvolvido neste trabalho e a última coluna os valores calculados na referência (RAM-MORAN, 2002).

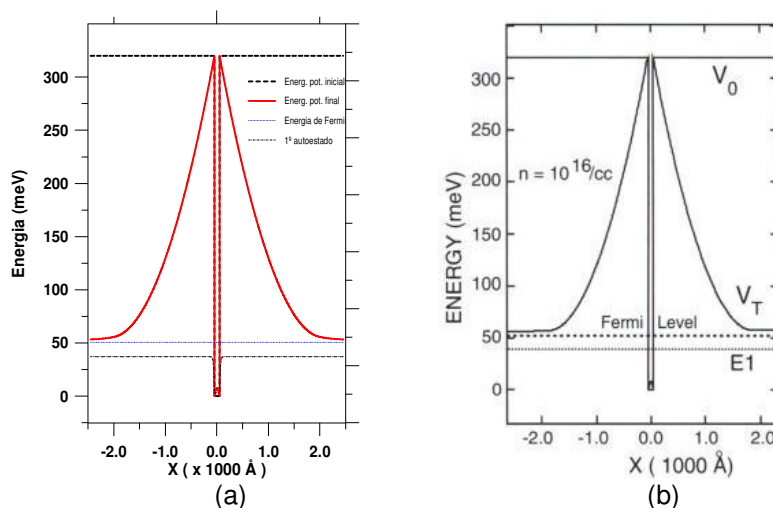


Figura 5.12 – Formato final do potencial da banda de condução, valores de energia de elétrons e energia de Fermi para densidade de dopantes de 10^{16} cm^{-3} . (a) Resultado obtido pelo QWS. (b) Resultado de (RAM-MORAN, 2002).

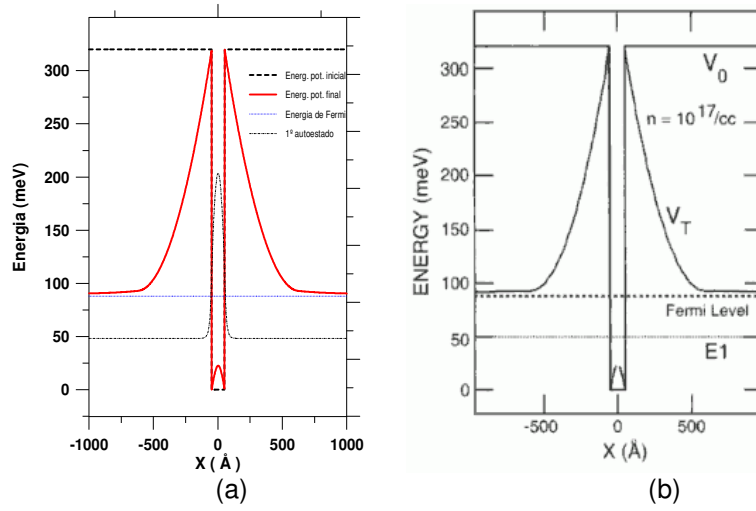


Figura 5.13 – Formato final do potencial da banda de condução, valores de energia de elétrons e energia de Fermi para densidade de dopantes de 10^{17} cm^{-3} . (a) Resultado obtido pelo QWS. (b) Resultado de (RAM-MORAN, 2002).

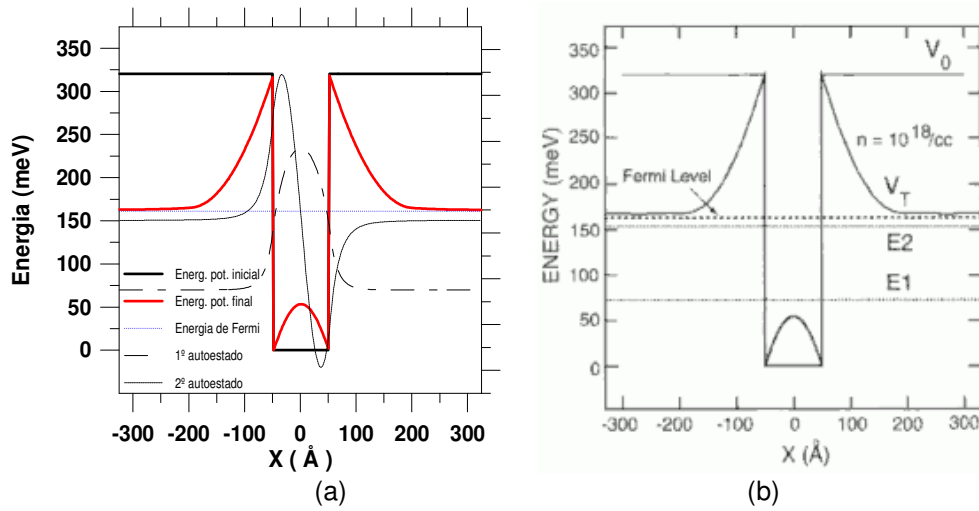


Figura 5.14 – Formato final do potencial da banda de condução, valores de energia de elétrons e energia de Fermi para densidade de dopantes de 10^{18} cm^{-3} . (a) Resultado obtido pelo QWS. (b) Resultado de (RAM-MORAN, 2002).

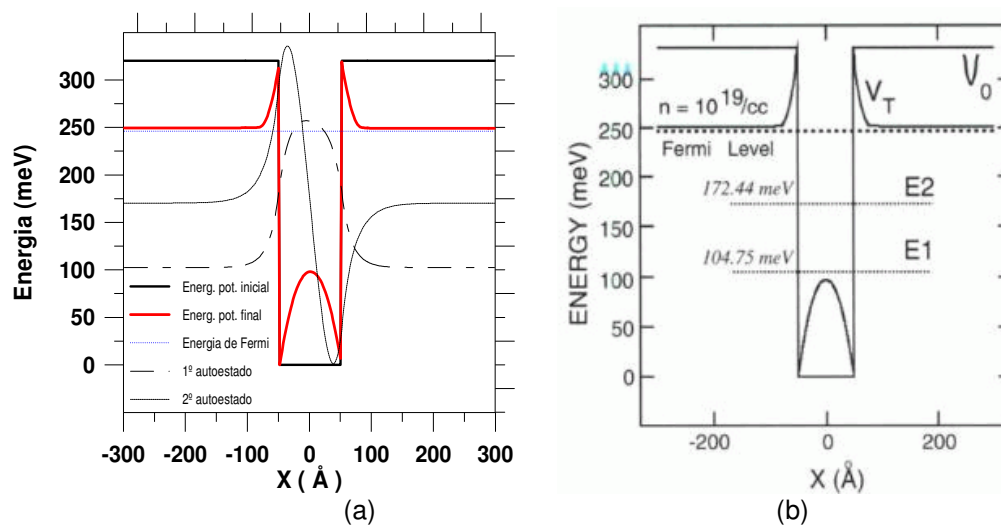


Figura 5.15 – Formato final do potencial da banda de condução, valores de energia de elétrons e energia de Fermi para densidade de dopantes de 10^{19} cm^{-3} . (a) Resultado obtido pelo QWS. (b) Resultado de (RAM-MORAN, 2002).

Tabela 5.7 – Autovalores, em eV, para o caso do poço simples com densidade de dopantes de 10^{19} .

Estado	QWS	Ref. (RAM-MOHAN, 2002) (eV)
1 ^o	0,1024	0,1047
2 ^o	0,1702	0,1724

Em todos os casos foi utilizado uma malha de 3966 elementos finitos 1D de primeira ordem e o tempo de execução mais longa foi de aproximadamente 128 minutos.

5.1.4.2 Poço Quântico Assimétrico

Foram reproduzidos os resultados do cálculo de autoestados de um sistema de GaAs/ $\text{In}_{0,24}\text{Ga}_{0,76}\text{As}/\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ com dopagem tipo n com átomos de Si. Os valores dos parâmetros de material utilizados são apresentados na Tabela 5.8. A massa efetiva utilizada foi a mesma para todos os materiais, do modo como foi resolvido em (CAETANO, 2003). O diagrama do alinhamento de banda deste caso é mostrado na Figura 5.16. A região dopada é representada pelos

círculos na camada de AlGaAs. Entre o poço de InGaAs e a região dopada existe uma largura w , não dopada, de AlGaAs.

Tabela 5.8 – Valores dos parâmetro do material.

Material	Massa efetiva do elétron	Potencial (eV)
$\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$	0,067	0,4330
GaAs	0,067	0,2080
$\text{In}_{0,24}\text{Ga}_{0,76}\text{As}$	0,067	0,0000

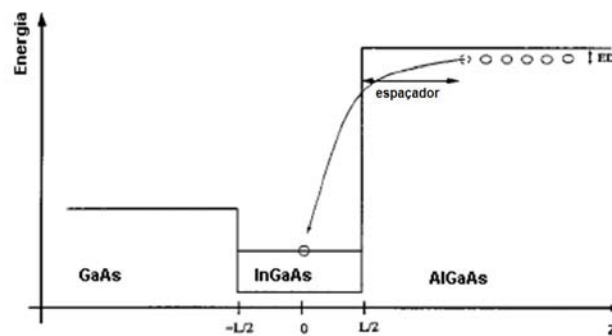


Figura 5.16 – Diagrama de alinhamento da banda de condução.

A Figura 5.17 mostra o gráfico comparativo entre os resultados obtidos neste trabalho e os obtidos por (CAETANO, 2003) da densidade de cargas negativas em função da largura da camada que separa o poço da região dopada, w .

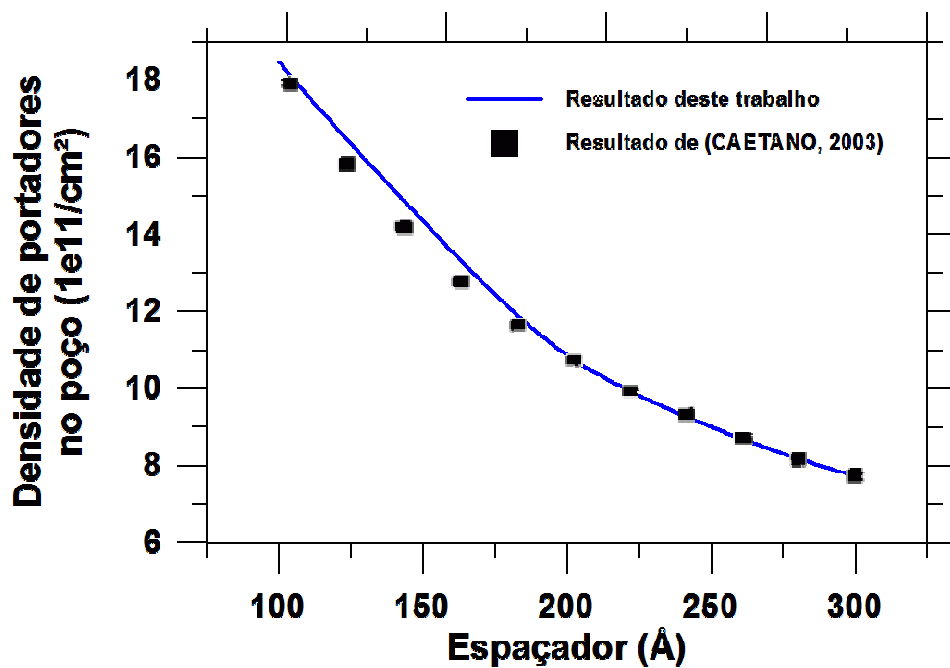


Figura 5.17 – Variação da densidade de carga de elétrons no poço em função da largura do espaçador.

Os gráficos da banda de condução, do autoestado fundamental e da Energia de Fermi obtidos para um poço de 150 Å e $w = 300$ Å é mostrada na Figura 5.18.

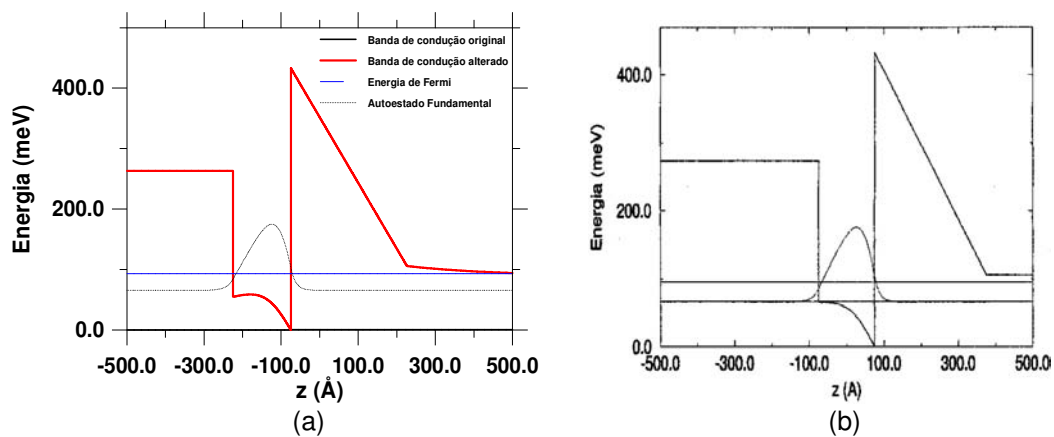


Figura 5.18 – Gráfico dos resultados obtidos para um poço de 150 Å e $w=300$ Å.
(a) Resultado obtido com o código implementado neste trabalho.
(b) Resultado de (CAETANO, 2003).

Neste caso, foram montadas malhas com elementos finitos 1D de primeira ordem com uma densidade de 2 elementos por Å. O tempo médio de execução é de aproximadamente 4,79 minutos.

Além desses resultados de validação foi realizado também um estudo, não apresentado em (CAETANO, 2003), da variação das energias dos estados confinados, da Energia de Fermi e da largura da região de depleção em função da largura do espaçador. O resultado dessa variação é apresentado na Figura 5.19. É interessante notar que o segundo autoestado desaparece para valores de largura do espaçador maiores que 100 Å, quando a Energia de Fermi torna-se menor que o valor de energia desse estado. Se a energia de Fermi é menor que o valor de energia de um estado, significa que ele não é populado de elétrons.

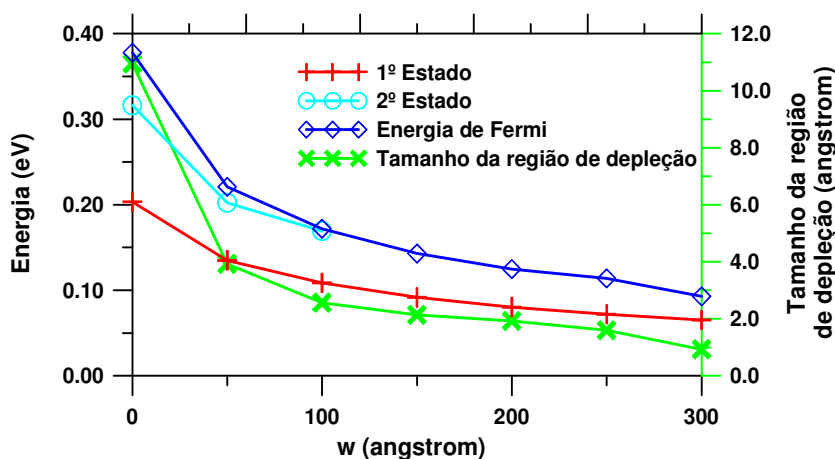


Figura 5.19 – Variação das energias dos autoestados, da energia de Fermi e do tamanho da região de depleção em função da largura do espaçador w .

5.1.4.3 Poços Quânticos Assimétricos Acoplados

O módulo de cálculo autoconsistente reproduziu os resultados de uma heteroestrutura de poços quânticos assimétricos acoplados apresentada em (HUANG; et al., 1995), formada de $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$. A estrutura é apresentada na Figura 5.20. Os poços possuem larguras de 59 Å (poço da esquerda) e 21 Å (poço da direita), a barreira central entre os poços possui

largura de 11 Å. Somente o poço da esquerda é dopado com densidade de $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

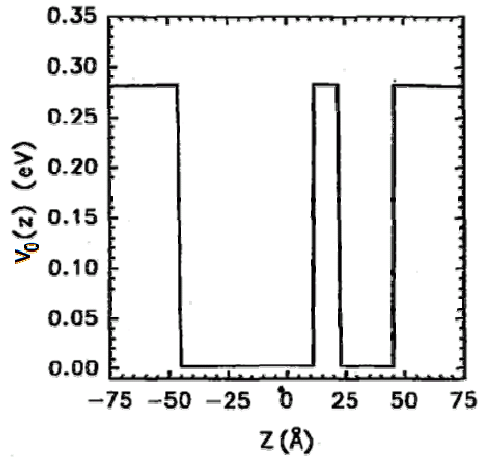


Figura 5.20 – Perfil da energia da banda de condução do sistema de poços quânticos assimétricos acoplados (HUANG; et al., 1995).

A Figura 5.21 mostra o gráfico da variação da diferença de energia do primeiro para o segundo estado em função da variação da largura do poço da esquerda. Há três curvas neste gráfico. A primeira corresponde aos resultados obtidos por (HUANG; et al., 1995). As duas restantes foram obtidas com resultados obtidos com o programa de cálculo autoconsistente desenvolvido neste trabalho, uma utilizando a mesma massa efetiva para toda a estrutura ($m^*=0,067$), método normalmente utilizado em trabalhos realizados na época em que a referência utilizada foi publicada e o outro utilizando os valores de massa efetiva apresentados na Tabela 5.9, calculados a partir da formulação implementada no QWS. Nota-se que a alteração da massa efetiva influencia em alguns milielétron-volts o resultado do cálculo autoconsistente.

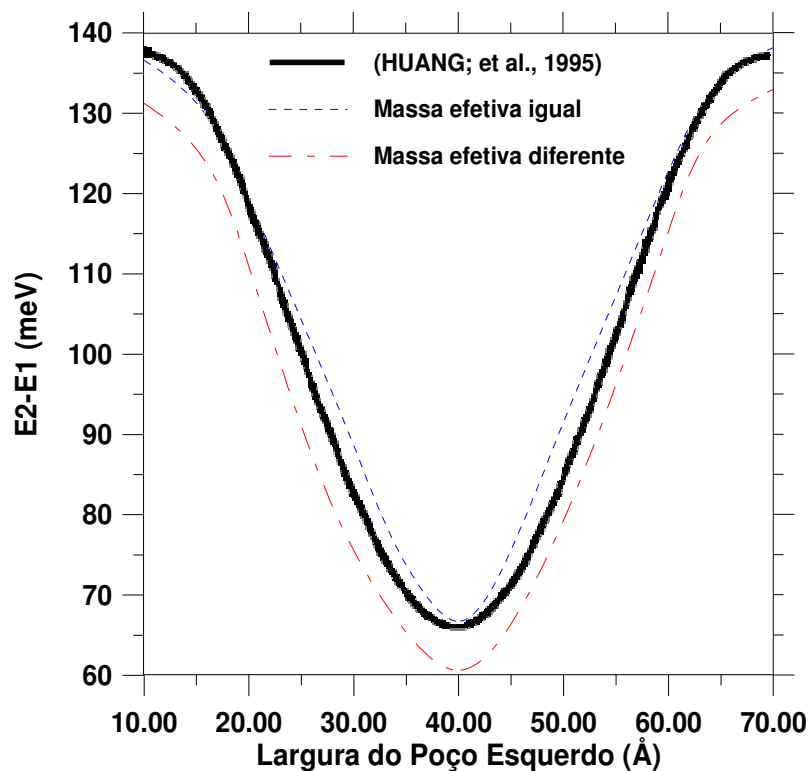


Figura 5.21 – Diferença de energia entre o primeiro e o segundo estado em função da largura do poço da esquerda.

Tabela 5.9 – Valores dos parâmetro do material calculados no QWS.

Material	Massa efetiva do elétron	Potencial (eV)
$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	0,094	0,280
GaAs	0,067	0,000

Neste caso, foram montadas malhas com elementos finitos 1D de primeira ordem com uma densidade de 3 elementos por Å. O tempo médio de execução é de aproximadamente 5,1 minutos.

5.1.4.4 Poço Quântico Duplo Simétrico

Tentou-se reproduzir o caso de um poço quântico duplo simétrico de $\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}/\text{GaAs}$ com dopagem modular esquematizado na Figura 5.22, na qual GaAs é o material das regiões 4 e 7 e AlGaAs, das regiões restantes. Os valores de parâmetros dos materiais utilizados são apresentados na Tabela 5.10. L_{d1} e L_{d2} representam o tamanho das regiões 2 e 9, as quais são

dopadas com uma concentração de impurezas tipo n de $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Nesse trabalho, $L_{d1} = L_{d2}$, com largura suficiente para doar elétrons para popular completamente todos os estados do poço. L_{s1} , L_{s2} e L_b representam a largura das camadas de AlGaAs não dopadas. L_{w1} , L_{w2} representam a largura dos poços. Os valores utilizados foram as seguintes: $L_{s1} = L_{s2} = 10 \text{ Å}$; $L_b = 25 \text{ Å}$, $L_{w1} = L_{w2} = 100 \text{ Å}$; $L_{d1} = L_{d2} = 1000 \text{ Å}$.

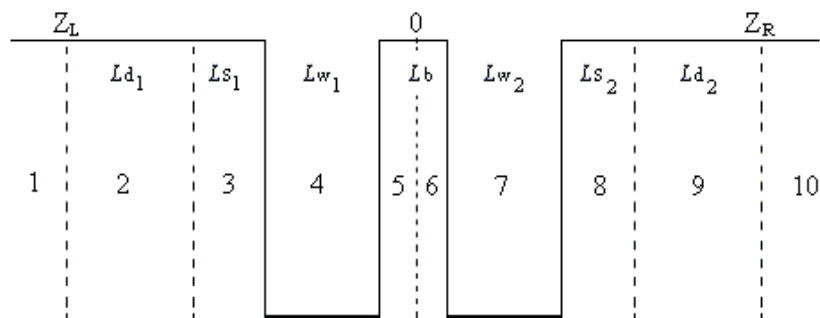


Figura 5.22 – Esquema do poço quântico duplo simétrico.

Tabela 5.10 – Valores de parâmetro dos materiais, calculados pelo QWS.

Material	Massa efetiva do elétron	Potencial (eV)
$\text{Al}_{0,33}\text{Ga}_{0,67}\text{As}$	0,096	0,250
GaAs	0,067	0,000

A Figura 5.23 mostra as soluções calculadas pelo programa desenvolvido nesse trabalho e os valores calculados por (UNGAN; et al., 2005). Os valores de energia dos autoestados são apresentados comparativamente na Tabela 5.11. No gráfico, todas as energias tem como referência a Energia de Fermi que é o zero no eixo vertical.

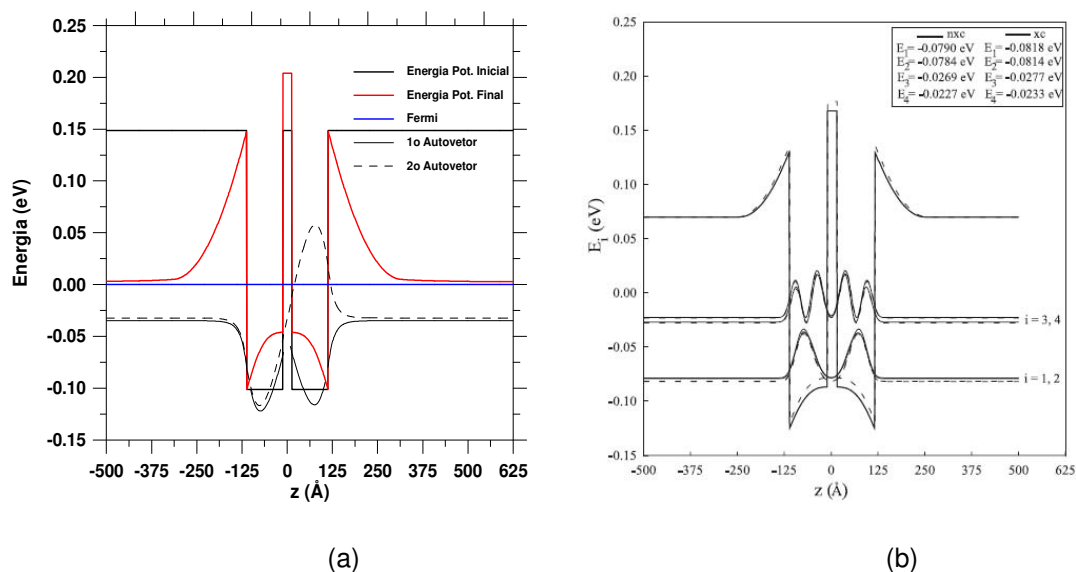


Figura 5.23 – Gráfico dos resultados, autoestados obtidos. (a) Resultado obtido com o código implementado neste trabalho. (b) Resultado de (UNGAN; et al, 2005).

Tabela 5.11 – Valores de energia dos autoestados.

Autoestado	Calculado QWS (eV)	Ref. (UNGAN; et al., 2005) (eV)
1º	0,066	0,046
2º	0,069	0,047
3º	0,146	0,098
4º	0,161	0,140

Observando a Tabela 5.11 e a Figura 5.23 nota-se que os resultados obtidos não coincidem com os de (UNGAN; et al.; 2005). O terceiro e quarto estados não são apresentados na Figura 5.23-(a). Os valores de energias desses dois estados calculados pelo QWS são maiores que a Energia de Fermi e, por isso, não são populados por elétrons. Observando o perfil de energia da banda de condução na região das barreiras e levando em conta os resultados apresentados na validação do poço quântico simples, em que se variava a concentração de dopantes na região das barreiras, parece que a concentração de impurezas deveria ser maior do que a indicada no artigo. Contudo, o aumento na concentração de dopantes teria impacto nas energias no sentido contrário ao esperado, pois as energias tenderiam a aumentar. Apesar dessas diferenças, a largura da região de depleção calculada no QWS, de

aproximadamente 232 Å, está em bom acordo com o valor estimado a partir dos gráficos apresentados no artigo, $Ld_1 = Ld_2 = 237$ Å. Será necessário uma análise mais aprofundada dos métodos de cálculo utilizados em (UNGAN; et al.; 2005) para compreender as razões desse descasamento de valores.

5.2 Resultados

Esta seção apresenta alguns casos em que os programas desenvolvidos neste trabalho foram utilizados para análise de nanoestruturas semicondutoras.

5.2.1 Múltiplos Poços Quânticos Assimétricos

O módulo unidimensional foi utilizado para análise de um caso de múltiplos poços quânticos assimétrico, com uma heteroestrutura composta por um conjunto de camadas de ligas binárias, ternárias e quaternárias: $Al_{0,175}Ga_{0,2986}InAs$ (990 Å), $InGa_{0,468}As$ (100 Å), $Al_{0,175}Ga_{0,2986}InAs$ (30 Å), e $InAs$ (90 Å) entre barreiras de InP . Os valores dos parâmetro de material utilizados são apresentados na Tabela 5.12.

Tabela 5.12 – Valores dos parâmetro do material calculados pelo QWS.

Material	Massa efetiva do elétron	Potencial (eV)
$Al_{0,175}Ga_{0,2986}In_{0,5264}As$	0,0656	0,5050
$In_{0,532}Ga_{0,468}As$	0,0430	0,2487
$InAs$	0,0259	0,0000
InP	0,0795	0,5122

O gráfico dos autoestados obtidos na resolução desse caso são apresentados na Figura 5.24. A Figura 5.25 mostra os detalhes dos autoestados da região retangular marcada na Figura 5.24. Esses resultados foram obtidos usando uma malha de 7294 elementos finitos 1D de primeira ordem, com uma densidade 3 elementos por Å. Os valores de energia do elétron estão na Tabela 5.13 para efeito comparativo dos autovalores obtidos pelo QWS HEF e pelo QWS MEF.

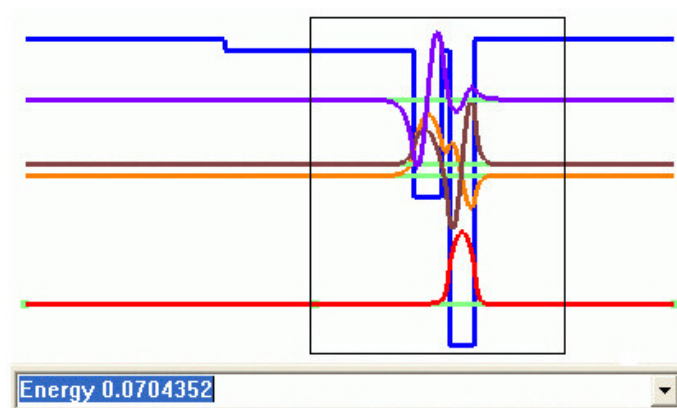


Figura 5.24 – Autoestados do caso de múltiplos poços quânticos.

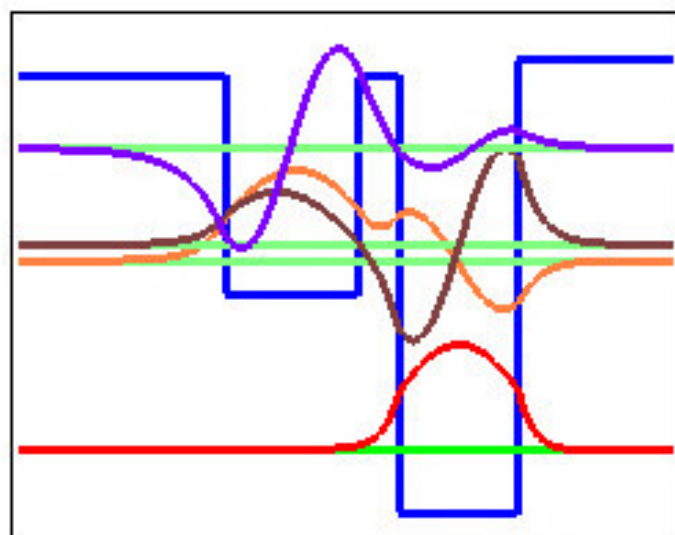


Figura 5.25 – Detalhe da região de interesse.

Tabela 5.13 – Autovalores para o sistema de múltiplos poços quânticos.

Estado	QWS MEF (eV)	QWS HEF (eV)
1º	0,0700	0,0703
2º	0,2865	0,2866
3º	0,3033	0,3036
4º	0,4141	0,4141
5º	0,5055	0,5055
6º	0,5070	0,5070
7º	0,5093	0,5093

A Figura 5.26 apresenta o gráfico da variação do valor de energia do: (a) estado fundamental e (b) do terceiro estado, em função da densidade de

elementos da malha. Como no caso do poço simples, obtêm-se valores razoáveis de energia já com uma densidade de pontos um pouco acima de 0,5.

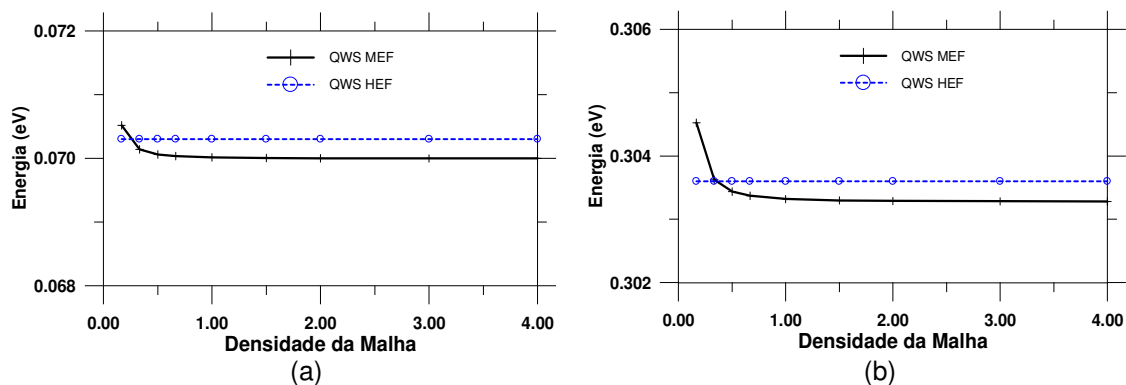


Figura 5.26 – Precisão da solução MEF de ordem 1 em função da densidade de elementos da malha, comparada com as computadas por HEF. (a) variação da energia do estado fundamental. (b) variação da energia do terceiro autoestado.

Esta estrutura foi calculada como uma primeira aproximação para um problema que é, de fato, 3D, pois InAs não cresce como uma camada uniforme sobre uma camada de AlGaInAs, mas ilhas são formadas, que são os pontos quânticos.

5.2.2 Poço-Ponto Quântico Acoplados

O módulo 2D com simetria axial foi utilizada para calcular o mesmo sistema mostrado na seção anterior que, como já foi mencionado, é na realidade um sistema de poço-ponto quântico acoplado. Esse caso foi modelado no LEVSOFT e resolvido com o módulo de resolução com elementos finitos 2D com simetria axial. A Figura 5.27 mostra a malha de elementos finitos e, em linhas vermelhas, o modelo geométrico, utilizados neste estudo. O formato do ponto quântico foi desenhado de forma a reproduzir, na medida do possível, a geometria real dos pontos quânticos produzidos no laboratório. Neste modelo foi incluído também o “wet layer”, citado no Capítulo 2.

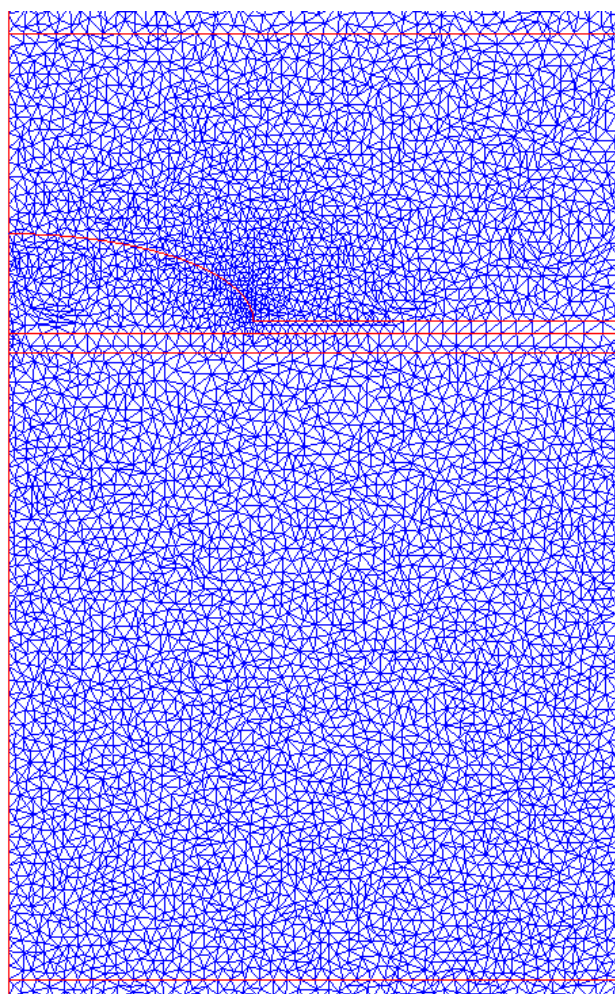


Figura 5.27 – Detalhe da malha na região do ponto quântico.

As Figura 5.28 corresponde às funções de onda obtidos pelo MEF 2D com simetria axial, a da esquerda mostrando o primeiro estado do ponto e a da direita, mostrando o primeiro estado do poço quântico. Os resultados obtidos, embora pareçam naturais, auxiliaram os pesquisadores diretamente envolvidos no desenvolvimento físico dos dispositivos detectores de infravermelho baseados em poços e pontos quânticos, a compreender melhor este tipo de estrutura. A Tabela 5.14 mostra os valores de energia encontrados pela aproximação unidimensional e pela aproximação bidimensional com simetria axial correspondentes aos dois estados mostrados na Figura 5.28.

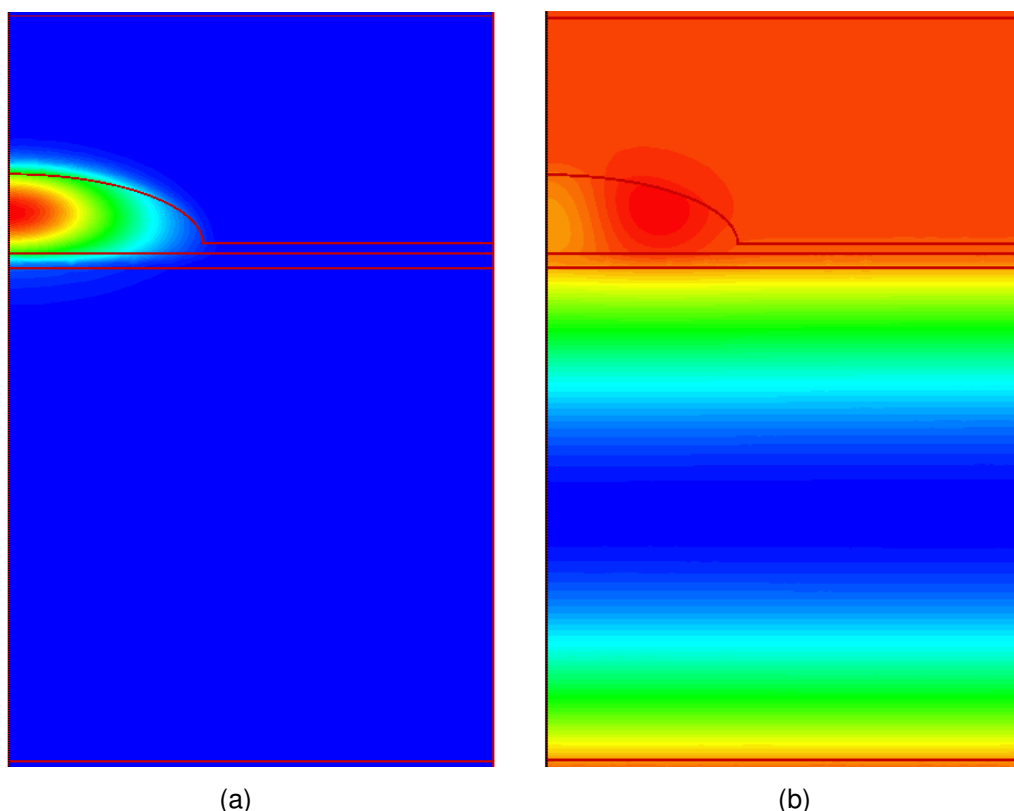


Figura 5.28 – Autoestados do sistema poço ponto quântico acoplado. (a) Primeiro estado do ponto quântico. (b) Primeiro estado do poço quântico.

Tabela 5.14 – Autovalores para o sistema de múltiplos poços quânticos calculados com o MEF 1D e com o MEF 2D-Axial.

Estado	MEF 1D (eV)	MEF 2D-Axial(eV)
1º do Ponto	0,0700	0,1170
1º do Poço	0,2865	0,2510

Nota-se que valores de energia encontrados são bem diferentes nos dois casos. Para o primeiro estado do ponto, a energia calculada pela aproximação bidimensional com simetria axial é maior devido ao menor volume comparado à sua representação unidimensional, como verificado em (LEE; et al., 2004). Todos os estados seguintes são influenciados pela interação dos estados do poço com os estados do ponto, representado como poço na aproximação unidimensional, e como ponto, propriamente dito, na aproximação bidimensional com simetria axial. O valor da terceira linha da Tabela 5.14, que corresponde ao valores de energia do primeiro estado no poço, reflete essa

diferença na interação dos autoestados no valor de energia encontrado pelas duas aproximações, neste caso, maior para a aproximação unidimensional. Esses valores estão em análise na Universidade Federal do Rio de Janeiro.

Neste caso, a malha, mostrada na Figura 5.27 possui 32.910 elementos 2D com simetria axial de primeira ordem. O tempo de execução deste caso foi de aproximadamente 54 minutos.

5.2.3 Poços Quânticos Acoplados

O programa de cálculo autoconsistente foi utilizado em um estudo qualitativo do efeito do acoplamento de poços quânticos. Neste estudo, poços de 70 Å foram acoplados a um poço central de 220 Å separados por barreiras de 130 Å. A dopagem é uniforme em todos os poços e barreiras com densidade de 10^{16} cm^{-3} . As barreiras das extremidades são dopadas na vizinhança do poço. A largura da região dopada nessas barreiras é de 65 Å. Os poços são de GaAs e as barreiras de $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$. As Figuras 5.29-5.31 mostram os resultados obtidos para sistemas de, respectivamente, dois, quatro e seis poços quânticos acoplados a um poço quântico central. Nessas figuras é possível visualizar os dois primeiros autoestados de cada sistema, perfil inicial e final da energia potencial da banda de condução e a Energia de Fermi. Nota-se que ao aumentar a quantidade de poços acoplados, há um aumento nas energias potenciais da banda de condução devido ao aumento da quantidade de elétrons oriundos da dopagem. Consequentemente, a energia dos estados confinados tendem também a aumentar. É interessante notar também o segundo estado confinado dos sistemas. Enquanto nos sistemas com dois e quatro poços acoplados o segundo estado confinado corresponde ao segundo estado do poço central, no caso do sistema com seis poços acoplados o segundo estado do sistema corresponde ao primeiro estado do poço da extremidade esquerda.

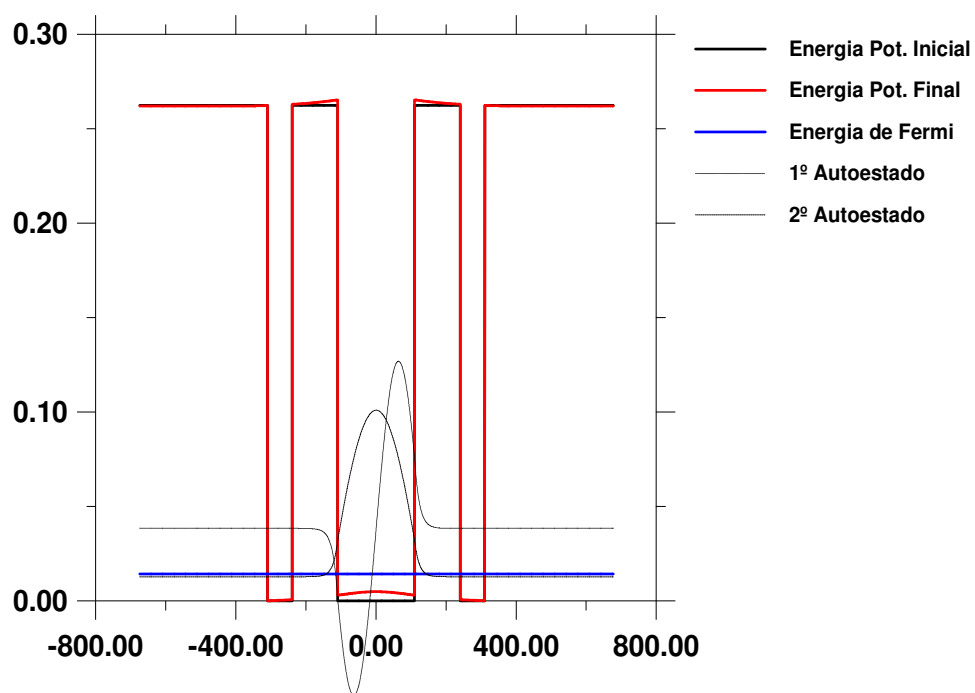


Figura 5.29 – Sistema de dois poços acoplados a um poço central.

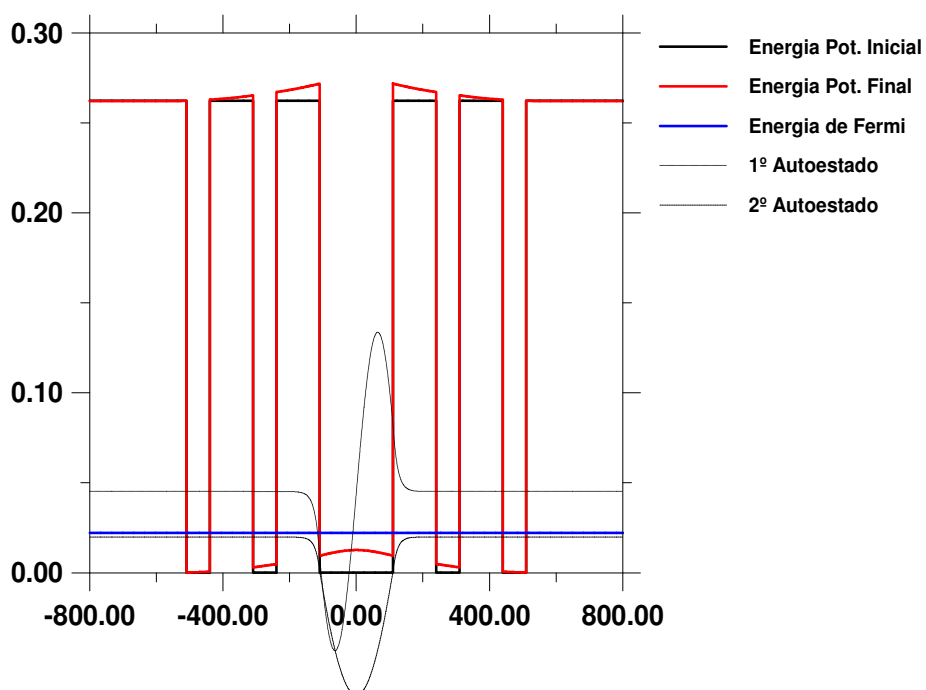


Figura 5.30 – Sistema de quatro poços acoplados a um poço central.

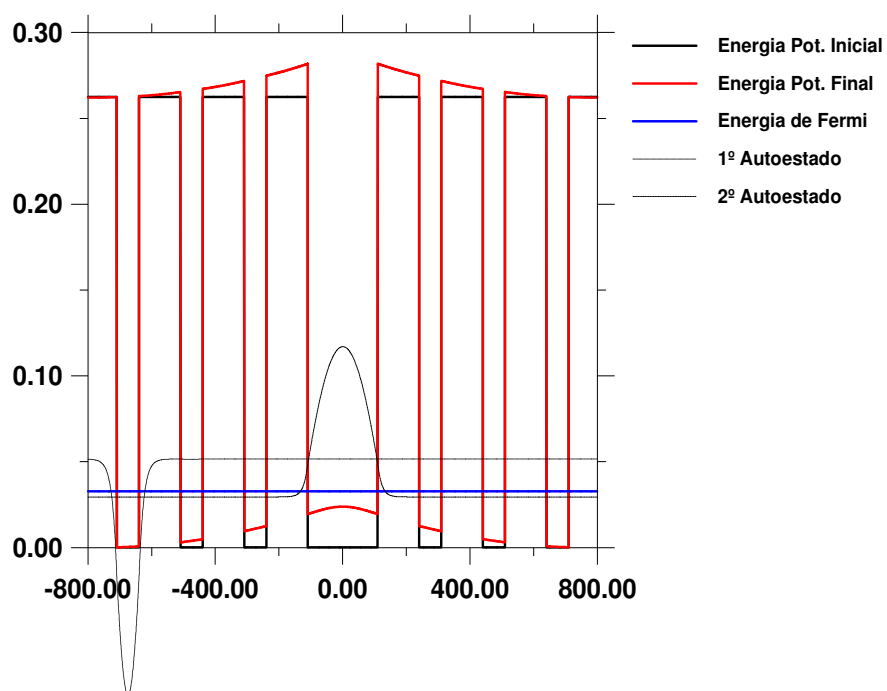


Figura 5.31 – Sistema de seis poços acoplados a um poço central.

Neste caso, foram montadas malhas com elementos finitos 1D de primeira ordem com uma densidade de 3 elementos por Å. O tempo médio de execução é de aproximadamente 100,5 minutos.

6 CONCLUSÕES, CONTRIBUIÇÕES E TRABALHOS FUTUROS

Este trabalho apresentou uma metodologia computacional para o projeto e análise de nanoestruturas semicondutoras baseados em poços, fios e pontos quânticos, aplicados a fotodetetores de infravermelho. Utiliza-se o modelo k.P com aproximação de massa efetiva, cuja resolução foi implementada pelo Métodos dos Elementos Finitos.

Os programas implementados calculam os autoestados do elétron, confinados na banda de condução dessas heteroestruturas, além das forças de oscilador, que fornece uma medida da probabilidade de transição do elétron entre os estados confinados.

Os parâmetros que caracterizam as heteroestruturas, a massa efetiva e a energia potencial em função da posição (material), podem ser definidos explicitamente pelo usuário ou, no caso de materiais semicondutores da família III-V, calculados seguindo um procedimento publicado em (VURGAFTMAN et al., 2001).

Para o estudo de poços quânticos foi criada uma interface gráfica para o usuário chamada QWS, que já está sendo utilizado por pesquisadores do Instituto de Estudos Avançados (IEAv), Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) e Universidade Estadual de Londrina (UEL). Foi implementado também, no caso dos poços quânticos, um módulo para o cálculo autoconsistente do perfil de energia da banda de condução e seus autoestados confinados.

Embora o programa de cálculo autoconsistente apresente concordância com artigos da literatura, ele não reproduziu os valores de um artigo de 2005, que também realiza o cálculo autoconsistente com região de depleção variável. Será necessário um estudo mais detalhado para compreender as causas dessa discordância.

O presente trabalho buscou contribuir para o projeto e análise de nanoestruturas para fotodetectores de infravermelho, complementando a capacitação já existente para a sua fabricação e caracterização. Embora a motivação para a realização deste trabalho tenha sido o esforço nacional para o desenvolvimento de sensores fotodetectores de infravermelho, a metodologia desenvolvida pode ser usada para modelar nanoestruturas semicondutoras baseados em poços, fios e pontos quânticos de outros dispositivos, tais como, por exemplo, lasers e transístores HEM. Isso se deve ao fato de que todos os cálculos associados destes dispositivos nanoestruturados necessitam das funções de onda e energia, calculados pelos programas implementados neste trabalho

Os resultados dos programas para o cálculo de autoestados em poços, fios e pontos quânticos foram apresentados em três congressos internacionais: (Tanaka; et al., 2007a), (Tanaka; et al., 2007b) e (Tanaka; et al., 2007c), e os resultados do cálculo autoconsistente das energias e da região de depleção em poços quânticos foi apresentando em um congresso internacional (Tanaka; et al., 2008).

Como trabalhos futuros prevê-se incluir o tratamento de dopantes tipo *p* (aceitadores de elétrons) no cálculo autoconsistente; incorporar à interface gráfica do usuário do QWS mecanismos para a entrada de dados de regiões dopadas e visualização dos resultados desse cálculo que inclui, além dos autoestados, a região de depleção e a densidade de cargas em cada ponto da estrutura; incluir o tratamento de campo elétrico externo; implementar cálculos associados, tais como susceptibilidade óptica e corrente de escuro; integrar, com uma interface gráfica de fácil utilização do ponto de vista dos usuários, os programas desenvolvidos para estudo e análise de poços, fios e pontos quânticos.

De fato, estas melhorias estão previstas entre as atividades associadas a um projeto de pesquisa aprovado recentemente pela FAPESP (processo

2007/08580-5) voltado para a otimização de nanoestruturas baseadas em poços quânticos, o qual é consequência direta dos bons resultados obtidos durante a execução deste trabalho. Esse projeto utilizará, como máquina de cálculo, as metodologias aqui desenvolvidas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABE, N. M.; PASSARO, A.; FRANCO, M. A. R.; SIRCILLI, F.; SERRÃO, V. A.; ODAN, D. H.; SANTOS, F. J. R. Um sistema de software para análise de dispositivos e componentes de óptica integrada, fibras ópticas e microondas. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ELETROMAGNETISMO (CBMag), 5, 2002, Gramado, Brasil., Brasil. **Anais...**, Gramado: [s.n.], 2002. CD-ROM.

ABE, N. M.; SHIYOU, Y.; PASSARO, A.; MACHADO, J. M. Computer simulation of corona electrode devices by the finite element method. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON ELECTROHYDRODYNAMICS (ISEHD), 2006, Buenos Aires, Argentina. **Proceedings...**, Buenos Aires: [s.n.], 2006, p. 103-106.

ALFEROV, Z. I. The history and future of semiconductor heterostructures **American Institute of Physics**, v. 32, p. 01-14, 1998.

ALTARELLI, M.; EKENBERG, U. Calculations of hole subbands in semiconductor quantum wells and superlattices. **Physical Review B**, v. 32, p. 5138–5143, 1985.

AMO, A.; BALLARINI, D.; SANVITTO, D.; KOZHEMYAKINA, E.; VIÑA, L.; LEMAÎTRE, A.; BAJONI, D.; BLOCH, J. Optically induced ultrafast quenching of the semiconductor quantum well luminescence. **Applied Physics Letters**, v. 92, p. 61912, 2008.

ANDREANI, L. C.; PASQUARELLO, A.; BASSANI, F. Hole subbands in strained GaAs–Ga_(1-x)Al_xAs quantum wells: exact solution of the effective-mass equation. **Physical Review B**, v. 36, p. 5887–5894, 1987.

ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid state physics**. Local: Saunders College Publishing, Philadelphia, 1976, 826 p. ISBN 0030839939.

BLAKEMORE, J. S. **Solid state physics**, 2. ed. Cambridge University Press, 1985.

BALDERESCHI, A.; LIPARI, N. O. Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors. **Physical Review B**, v. 8, p. 2697–2709, 1973.

BASTARD, G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation. **Physical Review B**, v. 24, p. 5693–5697, 1981.

BASTARD, G. **Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures**. New York: EDP Sciences, 1992, 366 p. ISBN 2868830927

PUBLICAÇÕES TÉCNICO-CIENTÍFICAS EDITADAS PELO INPE

Teses e Dissertações (TDI)

Teses e Dissertações apresentadas nos Cursos de Pós-Graduação do INPE.

Manuais Técnicos (MAN)

São publicações de caráter técnico que incluem normas, procedimentos, instruções e orientações.

Notas Técnico-Científicas (NTC)

Incluem resultados preliminares de pesquisa, descrição de equipamentos, descrição e ou documentação de programa de computador, descrição de sistemas e experimentos, apresentação de testes, dados, atlas, e documentação de projetos de engenharia.

Relatórios de Pesquisa (RPQ)

Reportam resultados ou progressos de pesquisas tanto de natureza técnica quanto científica, cujo nível seja compatível com o de uma publicação em periódico nacional ou internacional.

Propostas e Relatórios de Projetos (PRP)

São propostas de projetos técnico-científicos e relatórios de acompanhamento de projetos, atividades e convênios.

Publicações Didáticas (PUD)

Incluem apostilas, notas de aula e manuais didáticos.

Publicações Seriadas

São os seriados técnico-científicos: boletins, periódicos, anuários e anais de eventos (simpósios e congressos). Constan destas publicações o Internacional Standard Serial Number (ISSN), que é um código único e definitivo para identificação de títulos de seriados.

Programas de Computador (PDC)

São a seqüência de instruções ou códigos, expressos em uma linguagem de programação compilada ou interpretada, a ser executada por um computador para alcançar um determinado objetivo. São aceitos tanto programas fonte quanto executáveis.

Pré-publicações (PRE)

Todos os artigos publicados em periódicos, anais e como capítulos de livros.

BAUER, G. E. W.; ANDO, T. Electronic structure of free carriers in quantum wells calculated by density-functional theory. **Physical Review B**, v. 34, p. 1300–1303, 1986.

BONNEFOI, A. R.; CHOW, D. H.; MCGILL, T. C. Inverted base-collector tunnel transistors. **Applied Physics Letters**, v. 47, p. 888–890, 1985.

BOSCHETTI, C.; BANDEIRA, I. N.; CLOSS, H.; UETA, A. Y.; RAPPL, P. H. O.; MOTISUKE, P.; ABRAMOF, E. Molecular beam epitaxial growth of PbTe and PbSnTe on Si(1 0 0) substrates for heterojunction infrared detectors. **Infrared Physics & Technology**, v. 42, p. 91–99, 2001.

BROUNKOV, P. N.; BENYATTOU T.; GUILLOT G. Simulation of the capacitance–voltage characteristics of a single-quantum-well structure based on the self-consistent solution of the Schrödinger and Poisson equations. **Journal of Applied Physics**, v. 80, p. 864–871, 1996.

BURT, M. G. Fundamentals of envelope function theory for electronic states and photonic modes in nanostructures. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 11, p. 53–83, 1999.

CAETANO, R. A. **Propriedades ópticas de caixas quânticas semicondutoras**. 2003, 109 f. Trabalho de Dissertação de Mestrado. Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin, Campinas, Brasil, 2003.

CALIFANO, M.; HARRISON, P. Presentation and experimental validation of a single-band, constant-potential model for self-assembled InAs/GaAs quantum dots. **Physical Review B**, v. 61, p. 10959, 2000.

CHANG, L. L.; PLOOG, K. **Molecular beam epitaxy and heterostructures**. 1. Norwell: Kluwer Academic Publishers, 1984. 728 p. ISBN 9024731186.

CHITTA, V.; DESRAT, W.; MAUDE, D.; PIOT, B.; OLIVEIRA JR., N.; RAPPL, P.; UETA, A.; ABRAMOF, E. Integer quantum Hall effect in a PbTe quantum well. **Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures**, v. 34, p. 124–127, 2006.

CHOI, K. K. **The physics of quantum well infrared photodetectors**: series in modern condensed matter physics, volume 7. 1. New Jersey: World Scientific Publishing Company, 1997. 420 p. ISBN 9810228724.

DACAL, L. C. O.; DAMIÃO, Á. J.; DE ANDRADA E SILVA, E. A. Quantum ballistic conductance of quasi-two-dimensional and three-dimensional semiconductor nanowires. **Physical Review B**, v. 71, p. 155330, 2005.

DARGAM, T. G.; CAPAZ, R. B.; KOILLER, B. Disorder and size effects in the envelope-function approximation. **Physical Review B**, v. 56, p. 9625–9629, 1997.

DAVID, A.; GRUNDMANN, M. J.; KAEDING, J. F.; GARDNER, N. F.; MIHOPOULOS, T. G.; KRAMES, M. R. Carrier distribution in (0001)InGa_N/Ga_N multiple quantum well light-emitting diodes. **Applied Physics Letters**, v. 92, p. 53502, 2008.

DUPUIS, R. D.; DAPKUS, P. D.; HOLONYAK JR., N.; REZEK, E. A.; CHIN, R. Room-temperature laser operation of quantum-well GaAlAs–GaAs laser diodes grown by metalorganic chemical vapor deposition. **Applied Physics Letters**, v. 32, p. 295, 1978.

HARRISON, P.; **Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics**. 1. San Francisco: John Wiley and Sons, 2005. 480 p. ISBN 0471984957.

HAUG, H.; KOCH, S. W. **Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors**. 4. Singapore: World Scientific Publishing, 2004. 465 p. ISBN 9812387560.

Huang, Y.; Wang, C.; Lien, C. Electric-field enhancement and extinguishment of optical second-harmonic generation in asymmetric coupled quantum wells. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 31, p. 1717–1725, 1995.

JONSSON, B.; ENG, S. Solving the Schrödinger equation in arbitrary quantum-well potential profiles using the transfer matrix method. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, v. 26, p. 2025–2035, 1990.

KADUKI, K. A.; BATTY, W. Envelope function approximation (EFA) bandstructure calculations for III-V non-square stepped alloy quantum wells incorporating ultra-narrow (~5Å) epitaxial layers. **Physica Scripta**, v. 61, p. 213–221, 2000.

LEE, J.; CHOU, W. C.; YANG, C. S.; JAN, G. J. Eigen-energies and eigen-functions of symmetroidal quantum dots. **Chinese Journal of Physics**, v. 42, p. 102, 2004.

LEVINE, B. F. Quantum-well infrared photodetectors. **Journal of Applied Physics**, v. 74, p. R1-R81, 1993.

LIM, H.; ZHANG, W.; TSAO, S.; SILLS, T.; SZAFRANIEC, J.; MI, K.; MOVAGHAR, B.; RAZEGHI, M. Quantum dot infrared photodetectors: Comparison of experiment and theory. **Physical Review B**, v. 72, p. 85332, 2005.

LONG, F.; HAGSTON, W. E. Breakdown of the envelope function/effective mass approximation in narrow quantum wells. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE PHYSICS OF SEMICONDUCTORS, 23, 1996, Singapore. **Proceedings...** Singapore: [s.n.], 1996, p. 1819-1822.

LUSCOMBE, J. H.; BOUCHARD, A. M. Electron confinement in quantum nanostructures: Self-consistent Poisson-Schrödinger theory. **Physical Review B**, v. 46, p. 10262, 1992.

LYO, S.K.; SIMMONS, J. A.; HUANG, D.; HARFF, N.E. Magnetic modulations of optical and transport properties of n-doped coupled double quantum wells. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE PHYSICS OF SEMICONDUCTORS, 24, 1998, Jerusalem, Israel. **Proceedings...** Jerusalem : [s.n.], 1998. CD-ROM.

MACHADO, J. M.; SHIYOU, Y.; PASSARO, A.; ABE, N. M. An application of the element free galerkin method to the analysis of quantum well structures. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON ELECTROMAGNETIC FIELD PROBLEMS & APPLICATIONS (ICEF'2000), 4, 2000, Tianjin, China. **Proceedings...** Tianjin: [s.n.], 2000. CD-ROM.

MATSUBARA, H.; YOSHIMOTO, S.; SAITO, H.; JIANGLIN, Y.; TANAKA, Y.; NODA, S. GaN photonic-crystal surface-emitting laser at blue-violet wavelengths. **Science**, v. 319, n. 5862, p. 445–447, 2008.

MILLER, D. A. B.; CHEMLA, D. S.; DAMEN, T. C.; GOSSARD, A. C.; WIEGMANN, W.; WOOD, T. H.; BURRUS, C. A. Electric field dependence of optical absorption near the band gap of quantum-well structures. **Physical Review B**, v. 32, p. 1043–1060, 1985.

MILLER, J. L. **Principles of infrared technology**: a practical guide to the state of the art. 1. Norwell: Chapman and Hall, 1994. 578 p. ISBN 0442012101.

NUMAI, T. **Fundamentals of semiconductor lasers**. 1. New York: Springer-Verlag, 2004. 259 p. ISBN 0387408363.

PAES, A. C. J.; ABE, N. M.; SERRÃO, V. A.; PASSARO, A. Simulations of plasmas with electrostatic PIC models using the finite element method. **Brazilian Journal of Physics**, v. 33, p. 411, 2003.

PASSARO, A.; TANAKA, R. Y.; MURARO JR, A.; LIMA NETO, O. F. D.; ABE, N. M.; STEPHANY, S.; PRETO, A. J. Performance evaluation of different communication schemes on a parallel implementation of the conjugate gradient method. In: IBERIAN LATIN AMERICAN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING (CILAMCE), 27, 2006, Belém, Brazil. **Proceedings...** Belém, [s.n.], 2006. CD-ROM.

PIERSON, H. O. **Handbook of chemical vapor deposition**: Principles, Technology and Applications. Berkshire: Noyes Publications, 1999. 436 p. ISBN 0815513003.

RAM-MOHAN, L. R.; YOO, K. H.; AGGARWAL, R. L. Transfer-matrix algorithm for the calculation of the band structure of semiconductor superlattices. **Physical Review B**, v. 38, p. 6151–6159, 1988.

RAM-MOHAN, L. R. **Finite element and boundary element applications in quantum mechanics**. Oxford: Oxford University Press, 2002, 624 p., ISBN 0198525222.

RAM-MOHAN, L. R.; YOO, K. H. & MOUSSA, J. The Schrödinger-Poisson Selfconsistency in Layered Quantum Semiconductor Structures. **Journal of Applied Physics**, v. 95, p. 3081-3092, 2004.

ROLIM, T. C. **Quantum systems on nanotubes**. 2005, 61 f. Trabalho de Graduação. Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, Brasil, 2005.

ROSENBERG, J.; BENLAMRI, M.; KIRCHNER, P.; WOODALL, J.; PETTIT, G. An $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{GaAs}$ pseudomorphic single quantum well HEMT. **IEEE Electron Device Letters**, v. 6, p. 491–493, 1985.

SAFONOVA, I.; SHULIKAA, A.; SUKHOIVANOVA, I.; LYSAKA, V. Model for self-consistent analysis of arbitrary MQW structures. In: OPTICS EAST SYMPOSIUM, CONFERENCE ON PHYSICS AND APPLICATIONS OF OPTOELECTRONIC DEVICES, 2004, Philadelphia, Pennsylvania, USA. **Proceedings...** Pennsylvania, [s.n.], v. 18, p. 33-44, 2004.

SAHU, T.; PATNAIK, J. Electron transport mobility in a δ -doped double quantum well structure. **Journal of Applied Physics**, v. 88, p. 2658-2664, 2000.

SANTOS, J. C.; SILVA, L. P. C.; ALMEIDA, J. C. J.; RUBINI, J.; ABE, N. M.; PASSARO, A. FEM simulation method as a designing tool for eletrooptical sensors development. **WSEAS Transactions on Power Systems**, v. 1, p. 1754-1761, 2006.

SCHNEIDER, H.; LIU, H. C. **Quantum well infrared photodetectors: physics and applications**. Berlin: Springer-Verlag, 2007, 256 p. ISBN 3540363238.

SCHULMAN, J. N.; CHANG, Y. HgTe-CdTe superlattice subband dispersion **Physical Review B**, 1986, 33, 2594-2601

SEHRA, A. S. **Finite element analysis of the Schrödinger equation**. 2006. 112 p. Dissertação de Mestrado – University of Wales and Swansea, Wales, Inglaterra, 2006.

SELIUTA, D.; KAVALIAUSKAS, J.; CECHAVICIUS, B.; BALAKAUSKAS, S.; VALUSIS, G.; SHERLIKER, B.; HALSALL, M. P.; HARRISON, P.; LACHAB, M.; KHANNA, S. P.; LINFIELD, E. H. Impurity bound-to-unbound terahertz sensors based on beryllium and silicon δ -doped GaAs/AlAs multiple quantum wells.

Applied Physics Letters, v. 92, p. 53503, 2008.

SINGH, J. A new method for solving the ground-state problem in arbitrary quantum wells: application to electron-hole quasi-bound levels in quantum wells under high electric field. **Applied Physics Letters**, v. 48, p. 434–436, 1986.

SINGH, J. **Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures**. Cambridge: Cambridge University Press, 2003, 532 p. ISBN 052182379X.

SOLLNER, T. C. L. G.; GOODHUE, W. D.; TANNENWALD, P. E.; PARKER, C. D.; PECK, D. D. Resonant tunneling through quantum wells at frequencies up to 2.5 THz. **Applied Physics Letters**, v. 43, p. 588–590, 1983.

SOUZA, P. L.; LOPES, A. J.; GEBHARD, T.; UNTERRAINER, K.; PIRES, M. P.; GUIMARÃES, P. S. S.; VIEIRA, G. S.; VILLAS-BOAS, J. M.; STUDART, N. Quantum dot structures grown on Al containing quaternary material for infrared photodetection beyond 10 μm . **Applied Physics Letters**, v. 90, p. 173510, 2007.

TAN, I.; SNIDER, G. L.; CHANG, L. D.; HU, E. L. A self-consistent solution of Schrödinger-Poisson equations using a nonuniform mesh. **Journal of Applied Physics**, v. 68, p. 4071-4076, 1990.

TANAKA, R. Y.; PASSARO, A.; ABE, N. M.; VILLAS-BÔAS, J. M.; VIEIRA, G. S.; STEPHANY, S. Development of finite element software tools for QWIP and QDIP design. In: BRAZILIAN WORKSHOP ON SEMICONDUCTOR PHYSICS (BWSP), 13, 2007, São Paulo, Brazil. **Proceedings...** São Paulo, [s.n.], 2007a, p.62-63.

TANAKA, R. Y.; PASSARO, A.; ABE, N. M.; VILLAS-BÔAS, J. M.; VIEIRA, G. S.; STEPHANY, S. Development of finite element software tools for QWIP and QDIP design. In: WORKSHOP ON SEMICONDUCTORS AND MICRO & NANO TECHNOLOGY (SEMINATEC), 2007, Campinas, Brazil. **Proceedings...** Campinas, [s.n.], 2007b, p. 65

TANAKA, R. Y.; PASSARO, A.; ABE, N. M.; VILLAS-BÔAS, J. M.; VIEIRA, G. S.; STEPHANY, S. Software tools for the design and analysis of quantum well, quantum wire and quantum dot devices. In: IEEE MICROWAVE AND OPTOELECTRONICS CONFERENCE (IMOC), 2007, Salvador, Brazil. **Proceedings...** Salvador: SBMO/IEEE MTT-S International, 2007c, p. 914-918.

TANAKA, R. Y.; PASSARO, A.; ABE, N. M.; VIEIRA, G. S.; STEPHANY, S. Self-consistent analysis of quantum well based structures. In: BIENNIAL IEEE CONFERENCE ON ELECTROMAGNETIC FIELD COMPUTATION (CEFC), 13, 2008, Athens, Greece. **Proceedings...** Athens: IEEE, 2008. p. 550.

TRELLAKIS, A.; GALICK, A. T.; PACELLI, A.; RAVAIOLI, U. Iteration scheme for the solution of the two-dimensional Schrödinger-Poisson equations in quantum structures. **Journal of Applied Physics**, v. 81, p. 7880, 1997.

UNGAN, F.; OZTURK, E.; ERGUN, Y.; SOKMEN, I. Subband structure and band bending in symmetric modulation-doped double quantum wells **The European Physical Journal Applied Physics**, v. 29, p. 27-31, 2005.

UNGAN, F.; OZTURK, E.; ERGUN, Y.; SOKMEN, I. The variation of electronic properties with the doping concentration of modulation-doped $\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$ -GaAs double quantum wells. **Superlattices and Microstructures**, v. 41, p. 22–28, 2007.

VURGAFTMAN, I.; MEYER, J. R.; RAM-MOHAN, L. R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. **Journal of Applied Physics**, v. 89, p. 5815, 2001.

WHITE, S. R.; SHAM, L. J. Electronic properties of flat-band semiconductor heterostructures. **Physical Review Letters**, v. 47, p. 879–882, 1981.

PUBLICAÇÕES TÉCNICO-CIENTÍFICAS EDITADAS PELO INPE

Teses e Dissertações (TDI)

Teses e Dissertações apresentadas nos Cursos de Pós-Graduação do INPE.

Manuais Técnicos (MAN)

São publicações de caráter técnico que incluem normas, procedimentos, instruções e orientações.

Notas Técnico-Científicas (NTC)

Incluem resultados preliminares de pesquisa, descrição de equipamentos, descrição e ou documentação de programa de computador, descrição de sistemas e experimentos, apresentação de testes, dados, atlas, e documentação de projetos de engenharia.

Relatórios de Pesquisa (RPQ)

Reportam resultados ou progressos de pesquisas tanto de natureza técnica quanto científica, cujo nível seja compatível com o de uma publicação em periódico nacional ou internacional.

Propostas e Relatórios de Projetos (PRP)

São propostas de projetos técnico-científicos e relatórios de acompanhamento de projetos, atividades e convênios.

Publicações Didáticas (PUD)

Incluem apostilas, notas de aula e manuais didáticos.

Publicações Seriadas

São os seriados técnico-científicos: boletins, periódicos, anuários e anais de eventos (simpósios e congressos). Constan destas publicações o Internacional Standard Serial Number (ISSN), que é um código único e definitivo para identificação de títulos de seriados.

Programas de Computador (PDC)

São a seqüência de instruções ou códigos, expressos em uma linguagem de programação compilada ou interpretada, a ser executada por um computador para alcançar um determinado objetivo. São aceitos tanto programas fonte quanto executáveis.

Pré-publicações (PRE)

Todos os artigos publicados em periódicos, anais e como capítulos de livros.