Tese apresentada à Pró-Reitoria de Pós-Graduação do Instituto Tecnológico de Aeronáutica, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências no Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Física Atômica e Molecular.

Tiago Gonçalves Santos

## MELHORIAS EM MODELOS DE TRANSPORTE ELETRÔNICO DE QWIPS

Tese aprovada em sua versão final pelos abaixo assinados:

Prof. Dr. Charavo Soares Vieira Orientador

Prof. Dr. Pedro Teixeira Lacava Pró-Reitor de Pós-Graduação

Campo Montenegro São José dos Campos, SP - Brasil 2019 Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP) Divisão de Informação e Documentação

Goncalves Santos, Tiago

MELHORIAS EM MODELOS DE TRANSPORTE ELETRÔNICO DE QWIPS / Tiago Goncalves Santos. São José dos Campos, 2019.

92f.

Tese de Doutorado - Curso de Física. Área de Física Atômica e Molecular - Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2019. Orientador: Prof. Dr. Gustavo Soares Vieira.

1. Fotodetector. 2. Radiação infravermelha. 3. QWIP. I. Instituto Tecnológico de Aeronáutica. II. Título.

#### REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

GONÇALVES SANTOS, Tiago. MELHORIAS EM MODELOS DE TRANSPORTE ELETRÔNICO DE QWIPS. 2019. 92f. Tese de Doutorado -Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos.

#### **CESSÃO DE DIREITOS**

NOME DO AUTOR: Tiago Gonçalves Santos TITULO DO TRABALHO: MELHORIAS EM MODELOS DE TRANSPORTE ELETRÔNICO DE QWIPS. TIPO DO TRABALHO/ANO: Tese / 2019

É concedida ao Instituto Tecnológico de Aeronáutica permissão para reproduzir cópias desta tese e para emprestar ou vender cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta tese pode ser reproduzida sem a autorização do autor.

Singe Concalus Santos

Tiago Gonçalves Santos Av. Eng. Francisco José Longo, 622 12.245-907 - São José dos Campos-SP

## MELHORIAS EM MODELOS DE TRANSPORTE ELETRÔNICO DE QWIPS

**Tiago Gonçalves Santos** 

Composição da Banca Examinadora:

Prof. Dr.Gustavo Soares VieiraOrientador-IEAProf. Dr.Ivan Guilhon Mitoso RochaMem. Interno-ITAProf. <sup>a</sup> Dra.Marta Silva dos Santos GusmãoMem. Externo-UFAProf. Dr.Erasmo A. de Andrada e SilvaMem. Externo-INP	Prof. Dr.	Manuel Máximo B. M. de Oliveira	Presidente	-	ITA
Prof. Dr.Ivan Guilhon Mitoso RochaMem. InternoITAProf.ª Dra.Marta Silva dos Santos GusmãoMem. Externo-UFAProf. Dr.Erasmo A. de Andrada e SilvaMem. Externo-INP	Prof. Dr.	Gustavo Soares Vieira	Orientador	-	IEAv
Prof. <sup>a</sup> Dra.Marta Silva dos Santos GusmãoMem. Externo-UFAProf. Dr.Erasmo A. de Andrada e SilvaMem. Externo-INP	Prof. Dr.	Ivan Guilhon Mitoso Rocha	Mem. Interno	-	ITA
Prof. Dr. Erasmo A. de Andrada e Silva Mem. Externo - INP	Prof. <sup>a</sup> Dra.	Marta Silva dos Santos Gusmão	Mem. Externo	-	UFAM
	Prof. Dr.	Erasmo A. de Andrada e Silva	Mem. Externo	-	INPE

A Cassiano Roque, irmão querido (in memoriam).

## Agradecimentos

A minha família, alicerce em todos os momentos de minha vida, muito obrigado.

Ao meu orientador Gustavo Soares Vieira, por todo incentivo, pela grande paciência que teve comigo em todos os momentos, pelos seus ensinamentos, sem os quais a realização desse trabalho não seria possível, e pela sua admirável dedicação a Física, muito obrigado.

Ao corpo técnico, docentes e alunos dos laboratórios LCDS, LEV e LaRaC que tive a oportunidade de conhecer e que durante esta trajetória no IEAv, me ajudaram de forma direta ou indireta, Reviane Lopes, Marcela Freitas, Rafael Galhardo, Evaldo Júnior, Giordano Bruno, Rosana Balena, Roberto Tanaka, Onofre Felix, Dárley Domingos, André Flederico, Liangrid Lutiani, Carlos Alberto, Ademar Muraro, Osvaldo Braga, Profa. Nancy Mieko, Prof. Ângelo Pássaro e Ruy Medeiros, muito obrigado por todo auxílio, companheirismo e pelos diversos exemplos de dedicação no trabalho, em especial ao Diogo Pedroso pela colaboração direta no capítulo 5 desta tese, e ao Cristian Delfino por toda ajuda com a parte experimental.

Aos amigos de ITA e IEAv, em especial, aos amigos de futsal pelos momentos de distração. Ao amigo Thiago Maciel por sempre me mostrar que vale a pena ajudar o próximo. À Ivy amiga fiel e companheira de conversas. E aos meus amigos de república pelo convívio.

A Mônica Amorim, por quem tenho imensa gratidão, muito obrigado.

Aos professores Tobias Frederico, Brett Carlson, Manuel Malheiro, Alvaro Damião e Marcelo Marques pelos conhecimentos transmitidos nas disciplinas ministradas.

Ao Professor Alain Quivy e demais membros do Laboratório de Novos Materiais Semicondutores do IFUSP, pela produção da amostra utilizada neste trabalho.

A todos os técnicos e pessoal de apoio do Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA, e do Instituto de Estudos Avançados - IEAv, por todas as importantes contribuições.

A Universidade Federal do Amazonas, por permitir que eu me afastasse de minhas atividades docentes para me dedicar a esta pesquisa de doutorado. E aos amigos do Colegiado de Licenciatura em Ciências: Matemática e Física/ISB, Eduardo, Fábio, Vanuza, Deniz, Adriano e William, e aos demais membros do ISB/UFAM pelo convívio agradável. A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes) e ao INCT/DISSE pelo apoio financeiro durante parte do doutorado.

"Non si può insegnare niente ad un uomo, si può solo aiutarlo a trovare la risposta dentro di sé."

— Galileo Galilei

"One shouldn't work on semiconductors, that is a filthy mess; who knows if they really exist?" —Wolfgang Pauli, 1931

## Resumo

Neste trabalho, modelos tradicionais de transporte eletrônico em sensores de infravermelho a poços quânticos, QWIPs, são reavaliados à luz de dados experimentais obtidos de um QWIP de GaAs/AlGaAs, com poços dopados tipo n, projetado para ter pico de resposta em 9,3  $\mu m$ . É conhecido que esses fotodetectores apresentam transporte eletrônico em regimes diferentes, a depender da faixa de temperatura. Sendo assim, foram realizadas análises para baixas temperaturas, e a temperaturas mais elevadas. Para medições a baixas temperaturas, as análises das curvas de capacitância versus tensão, C-V, foram utilizadas para identificar a origem da diferença entre as medidas de corrente de escuro, I-Vs, dos dispositivos QWIPs fabricados simultaneamente no mesmo substrato, isto é, possuindo as mesmas camadas epitaxiais e mesmas condições de processamento. Os dispositivos têm curvas I-V semelhantes para tensões baixas, mas diferem significativamente para as tensões mais altas. É mostrado que o acúmulo de carga dentro da estrutura de poços quânticos é responsável por alterar o mecanismo de condução a tensões mais baixas do que seria esperado se o campo elétrico fosse uniforme sobre a estrutura. Esse acúmulo de carga varia de dispositivo para dispositivo, indicando uma influência das características locais das camadas. Apesar dos resultados apontarem para um campo elétrico não uniforme, como é identificado pelas medidas C-Vs, nenhum indicativo relacionado à formação e expansão de domínios de campo elétrico está presente nas curvas I-V, ou seja, não foi observado nenhum patamar de corrente de escuro, nem séries de picos de condutividade diferencial negativa. Medidas de I-Vs a temperaturas entre 60 a 120 K foram usadas para determinação das energias de ativação da corrente termicamente induzida nos dispositivos e sua dependência com a tensão aplicada. As energias de ativação são calculadas pressupondo que o mecanismo de emissão termiônica seja dominante, o que, a princípio, levaria à uma dependência linear da energia de ativação com a tensão aplicada. no entanto, observou-se um comportamento bastante distinto do esperado. Uma parceria com outro aluno de doutorado, Diogo de Moura Pedroso, levou a um modelo capaz de reproduzir o comportamento observado da energia de ativação, incluindo as assimetrias, mantendo a mesma mobilidade dos elétrons para ambas as polaridades.

## Abstract

In this study, traditional electronic transport models in quantum infrared photodetectors, QWIPs, are reevaluated in the light of experimental data obtained from a GaAs/AlGaAs QWIP, with n doped wells, designed to have a peak responsivity at 9.3  $\mu m$ . It is known that these photodetectors present different regimes of electronic transport, depending on the operating temperature, thus, analysis were carried out at, both, low and higher temperatures. For low temperature measurements, the analysis of capacitance versus voltage curves, C-V, were used to identify the origin of the difference between the dark current measurements, I-Vs, of QWIP devices manufactured simultaneously on the same substrate, i.e., on the same epitaxial layers and with the same processing conditions. The devices have similar I-V curves at low bias, but differ significantly at higher voltages. It is shown that the accumulation of charge within the quantum well structure is responsible for altering the conduction mechanism at lower voltages then would be expected if the electric field was uniform over the entire structure. This accumulated charge varies from device to device, indicating an influence of local layer characteristics. Although the results point to a non-uniform electric field, as identified by the C-V measurements, no feature related to the formation and expansion of electric field domains is present in the I-V curves, that is, no current plateau nor series of negative differential conductivity peaks were observed in the I-Vs. Measurements at temperatures between 60 and 120 K were used to determine the activation energy of the thermally induced current in the devices and their dependence on the applied voltage. The activation energy is calculated assuming that the thermionic emission is the dominant mechanism, what, in principle, should lead to a linear dependence of the activation energy on the applied voltage. However, a behavior much different from expected was observed. A partnership with another doctorate student, Diogo de Moura Pedroso, led to a model capable of reproducing the observed behavior of the activation energy, including the asymmetries, while maintaining the same electron mobility for both polarities.

# Lista de Figuras

FIGURA 2.1 –	Curvas de radiância espectral emitida por um corpo negro a diferen- tes temperaturas, a linha tracejada indica o comportamento do pico de máximo com a variação da temperatura	26
FIGURA 2.2 –	Espectro de transmissão atmosférica em função do comprimento de onda, com a indicação das moléculas que tem maior absorção at- mosférica por faixa de comprimento de onda	26
FIGURA 2.3 –	Resposta espectral de vários fotodetectores de IR. A curva em ver- melho indica a resposta espectral de um QWIP de GaAs a 77 K	29
FIGURA 2.4 –	Célula unitária convencional da estrutura de <i>zincblende</i> , átomos de As e Ga são representados por bolas rosas e verdes respectivamente.	30
FIGURA 2.5 –	Bandgaps e parâmetros de rede para semicondutores típicos e suas ligas. Círculos cheios e vazios indicam gaps diretos e indiretos, res- pectivamente. As linhas verticais tracejadas indicam os materiais dos principais substratos utilizadas para crescimento epitaxial. As faixas de valores de 1 a 3% de diferença no parâmetro de rede para o $GaAs$ são indicados por marcações em em vermelho e verde com as correspondentes variações no bandgap do material	31
FIGURA 2.6 –	(a) Representação das camadas crescidas de uma heteroestrutura de poços quânticos múltiplos e suas bandas de condução $(E_C)$ e de valência $(E_V)$ . (b) Representação de um poço quântico	32
FIGURA 2.7 –	Classificação de heterojunções de acordo com seus alinhamentos de banda. (a) tipo 1, (b) Tipo 2, (c) tipo 3	32
FIGURA 2.8 –	Estrutura de bandas para o GaAs, a parte do gráfico destacada pelo retângulo indica a região de interesse.	33
FIGURA 2.9 –	Perfil da banda de condução de um MQW, considerando a segrega- ção e a difusão de dopantes, dos poços para as barreiras.	33

FIGURA 2.10	-Mecanismos de corrente de escuro. (a) Emissão termiônica, (b) Tu- nelamento termicamente assistido, e (c) Tunelamento sequencial 3	38
FIGURA 2.11	-Processos de espalhamento de elétrons (círculos) da sub-banda fun- damental, com distribuição $N_{2D}$ , para os estados no contínuo, com distribuição $N_{3D}$ e captura de elétrons do contínuo de volta para a sub-banda fundamental. A principal contribuição para fuga por espalhamento são os elétrons com sua energia maior que a altura da barreira	39
FIGURA 2.12	-Representação esquemática do processo de geração da corrente de escuro. Em condições de estado estacionário temos que $j_{trap} = j_{em}$ . 4	40
FIGURA 2.13	–Ilustração das energias relevantes da redução da barreira de poten- cial devido ao campo elétrico. A energia do elétron, E, é referenciada ao centro do poco.	43
FIGURA 2.14	-Perfil da banda de condução nas vizinhanças das bordas do poço quântico: A curva pontilhada, mostra o efeito geométrico no perfil da banda, e a curva sólida, mostra o efeito da combinação do efeito geométrico e do efeito Poole-Frenckel, o potencial, o perfil para $F =$ 0 também é mostrado	45
FIGURA 2.15	-Exemplo de densidade de corrente de escuro, I-Vs, típicas para QWIPs de $GaAs/AlGaAs$ a baixas temperaturas 4	45
FIGURA 2.16	-Perfil de banda de um MQW para diferentes valores de potencial aplicado: (a) tensão nula; (b) tunelamento sequencial quase resso- nante, com flechas indicando a direção de condução; (c) Formação do domínio de campo alto; (d) expansão do domínio de campo elé- trico alto, através da inclusão de mais poços devido ao aumento da	
	tensão	46
FIGURA 2.17	<ul> <li>Medida I-V de una superfiede de GaAs/AlGaAs fracamente acoplada, com uma inserção mostrando uma amplificação da medida</li> <li>I-V e C-V a 100 kHz, entre 3,1 e 3,8 V, mostrando que os picos na capacitância antecedem a queda brusca na corrente (NDC). Todas as medições foram feitas no escuro a 77 K.</li> </ul>	47
FIGURA 3.1 –	- (a) Representação da amostra estudada. (b) Níveis de energia cal- culados nos poços quânticos	49
FIGURA 3.2 –	- Interface principal do programa QWS	50

FIGURA 3.3 –	Estação de sondas CCR 10 da Janis, a ampliação mostra a câmara de vácuo onde a amostra é posicionada	51
FIGURA 3.4 –	Ilustração da visão em corte lateral da estação de sondas, mostrando duas sondas posicionadas próximas da amostras, e os sensores para determinação da temperatura na amostra.	52
FIGURA 3.5 –	Diagrama elétrico da unidade SCUU exemplificando os contatos elé- tricos que permitem alternar entre medidas I-V e C-V	52
FIGURA 3.6 –	(a) Exemplo de um ajuste linear da curva j-V para determinação da condutância próximo de 0, 0 V. (b) Gráfico de Arrhenius, mostrando a condutância versus temperatura, para QWIPs de duas amostras distintas	54
FIGURA 3.7 –	Circuito equivalente de um dispositivo passivo genérico	55
FIGURA 3.8 –	Representação em <i>box-plot</i> do valor médio da capacitância, medida sobre a faixa de tensão de -5 V a 5 V, de um circuito RC em paralelo, constituído por um capacitor SMD de 4,7 pF, e resistores de: 270 $K\Omega$ , 180 $K\Omega$ , 100 $K\Omega$ , 12 $K\Omega$ ou 1,2 $k\Omega$ . O circuito foi inserido em uma caixa de teste de circuitos, à temperatura ambiente ( 300 K). As medições foram realizadas nas frequências de modulação de (a) 1 kHz, (b) 10 kHz, (c) 100 kHz e (d) 1 MHz	57
FIGURA 3.9 –	Representação em <i>box-plot</i> dos dados na polarização positiva e ne- gativa, das medições, a 10 K, da capacitância de um circuito RC em paralelo, capacitor SMD de 100 pF, e resistores de 33 M $\Omega$ , 22 M $\Omega$ , 8,2 M $\Omega$ , 4,7 M $\Omega$ , 1,2 M $\Omega$ , 680 K $\Omega$ , 330 K $\Omega$ , 270 K $\Omega$ , 120 K $\Omega$ , 12 k $\Omega$ , 1 K $\Omega$ e 560 $\Omega$ . Medições realizadas nas frequências de modulação de (a) 1 kHz, (b) 10 kHz, (c) 100 kHz e (d) 1 MHz, com circuito dentro da estação de sondas	58
FIGURA 4.1 –	Curvas I-Vs, no escuro e a 10 K, de três dispositivos nomeado: Dis- positivo A (linha solida preta), dispositivo B (linha vermelha trace- jada) e dispositivo C (linha verde tracejada e pontilhada). As mes- mas curvas são apresentadas tanto na escala linear (direita) quanto na logarítmica (esquerda), ambas indicadas por setas	61
FIGURA 4.2 –	Curvas de resistência diferencial obtida das medidas das curvas I- Vs. Dispositivo A (linha sólida preta), dispositivo B (linha vermelha tracejada) e dispositivo C (linha verde tracejada e pontilhada)	62

FIGURA 4.3 –	Medidas C-V dos dispositivos A, B e C a 10 K, usando modulação nas frequências de 1 kHz (a), 10 kHz (b) 100 kHz (c) e 1 MHz (d). A capacitância geométrica é representada por uma linha azul pontilhada. Em (a), além da curva C-V, foi adicionada a curva I-V dos três dispositivos para comparação	62
FIGURA 4.4 –	Cálculo da carga total acumulada nas estruturas, obtida através da integração das curvas C-Vs medidas a 10 K e 1 kHz, para os dispositivos A (linha preta sólida), B (linha vermelha tracejada) e C (linha verde tracejada e pontilhada), mostrando o comportamento da carga total estimada para a faixa de tensão aplicada	64
FIGURA 4.5 –	Curvas C-V a 10 K e 1 kHz expressas como função do MCE, para os três dispositivos. As curvas I-V nas escalas linear e logarítmica também são apresentadas como função do MCE	65
FIGURA 4.6 –	Representação dos estados eletrônicos unidimensionais para dois po- ços quânticos adjacentes, sujeitos a uma queda de potencial por período de 86 mV. O cálculo foi realizado utilizando o QWS, e po- demos observar o quasi nível de Fermi de um poço próximo do topo da barreira de saída do poço adjacente.	66
FIGURA 5.1 –	Representação do perfil das impurezas dopantes na estrutura	69
FIGURA 5.2 –	Perfil de banda com e sem a consideração de segragação de dopantes.	70
FIGURA 5.3 –	Banda de condução ilustrando os pontos de retorno clássicos a uma distância $Z_C$ para uma energia $E$ a partir do fundo da banda	71
FIGURA 5.4 –	Diagrama do pedaço da amostra que foi medido. Em vermelho es- tão indicados os dispositivos que foram medidos. A parte circular a esquerda é a borda do substrato, e é onde se espera maior ino- mogeneidade no crescimento, assim evitamos medir os dispositivos próximos da borda	73
FIGURA 5.5 –	Curvas de densidade de corrente de escuro em função do campo elétrico médio na estrutura, para temperaturas de 60 K a 120 K. Medições realizadas utilizando o método de 4 pontas	74
FIGURA 5.6 –	(a) Curvas de densidade de corrente de escuro média de todos os dispositivos medidos, com os respectivos desvios padrão. (b) Desvio padrão relativo das médias.	75

FIGURA 5.7 –	(a) Gráfico de Arrhenius da condutância para determinação da ener-	
	gia de ativação. (b) Energia de ativação obtida a campo zero para os dispositivos medidos	76
FIGURA 5.8 –	Gráficos de Arrhenius da corrente do dispositivo 119 na faixa de ten- são de 0,1 V a -4,0 V (a) e de 0,1 V a 3,1 V (b), para as temperatura de 60 a 120 K	76
FIGURA 5.9 –	<ul> <li>(a) Energia de ativação de todos os QWIPs medidos nas duas po- larizações.</li> <li>(b) Energia de ativação obtida a partir da corrente de escuro média de todos os QWIPs, considerando os três modelos de corrente de escuro citados na seção 2.3.2.</li> </ul>	77
FIGURA 5.10 -	-(a) Curvas experimentais e teóricas da currente de escuro na faixa de temperatura de 80 a 120 K, e (b) comparação das curvas de corrente teóricas e experimentais a 80 K com e sem o uso da mobilidade diferencial negativa (NDM).	78
FIGURA 5.11 -	-(a) Curvas de energia de ativação experimental e teóricas calcula- das no intervalo de 80 a 120K para tensão positiva e negativa. (b) Energia de ativação teórica com e sem considerar a dependência da	
	velocidade de deriva com a temperatura	79

# Lista de Tabelas

TABELA 3.1 – Parâmetros de projeto da amostra que foram utilizados para o cresci-	
mento por MBE. Estes parâmetros foram obtidos a partir da parceria	
entre LCDS/IEAv e LEV/IEAv, tendo sido utilizada a ferramenta	
computacional QWS	19
TABELA 5.1 – Parâmetros utilizados para obter as curvas teóricas de corrente de	
escuro considerando $\alpha_R = 0,5 \ nm \ e \ \alpha_L = 0,3 \ nm.$	78

# Lista de Abreviaturas e Siglas

$\operatorname{SL}$	Superrede
QWIP	Sensor de infravermelho a poços quânticos
SMD	Dispositivos para montagem sobre a superfície
LCDS	Laboratório de Caracterização de Dispositivos Semicondutores
LEV	Laboratório de Engenharia Virtual
IR	Radiação Infravermelha
NDC	Condutância diferencial negativa
ISB	Absorção intersubbanda
EFD	Domínio de campo elétrico
MCE	Máximo campo elétrico
NE	Capacitância negativa
MBE	Epitaxia por feixe molecular

# Lista de Símbolos

$\lambda$	Comprimento de Onda
$L_S(T,\lambda)$	Radiância espectral
$L_{CN}$	Radiância espectral de um corpo negro
h	Constante de Planck
c	Velocidade da luz
$k_B$	Constante de Boltzmann
T	Temperatura em escala Kelvin
a	Vetor de distâncias
$L_w$	Largura do poço
$L_B$	Largura das barreiras
$L_p$	Comprimento de um período da superrede
$\lambda$	Comprimento de onda
h	Constante de planck
R	responsividade
V	Tensão aplicada
$\phi_e$	Potência incidente
NEP	potencia equivalente de ruído
D	Detectividade
$E_g$	bandgap de um dado material
$E_{act}$	Energia de ativação
$\alpha_L$	Comprimento de difusão médio
$\alpha_R$	Comprimento de segregação médio

# Sumário

1	INT	[RO]	DUÇÃO	20
	1.1	Mo	tivação	20
	1.2	Um	a breve história e objetivos	20
	1.3	Est	rutura da Tese	24
2	Fu	NDA	Amentação Teórica	25
	<b>2.1</b>	Rac	diação Infravermelha e Fotodetectores	25
	2.1	.1	Responsividade	27
	2.1	.2	Potência equivalente de ruído	28
	2.1	.3	Detectividade	28
	2.2	Fot	odetectores de IR a Poços Quânticos	29
	2.2	.1	As propriedade físicas do sistema	30
	2.2	.2	Estados eletrônicos em poços quânticos	34
	2.2	.3	Acoplamento Óptico	36
	<b>2.3</b>	Cor	rrente de escuro	37
	2.3	.1	O Modelo de emissão-captura para corrente de escuro	38
	2.3	5.2	Energia de Ativação	42
	2.3	.3	Correntes de escuro a baixas temperaturas	45
3	Pr	OCE	EDIMENTOS EXPERIMENTAIS	48
	3.1	A a	mostra utilizada	48
	3.2	Fer	ramenta computacional	49
	3.3	Apa	arato de medidas elétricas	50
	<b>3.4</b>	Me	dição da Corrente elétrica, I-Vs	52

	3.5	Energia de Ativação	53
	3.6	Medição de Capacitâncias, C-Vs	53
	3.7	Procedimento experimental da análise das medidas I-Vs de QWIPs a baixas temperaturas	55
	3.8	Procedimento experimental das I-Vs de QWIPs a Temperaturas Médias e Altas	59
4	I-V	's de QWIPs a Baixas Temperaturas	60
	4.1	Resultados e discussão	60
	4.2	Conclusão	67
5	I-V	s de QWIPs a Temperaturas Médias e Altas	68
	5.1	Modelo Teórico	68
	5.1	.1 Difusão e segregação de dopantes	68
	5.1	.2 Modelagem da Corrente de Escuro	69
	5.2	Resultados e Discussão	72
	5.3	Conclusão	80
6	Сс	DNCLUSÕES	82
R	EFER	ÊNCIAS	83

# 1 Introdução

### 1.1 Motivação

A tecnologia de sensores de infravermelho pode ser empregada em uma vasta área de aplicações. Por exemplo, a detecção prematura de ação de pragas ou deficiência de irrigação em grandes áreas plantadas é de grande relevância para a agricultura (1, 2). Elas também são úteis para a avaliação da saúde de coberturas vegetais (3), para localização de focos de incêndio (4), para visualização de cabeça de pista em aterrissagem sob condições climáticas desfavoráveis (5), para comunicações ópticas no espaço livre (6), para o monitoramento de vazamento de gases (7). Imagens térmicas são úteis para manutenção preventiva de instalações industriais e linhas de transmissão de energia elétrica. A aplicação mais conhecida de sensores de infravermelho talvez seja a de visão noturna. Essa aplicação é de grande importância para forças armadas e para segurança civil. Há ainda a utilização de infravermelho para auxílio ao diagnóstico médico, como no caso de ocorrência de câncer de mama e de pele(8).

### 1.2 Uma breve história e objetivos

Desde os primeiros estudos de condutividade elétrica em materiais por Stephen Gray (9) por volta de 1700, até o desenvolvimento das atuais tecnologias eletrônicas amplamente utilizadas na nossa vida cotidiana, grandes avanços foram possíveis graças ao acúmulo de conhecimento sobre o transporte de cargas nos sólidos. Em particular, em materiais semicondutores, o domínio dos processos de fabricação de heteroestruturas de filmes finos, que permitiram um controle fino da composição e espessura dessas camadas, geraram uma completa nova classe de dispositivos.

As heteroestruturas foram inicialmente desenvolvidas por Kroemer em 1957 (10) propondo o crescimento epitaxial de sequências de camadas semicondutoras de diferentes *bandgaps*. Já em 1970, Alferov, utilizando esta mesma técnica, demonstrou o funcionamento do primeiro laser de  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  de emissão contínua (11). No mesmo ano, Esaki e Tsu elaboraram uma teoria para um potencial periódico unidimensional formado por uma sequência de camadas semicondutoras com diferentes *bandgaps* ou concentrações de dopantes, que passaram a ser referidas pelo termo superrede, SL (*superlattice*). Eles calcularam a largura e a posição das estreitas bandas de energia permitidas e proibidas (chamadas de subbandas) que surgem nas SLs de período curto,  $\approx 100$  Å, devido à subdivisão da zona de Brillouin em uma série de minizonas.

As SLs, basicamente, podem ser organizadas em duas classes: fortemente acopladas, onde as barreiras das SLs são finas o suficiente para permitir uma forte sobreposição das funções de onda das cargas livres entre dois poços quânticos adjacentes, formando assim minibandas de largura razoável; e as fracamente acopladas, onde as barreiras são largas, de modo que a sobreposição das funções de onda dos portadores livres nos poços quânticos adjacentes é fraca e as minibandas se tornam estreitas (12). Estas são, frequentemente denominadas de estrutura de poços quânticos multiplos, MQW (*Multi Quantum Well*), e podem exibir propriedades exóticas tais como tunelamento ressonante e condutância diferencial negativa, NDC (Negative Differential Conductance) (13). Elas também têm sido usadas para demonstrar muitos fenômenos básicos em mecânica quântica, como por exemplo, tunelamento assistido por fótons (14, 15) e tunelamento ressonante sintonizado magneticamente (16, 17).

Em 1977, Esaki e Sakaki (18) sugeriram a possibilidade de usar a estrutura de SL feita de camadas de GaAs e AlGaAs para detectar a radiação infravermelha, IR. Ando et al. em 1982 (19), foram os primeiros a medir a absorção por excitação entre sub-bandas de elétrons, que mais tarde se tornou conhecida como absorção intersubbanda (ISB). Outro avanço considerável ocorre em 1983 quando Smith et al. (20) demonstraram o funcionamento de um fotocondutor baseado em uma SL de AlGaAs (absorção por excitação de elétrons livres, não transição direta entre minibandas). Em 1985 West e Eglash demonstraram a dependência inversa entre a posição do pico de absorção, em energia, ISB, e a espessura da camada do material de menor *bandgap* conhecido como poço quântico, QW (*Quantum well*). Isso significa que a espessura do QW determina o comprimento de onda de operação do dispositivo optoeletrônico ISB. O primeiro fotodetector de infravermelho a QW baseado em transições ISB, conhecido como fotodetector de infravermelho a poços quânticos, QWIP (*quantum well Infrared photodetector*), foi demonstrado por Levine et al. (21) em 1987.

Para realizar um ajuste detalhado das estruturas de QWIP, uma compreensão completa dos parâmetros relevantes dos dispositivos é imprescindível. Entre eles, um de grande importância é a corrente de escuro, que se refere à corrente (I-V) sem incidência de luz que o sensibilize. De uma forma geral, superrredes tipo MQW, a baixas temperaturas, apresentam corrente de escuro melhor descrita por um esquema de tunelamento sequencial (22), e uma estrutura com algumas subbandas em cada poço geralmente apresenta uma curva I-V com um comportamento semelhante a uma escada, com platôs associados à formação e expansão de domínios de campo elétrico alto (maior que no restante da estrutura), EFD (electric field domain) (23, 13, 14, 15). Também é comum que as curvas I-V apresentem sequências de NDC periódica (24). Estudos experimentais foram realizados usando medições I-V e capacitância versus tensão, C-V, em diferentes temperaturas, e modelos teóricos foram desenvolvidos, a fim de melhor compreender o regime de transporte a baixas temperaturas (25, 26).

A estrutura QWIP mais comumente utilizada pode ser vista como um caso extremo de uma SL fracamente acoplada ou MQW, no qual a minibanda de menor energia é muito estreita (da ordem de neV) (27), de forma tal que qualquer pequena tensão aplicada ou flutuação da largura das camadas é suficiente para quebrá-la em estados localizados. Além disso, a segunda minibanda é geralmente localizada em torno do topo das barreiras. Uma vez que possuem apenas uma ou no máximo, duas subbandas ligadas nos poços, tais estruturas poderiam ter, no máximo, um platô nas características I-V de baixas temperaturas (12, 28, 29). Alguns autores relatam a observação desse platô (28, 30), embora muitos autores tenham relatado I-Vs em baixas temperaturas sem nenhum platô (25). Domínios de campo elétrico em MQWs também foram observados e investigados usando medidas C-V, que mostraram picos de capacitância relacionados aos picos de NDC periódicos (29, 31). As medidas C-V também mostraram um aumento de carga em MQWs fortemente acoplados, associado à inomogeneidades da estrutura (32). Medidas C-V ainda foram utilizadas para investigar o início de domínios termicamente induzidos em dispositivos QWIPs (33) e seu comportamento foi analisado teoricamente, incluindo comportamentos incomuns, como Capacitância Negativa, NC (Negative Capacitance) (34).

A temperaturas médias e altas, a corrente de escuro apresenta uma dependência forte com a energia de ativação (23). A energia de ativação pode ser definida como a mínima energia que uma carga ligada, com energia igual a de Fermi, precisa receber para que possa contribuir com a corrente termiônica, sendo ejetada com energia acima das barreiras. À tensão nula, esse valor pode ser obtido pela diferença entre a energia do topo da barreira e a energia de Fermi do sistema (35). Comumente este parâmetro é obtido dos valores experimentais das medidas I-Vs, utilizando-se o gráfico de Arrhenius para a corrente a dada tensão ou para a condutância a 0 V. Pode-se assim, obter a curva de energia de ativação em função da tensão aplicada (36, 35, 37, 38, 39), sendo as vezes, expressa em termos do campo elétrico médio. Este método largamente empregado fornece valores aparentes para a energia de ativação, não sendo exatamente igual a definição apresentada anteriormente. Essa energia de ativação aparente representa a média dos efeitos de transportes na estrutura, sendo influenciada, por exemplo, pelo tunelamento termicamente assistido.

Apesar de, comumente, serem nominalmente simétricas, as estruturas de QWIPs apresentam assimetrias estruturais advindas de limitações técnicas tais como: interfaces assimétricas das camadas, e difusão e segregação de dopantes. A segregação de dopantes em semicondutores tem sido muito estudada tanto experimentalmente quanto teoricamente (36, 40, 41, 42, 43), tendo sido associada à falta de simetria encontrada em medidas de corrente de escuro em QWIPs. No entanto, poucas análises quantitativas incluem o papel da segregação na assimetria observada em dados experimentais. No trabalho de Lee *et. al.* (44), por exemplo, embora a mudança no perfil do potencial gerado pelas impurezas ionizadas na barreira seja levada em conta por meio da consideração de um comprimento efetivo da barreira, o comportamento predito é adequado somente para as curvas a baixas tensões aplicadas (45).

Atualmente, os estudos em dispositivos QWIPs formados por barreiras de AlGaAs e poços de GaAs com dopagem tipo n, continuam tendo grande interesse, e trabalhos como o de Roodenko et. al. (46), visando avaliar a produção comercial de QWIPs (em geral fabricados usando a tecnologia de epitaxia por feixe molecular, MBE, que permite um elevado controle sobre a estrutura de poços quânticos), vem sendo desenvolvidos. Existe um interesse no ajuste do controle da densidades de corrente de escuro dos detectores e na variação da faixa de comprimentos de onda de funcionamento, que são dependentes também do processo de produção. Em seu trabalho, Roodenko e colaboradores estudaram o ajuste do comprimento de onda de corte, ajustando a espessura da camada do poço quântico (QW) de GaAs e a composição da barreira de AlGaAs. O controle sobre as densidades de corrente de escuro foi estudado através da correlação com os níveis de dopagem e o comprimento de onda do detector. Em um outro trabalho desenvolvido por Zhang et. al. (47) se buscou investigar a melhor técnica para caracterizar a uniformidade na composição da estrutura de multi poços quânticos de AlGaAs/GaAs crescidos por MBE, na tentativa de melhorar o processo de fabricação. A uniformidade de propriedades incluindo a composição das camadas de AlGaAs e a mobilidade eletrônica das estruturas de AlGaAs/GaAs foram melhoradas pelo ajuste das configurações da temperatura de crescimento do material. Além destes, existem estudos que buscam modificar a estrutura tipo AlGaAs/GaAs de modo a obter um dispositivo QWIP com melhores características, um bom exemplo é o trabalho desenvolvido por Albo e et. al. que, por meio de uma modificação do tipo InGaAsN/AlGaAs, conseguiu alterar a resposta espectral deslocando a sensibilidade espectral da tecnologia QWIP para a faixa de comprimento de onda curta estendida (e-SWIR) e mudando o mecanismo de detecção, conseguindo, assim, um dispositivo que trabalhe a temperaturas operacionais mais altas.

Este trabalho conjuga resultados experimentais e teóricos de forma a melhorar o entendimento e capacidade de simulação de dispositivos sensores de infravermelho do tipo QWIP. O transporte eletrônico nesses dispositivos foi analisado tanto a baixas temperaturas, onde predomina a condução por tunelamento sequencial, quanto a temperaturas mais elevadas, onde predomina emissão termiônica e tunelamento termicamente assistido. A baixas temperaturas, medidas C-Vs de dispositivos confeccionados simultaneamente sobre o mesmo substrato ajudaram a identificar a origem de diferenças nas curvas I-Vs desses dispositivos, que seriam, a princípio, iguais. Medidas de características I-V, desses mesmos dispositivos, para uma faixa ampla de temperaturas, e a obtenção de energias de ativação aparente, como função da tensão aplicada, permitiram o melhoramento de um modelo teórico existente, passando a incluir mobilidade diferencial negativa e a segregação de dopantes. Tais alterações permitiram ajustar curvas I-Vs assimétricas, mantendo a devida simetria da mobilidade. Salienta-se que trabalhos anteriores ajustavam as polarizações de forma independente, obtendo valores distintos para a mobilidade, o que não se justifica fisicamente. Naturalmente, a dependência da energia de ativação aparente com a tensão também se mostra assimétrica. Além de assimétrica, seu comportamento é significativamente diferente do que se espera de uma corrente dominada por emissão termiônica. O modelo proposto logrou bem ajustar também este comportamento.

## 1.3 Estrutura da Tese

Esta tese foi dividida em seis capítulos, uma introdução, Seguida do capítulo 2 no qual abordamos os princípios físicos relevantes ao entendimento das estruturas dos fotodetectores de infravermelhos a poços quânticos de interesse nesta tese. Apresenta-se um brevemente histórico sobre a Radiação de Infravermelho e sobre a tecnologia de fotodetectores, seguida de uma discussão sobre os fotodetectores a poços quânticos que são analisados, e, por fim, é feito uma discussão sobre alguns modelos específicos de corrente de escuro em QWIPs para diferentes regimes de condução. No capítulo 3 é apresentada, a estrutura da amostra utilizada, os procedimentos experimentais de caracterização e uma descrição detalhada do aparato experimental. No capítulo 4 discutimos os resultados e análise das medidas I-V e C-V de dispositivos QWIPs a baixas temperaturas. No capítulo 5 discutimos os resultados e análises das medidas I-V, realizadas a temperaturas médias e altas. Por fim no capítulo 6 são apresentadas as conclusões do trabalho.

# 2 Fundamentação Teórica

A maior parte das ideias que embasam a tecnologia dos QWIPs está compilada em uma série de excelentes livros e esta breve revisão se fundamenta principalmente nas seguintes referências (23, 48, 49, 50, 51). A seguir, abordamos os princípios físicos mais relevantes para o entendimento dos fenômenos associados aos temas discutidos nesta tese.

### 2.1 Radiação Infravermelha e Fotodetectores

Desde a descoberta por Friedrick W. Herschel da radiação infravermelha contida na luz do sol (52), buscam-se melhores técnicas para detectar e analisar esse espectro, que é invisível a olho humano. Uma das razões para o grande interesse nesta radiação é o fato de que um objeto a temperatura ambiente emite a maior parte de sua energia na forma de IR, o que permite observá-lo mesmo sob condições em que a visão humana (espectro do visível) não consegue (53). A energia irradiada por qualquer objeto a dada temperatura é determinada pela sua emissividade,  $\epsilon$ . A emissividade de um material especifica o quão bem esse corpo irradia energia em comparação à um emissor perfeito (corpo negro). O espectro de emissão de um objeto à temperatura T, como função do comprimento de onda  $\lambda$ , é dado por  $L_S(T, \lambda) = \epsilon(T, \lambda)L_{CN}(T, \lambda)$  (54), onde  $L_{CN}$  é a radiância espectral de um corpo negro a mesma temperatura, calculada por:

$$L_{CN}(T,\lambda) = \frac{2hc^2}{\lambda^5(e^{hc/\lambda k_B T} - 1)},$$
(2.1)

onde, h é a constante de Planck, c é a velocidade da luz no vácuo,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. A Fig 2.1 mostra o cálculo dos valores de  $L_{CN}$  em diferentes temperaturas. Desta equação, e dentro dos limites da aproximação de corpo negro, podemos dizer que todas os objetos que nos cercam são fontes de IR, e que corpos a temperatura ambiente, irão emitir IR com o pico de intensidade em torno de 9,5  $\mu m$ .

O pico se desloca no sentido de diminuir seu comprimento de onda à medida que a temperatura do corpo negro aumenta. Coincidentemente, o pico de emissão de um corpo negro a 300 K está em uma faixa de alta transmissão de radiação eletromagnética



FIGURA 2.1 – Curvas de radiância espectral emitida por um corpo negro a diferentes temperaturas, a linha tracejada indica o comportamento do pico de máximo com a variação da temperatura. Figura adaptada a partir da referência (54).

através da atmosfera,  $8 - 14\mu m$  (juntamente com  $2 - 5\mu m$  e na faixa de  $28 - 34\mu m$ ), o que é conhecido como janela de transmissão atmosférica (54, 55), que está ilustrada na Figura 2.2. Isso faz de um detector de infravermelho uma ferramenta muito poderosa para observar objetos distantes com temperaturas ao redor de 300 K.



FIGURA 2.2 – Espectro de transmissão atmosférica em função do comprimento de onda, com a indicação das moléculas que tem maior absorção atmosférica por faixa de comprimento de onda. Figura adaptada a partir da referência (54).

A história dos detectores de infravermelho tem seu início em meados do século 19, quando surgiram algumas espécies de detectores que funcionavam por variação da temperatura e eram conhecidos por termomultiplicadores de Melloni (56). Case (57) descobriu, ao estudar a variação da resistências de certos materiais com luz solar, que alguns materiais como o sulfeto de chumbo exibem resposta à luz infravermelha, e desenvolveu o que pode ser considerado o primeiro fotodetector moderno que apresentava resposta quântica, e não mais térmica, dando início a todo o campo de estudos dos fotodetectores de infravermelho que conhecemos hoje (58, 23).

Os fotodetectores baseados em sistemas mesoscópicos, como fotodetectores de poços quânticos, tiveram suas origens na proposta de criação de superredes moduladas pela junção de filmes finos de diferentes materiais, ou pela variação periódica da dopagem na estrutura cristalina de um mesmo material, no inicio da década de 70 (59, 60, 61). Os detectores de infravermelhos a poços quânticos tem mostrado excelente desempenho, com a vantagem da transição óptica ser intrabanda, o que permite um ajuste utilizando uma quantidade maior de parâmetros, do que os convencionais detectores de HgCdTe, que possuem mais restrições com relação ao processo de fabricação (58, 62).

Rogalski et. al. (63) discutiram as vantagens e desvantagens destes dois tipo de fotodetectores, mostrando que a escolha da tecnologia a ser utilizada é dependente da faixa de temperatura, comprimento de onda, precisão e custo dos dispositivos desejados. As diversas análises de QWIPs individuais resultaram em um desempenho que está abaixo do obtido por fotodetectores individuais de HgCdTe, no entanto, os desempenhos das matrizes de QWIPS são superiores quando operando na janela de 8 a 12  $\mu m$ . Em especial, a técnica de crescimento de heteroestruturas por MBE garante, atualmente, excelente qualidade cristalina e precisão no processo de crescimento dos fotodetectores a poços quânticos, principalmente para materiais semicondutores do grupo  $III - V \operatorname{como} Al_{1-x}Ga_xAs$ e GaAs.

Para podermos comparar diferentes tecnologias de fotodetectores, temos que observar certas figuras de méritos que fornecem uma visão geral das capacidades de cada dispositivo. Para as medições realizadas em um único pixel (ou elemento sensor), as figuras de mérito comumente reportadas na literatura são: Responsividade, Detectividade e Corrente de Escuro.

#### 2.1.1 Responsividade

A responsividade, R, de um detector de IR é definida como a razão entre o sinal fotogerado e a potência da radiação incidente na superfície ativa do dispositivo. As unidades de responsividade são Ampere por Watt (A/W) ou Volts por Watt (V/W). Ela pode ser diferenciada em responsividade integral, que leva em conta a potência em todas as faixas de comprimentos de onda emitida pela fonte, ou a responsividade espectral, que leva em conta a potência incidente em dado comprimento de onda e que pode ser expressa matematicamente como:

$$R_{\nu}(\lambda, f) = \frac{V_s}{\phi_e(\lambda)},\tag{2.2}$$

onde  $V_s$  é o sinal de tensão (ou corrente) devido a potencia incidente,  $\phi_e(\lambda)$  é .

#### 2.1.2 Potência equivalente de ruído

A potência equivalente de ruído (NEP) é a potência incidente no detector, capaz de gerar uma saída de sinal (corrente, I ou V) igual ao ruído rms ( $I_n, V_n$ ). Portanto, o NEP é o nível de sinal que produz uma relação sinal-ruído (SNR) igual a 1. Ele pode ser escrito em termos de responsividade como:

$$NEP = \frac{I_n}{R_i} = \frac{V_n}{R_\nu},\tag{2.3}$$

e sua unidade no S.I. é o Watt (W). Como o ruído é dependente da largura de banda da medida elétrica, o NEP é frequentemente apresentado para uma largura de banda de referência fixa. Este NEP por unidade de largura de banda tem, no S.I., a unidade de Watts por raiz quadrada de Hertz  $(W/\sqrt{Hz})$ .

### 2.1.3 Detectividade

A detectividade é uma importante figura de mérito de um detector de infravermelho. A detectividade D é o recíproco do NEP:

$$D = \frac{1}{NEP} \tag{2.4}$$

O NEP é proporcional a raiz quadrada da banda de frequência do sinal do detector e da sua área,  $A_d$ . Isso significa que tanto o NEP quanto a detectividade são funções da largura de banda e área de detecção, por isso, uma detectividade normalizada  $D^*$ foi definida (64) como sendo a detectividade normalizada pela raiz quadrada da área do detector e da largura de banda da medição:

$$D^* = \frac{\sqrt{A_d \Delta f}}{NEP} \tag{2.5}$$

A detectividade normalizada permite a comparação de fotodetectores do mesmo tipo,

mas com diferentes áreas. Curvas de detectividade espectral para uma série de fotodetectores de IR comercialmente disponíveis são mostrados na Fig. 2.3.



FIGURA 2.3 – Resposta espectral de vários fotodetectores de IR. A curva em vermelho indica a resposta espectral de um QWIP de GaAs a 77 K. Figura adaptada a partir da referência (62).

Outra importante figura de mérito é a corrente de escuro, que será discutida em mais detalhes na seção 2.3. Como vimos nesta seção, foi aplicada grande quantidade de dinheiro, tempo e esforço para o desenvolvimento e melhoria de várias tecnologias de detectores de infravermelho para aplicação nas mais diversas áreas. De acordo com Downs et. al. (65) as principais aplicações podem ser agrupadas em: militares (como por exemplo navegação, visão noturna, detecção de armas), comercial (como por exemplo nas comunicações, aeroespacial, imagens médicas), monitoramento público (como por exemplo sondagem atmosférica, controle de poluição, meteorologia, monitoramento ambiental), e acadêmica (por exemplo astronomia), novas aplicações surgem a medida que esta tecnologia se desenvolve. A seguir iremos focar nossa atenção nos detectores de IR a poços quânticos que são de interesse deste trabalho.

## 2.2 Fotodetectores de IR a Poços Quânticos

O principio de funcionamento dos fotodetectores de infravermelho a poços quânticos é baseado na absorção de fótons por excitação de cargas entre duas sub-bandas de dado poço quântico, que é uma transição intrabanda, IST (*intersubband transition*). A estrutura do poço quântico é projetada para que as cargas excitadas para dada sub-banda possam escapar do poço e contribuir para o fluxo de cargas acima da barreira.

Levine *et. al.*, em 1987 (21), demonstrou experimentalmente o funcionamento do primeiro QWIP utilizando IST entre duas sub-bandas ligadas dos poços para uma estrutura de  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ , com poços dopados tipo n (Si). Foi observada uma responsividade de R = 0, 5 A/W para  $\lambda = 10, 3 \mu m$ . Em 1991 a fabricação de matrizes de plano focal de alto desempenho foram demonstradas por Levine et. al. (66, 35). Atualmente é possível obter comercialmente câmeras de infravermelho com a tecnologia de QWIP (67).

### 2.2.1 As propriedade físicas do sistema

Neste trabalho, estamos interessados em dispositivos com poços de GaAs dopados e barreiras de  $Al_xGa_{1-x}As$ , ambos crescidas por epitaxia de feixe molecular, MBE (molecular beam epitaxy). O GaAs é um semicondutor da família III-V, que forma uma estrutura cristalina do tipo esfalerita (*zincblende*, Fig 2.4), de gap direto de  $E_g = 1.519 \ eV$  a 0 K (68).



FIGURA 2.4 – Célula unitária de uma estrutura do tipo da esfalerita. Átomos de As e Ga são representados por bolas rosas e verdes, respectivamente. Figura adaptada a partir da referência (69).

A estrutura cristalina do GaAs está mostrada na Figura 2.4. Esta estrutura pode ser interpretada como duas estruturas cúbicas de face centrada interpenetradas. Cada umas das estruturas fcc é composta por um único tipo de átomo e estão separadas uma da outra por (a/4, a/4, a/4), sendo a o parâmetro de rede. Em estruturas cristalinas, a periodicidade criada pelo arranjo atômico gera bandas de energia que determinam as propriedades eletrônicas do material. Estas estruturas de bandas identificam os estados de energia permitidos para um vetor de onda  $\mathbf{k}$ . Comumente, a estrutura de banda é representada no espaço dos  $\mathbf{k's}$ , de um ponto de simetria a outro dentro da zona de Brillouin, sendo a zona de Brillouin definida como uma célula unitária da rede reciproca. Exemplos de pontos de simetria na zona de Brillouin para a estrutura do GaAs são ilustrados na Figura 2.8. A primeira zona de Brillouin contém todas as informações necessárias para definir completamente à estrutura cristalina, incluindo o comportamento de qualquer elétron se propagando na rede (70). A adição de Alumínio, Al, na forma  $Al_xGa_{1-x}As$  permite controlar o gap da liga para valores em torno de 2 eV. Na prática valores típicos de Al utilizados para as principais aplicações na área óptica estão em torno de 30%, visto que acima de 45% o gap passa a ser indireto e se torna menos eficiente para esta aplicação (68). O fato de substituirmos Ga por Al não altera consideravelmente o parâmetro de rede do GaAs, como pode ser visto na Figura 2.5. No entanto, altera significativamente a largura da banda proibida e o alinhamento entre as bandas. O desalinhamento da banda de condução entre o AlGaAs e o GaAs é proporcional à concentração de alumínio. Para x < 0, 4 temos que  $\Delta E_c =$  $(0, 87 \pm 0, 04)x \ eV$  (71).



FIGURA 2.5 – Bandgaps e parâmetros de rede para semicondutores típicos e suas ligas. Círculos cheios e vazios indicam gaps diretos e indiretos, respectivamente. As linhas verticais tracejadas indicam os materiais dos principais substratos utilizadas para crescimento epitaxial. A faixa de valores de 1 a 3% de diferença no parâmetro de rede para o GaAssão indicados por marcações em em vermelho e verde, com as correspondentes variações no bandgap. Figura adaptada a partir da referência (72).

Alternando entre camadas de semicondutores, podemos gerar situações de confinamento quântico. No nosso caso, uma fina camada semicondutora de *bandgap* menor (por exemplo, GaAs) é colocada entre duas camadas mais largas de um material de *bandgap* maior (por exemplo,  $Al_xGa_{1-x}As$ ), criando assim um poço quântico. Na Figura 2.6 (a) temos uma ilustração das camadas para formar tal estrutura, sobreposta sobre o comportamento das bandas de condução e valência com a alteração do material. Na Figura 2.6 (b) temos uma representação da dinâmica de cargas em um poço quântico iluminado. Tal estrutura pode ser obtida, com alta qualidade, crescendo as camadas alternadamente por Epitaxia por Feixe Molecular (MBE).



FIGURA 2.6 – (a) Representação das camadas crescidas de uma heteroestrutura de poços quânticos múltiplos e suas bandas de condução  $(E_C)$  e de valência  $(E_V)$ . (b) Representação da dinâmica de cargas em um poço quântico iluminado. Figura adaptada a partir da referência (73).

Tais estruturas, formadas por mais de um tipo de material semicondutor, recebem o nome de heteroestruturas (10, 74). A interface das heteroestruturas permite classificá-las de acordo como o alinhamento do *bandgap*. As estruturas do tipo 1, ocorrem quando o alinhamento permite que o *gap* de um dos semicondutores fique completamente dentro do *gap* do outro semicondutor. Neste caso, ambos, elétrons e lacunas são confinados na camada de *gap* mais estreito, como representado na Figura 2.7 (a). Este é o caso do par GaAs/AlGaAs. As demais estruturas possíveis, tipo 2 e tipo 3, são também ilustradas.



FIGURA 2.7 – Classificação de heterojunções de acordo com seus alinhamentos de banda. (a) tipo 1, (b) Tipo 2, (c) tipo 3. Figura adaptada a partir da referência (75).

O GaAs possui uma banda de valência com 3 sub-bandas (ignorando efeitos de spin) 2 das quais são degeneradas em k = 0. A banda de condução possui um mínimo ocorre no ponto gama,  $\Gamma$  (centro da zona de Brillouin), resultando em um *bandgap* direto. Se considerarmos somente a região indicada em verde na Figura 2.8 (a), podemos simplificar a estrutura do GaAs usando somente estas 4 bandas (uma única banda de condução parabólica, e a banda de valência consistindo de bandas de buracos leves e pesados e uma banda de *split-off*. O *bandgap* do GaAs bulk no ponto  $\Gamma$  é 1,424 eV a 300 K, e a sua dependência com a temperatura é dada por:



FIGURA 2.8 – Estrutura de bandas para o GaAs, a parte do gráfico destacada pelo retângulo indica a região de interesse. Figura adaptada a partir da referência (76).

Δ

Vetor de onda k

X U.K

No estudo dos poços quânticos também é preciso levar em conta a segregação e a difusão de dopantes que ocorre durante o crescimento do cristal por MBE. Como já foi discutido na literatura (77), é possível que assimetrias observadas nas curvas I-Vs de QWIPs estejam relacionadas à diferença entre os coeficientes de difusão e segregação de dopantes. Pequenas quantidades de carga (impurezas ionizadas), introduzidas nas barreiras por estes processos, podem levar a significativas variações na estrutura do perfil da banda de condução. A Figura 2.9 ilustra uma possível configuração para uma banda de condução de um MQW, devido a alterações pelos processos de difusão e segregação de dopantes, dos poços para as barreiras. Esse processo está associado a dois comprimentos característicos: o comprimento de difusão,  $\alpha_L$ , e o comprimento de segregação,  $\alpha_R$ , que representam as penetrações médias dos dopante nas barreiras. Em geral, a densidade bidimensional de dopantes difundidos, tem sua representação dada por uma função exponencial na região das barreiras, e constante, ou quase constante, na região dos poços (78, 77).



FIGURA 2.9 – Perfil da banda de condução de um MQW, considerando a segregação e a difusão de dopantes, dos poços para as barreiras.

#### 2.2.2 Estados eletrônicos em poços quânticos

Um sólido arbitrário pode ser tratado como sendo formado por um grande número de núcleos atômicos,  $N_n$  e de  $N_e$  elétrons de massa  $m_0$ , supondo que sejam núcleos idênticos de massa M e carga Ze, e considerando que o sólido como um todo seja eletricamente neutro, teremos que  $eN_e = N_n Ze$ . A Hamiltoniana deste sistema será formado pelas energia cinéticas dos elétrons e dos núcleos, e pelas interações coulombianas entre elétrons, entre elétrons e núcleos, e entre núcleos, da seguinte forma:

$$H = \frac{1}{2M} \sum_{i=1}^{N_n} (-i\hbar \nabla_{\mathbf{R}_i})^2 + \frac{1}{2m_0} \sum_{j=1}^{N_e} (-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}_j})^2 + \frac{Z^2}{2} \sum_{i,j=1,i\neq j}^{N_n} V_c(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) - Z \sum_{i=1}^{N_n} \sum_{j=i}^{N_e} V_c(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1,i\neq j}^{N_e} V_c(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$$

$$(2.7)$$

onde  $\mathbf{R}_i$  são as posições dos núcleos,  $\mathbf{r}_j$  as posições dos elétrons e  $V_c$  é o potencial coulombiano. Se fosse possível resolver a equação de Schrödinger com o hamiltoniano (2.7), poderíamos, a princípio, prever todas as propriedades do sistema, por exemplo, sua estrutura, incluindo a disposição de todos os núcleos atômicos, seu comportamento termodinâmico e suas propriedades térmicas ou de transporte térmico. No entanto, essa solução completa é claramente impossível. Em um sólido macroscópico, há algo em torno de 10<sup>23</sup> núcleos e, portanto, um número ainda maior de elétrons. Devemos, portanto, resolver uma equação em algo da ordem de 10<sup>23</sup> variáveis, o que é inviável.

Diante da impossibilidade de resolver o sistema exato, lançamos mão de aproximações, embasadas em princípios físicos. A primeira delas é levar em conta a grande diferença entre a massa dos núcleos em relação a massa dos elétrons. Por essa razão, eles terão uma dinâmica bem mais lenta que os elétrons, e sua energia cinética pode ser negligenciada em uma primeira aproximação (Born-Oppenheimer) e o Hamiltoniano pode ser separada em uma parte nuclear e uma parte eletrônica  $H = H_n + H_e$ , e as funções de onda do sistema também passam a ser descritas de modo separável.

Mesmo com essa simplificação o problema de autovalores a ser resolvido continua muito complicado. Na maioria dos casos, podemos descrever o sistema utilizando a aproximação de partícula independente, em que assumimos que o movimento de um único elétron experimenta uma interação média (efetiva) devido a todas as outras partículas. Com esta aproximação, devemos resolver a equação de Schrödinger considerando o potencial médio  $V(\mathbf{r})$  (79). Se o material é cristalino, este potencial será periódico o que permite utilizar o teorema de Bloch (70). Dessa formulação, revela-se uma estrutura de bandas de energia e a separação da função de onda dos elétrons em uma parte de período curto e outra de período longo. Existem vários métodos que buscam calcular essa estrutura de bandas, tanto no que se refere ao posicionamento dessas bandas, quanto à relação entre energia e vetor de onda no interior de dada banda, obtendo maior ou menor coincidência com os resultados experimentais. Para o projeto de dispositivos práticos, é comum o uso de parâmetros semiempíricos para essas bandas. Para a análise da dinâmica de cargas nesses materiais, uma formulação em que as cargas livres em uma banda semiocupada responde a campos adicionais aos do potencial periódico como tendo uma massa efetiva, dada pela dependência do vetor de onda com a energia, é frequentemente usada. Tal aproximação é tão melhor quanto menos acopladas forem as bandas envolvidas. Em um material semicondutor intrínseco, a última banda ocupada é chamada de banda de valência e a imediatamente acima dessa de banda de condução. A aproximação de massa efetiva é particularmente boa para a banda de condução de semicondutores cuja banda proibida entre esta banda e a de valência não é muito estreita. No cálculo da massa efetiva, considera-se que a banda é parabólica, no entanto, nos cálculos computacionais ainda lançaremos mão de uma melhoria na aproximação, que considera uma banda não parabólica, que reflete em uma massa efetiva dependente da energia cinética. Assim sendo, para uma carga livre na aproximação de massa efetiva, a equação de Schrödinger independente do tempo pode então ser escrita como:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + V(\mathbf{r})\right] \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \qquad (2.8)$$

onde a função de onda eletrônica é  $\psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  e os autovalores do elétron no espaço  $\mathbf{k}$  para a n-ésima banda são  $E_n(\mathbf{k})$ . Por exemplo, próximo do fundo da banda de condução, os autovalores de uma superrede podem ser descritos por:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(k_z) + \frac{\hbar^2}{2m_{x,y}^*} (k_x^2 + k_y^2), \qquad (2.9)$$

onde os  $E_n$  são as energias das minibandas unidimensionais, e a  $m^*$  é massa efetiva do elétron. Para o caso simples de um único poço quântico simétrico, podemos resolver a equação analiticamente, mas para estruturas reais não existem soluções analíticas, e as soluções são obtidas numericamente.

Os dispositivos estudados aqui são formados pela repetição de camadas de materiais  $A \in B$  com uma periodicidade na direção de crescimento do cristal. Neste caso precisamos impor condições de contorno nas interfaces, tais que:

$$\psi_n^A(z_{AB}) = \psi_n^B(z_{AB}), \tag{2.10}$$

е

$$\frac{1}{m^{*A}}\frac{d\psi_n^A(z_{AB})}{dz} = \frac{1}{m^{*B}}\frac{d\psi_n^B(z_{AB})}{dz},$$
(2.11)

ou seja, as funções de onda precisam ser contínuas nas interfaces, e o fluxo de probabilidade através das interfaces  $(z_A B)$  precisa ser conservado. O número total de cargas,  $n_e$ , no poço quântico simples é dado por (70):

$$n_e = \int g^{2D}(E) f(E, E_F, T) dE,$$

onde  $g^{2D}(E)$  é a densidade de estados para um poço de n<br/> estados unidimensionais dada por:

$$g^{2D}(E > E_n) = n \frac{m^*}{\pi \hbar^2},$$
 (2.12)

sendo  $E_n$  a energia do n-ésimo estado unidimensional.

A probabilidade de ocupação por estado é dada pela distribuição de Fermi,  $f(E, E_F, T)$ que é descrita como (70):

$$f(E, E_F, T) = \begin{cases} \left( exp(\frac{E_F - E}{k_B T}) + 1 \right)^{-1}, & \text{para} \quad T \neq 0, \\ \theta(E_F - E), & \text{para} \quad T = 0. \end{cases}$$
(2.13)

onde  $\theta$  é a função degrau de Heaviside,  $E_F$  é a energia de Fermi, e  $k_B$  é a constante de Boltzmann. Assim, o número total de cargas dentro de um poço quântico é dado por (51):

$$n_{e} = \begin{cases} \frac{m^{*}k_{B}T}{\pi\hbar^{2}} \sum_{i=1}^{n} ln \left( exp(\frac{E_{F}-E_{i}}{k_{B}T}) + 1 \right), & \text{para} \quad T \neq 0, \\ \frac{m^{*}k_{B}T}{\pi\hbar^{2}} \sum_{i=1}^{n} \theta(E_{F}-E_{i}), & \text{para} \quad T = 0. \end{cases}$$
(2.14)

Todos os cálculos eletrônicos mostrados neste trabalho, foram realizados utilizando o software QWS (80). O QWS é um programa desenvolvido no LEV/IEAv, e permite o ajuste de parâmetros de poços quânticos como espessura, composição e disposição das camadas de material. Este programa emprega a aproximação de massa efetiva (com massa efetiva dependente da energia) e soluciona de modo autoconsistente as equações de Poisson e Schrödinger, usando o Método dos Elementos Finitos.

### 2.2.3 Acoplamento Óptico

No caso dos QWIPs os elétrons confinados em poços quânticos bidimensionais não interagem com fótons cujo vetor de campo elétrico está na direção do plano de crescimento
do poço, porque os elétrons estão confinados na direção do crescimento e a quantização dos níveis de energia está associada somente a essa direção, o que gera tal regra de seleção para a absorção fotônica. Portanto, métodos de acoplamento da radiação são necessários.

Atualmente, existem vários métodos para aumentar o acoplamento do campo elétrico da radiação com os elétrons ligados (23). O mais simples é o acoplamento a 45° em que a luz é acoplada a 45° com o substrato que serve de guia de onda (81). Outro método é fabricar uma grade de difração no topo das camadas do QWIP. Neste caso, usualmente, faz-se a luz incidir normalmente sobre o substrato. O padrão das grades pode ser periódico ou aleatório, e seu tamanho característico deve ser ajustado para o comprimento de onda do pico de detecção (82). A remoção do substrato do detector também melhora a eficiência quântica de cada elemento, uma vez que ajuda a confinar os fótons em um elemento sensor por reflexão interna. Grades de difração também podem ser construídas no lado inferior do detetor após o substrato ser removido, transformando cada detector em um cristal fotônico. Dispositivos que utilizam esses acopladores são conhecidos como QWIPs melhorados ou do inglês *Enhanced-QWIP* (83). As tecnologias de acoplamento eletromagnético em QWIPs estão sempre sendo desenvolvidas e outras tecnologias também são utilizadas, como por exemplo, os QWIPs com paredes inclinadas (corrugated-QWIP) (84), que se aproveita de aspectos geométricos e de reflexão interna total como formas de melhorar este acoplamento.

### 2.3 Corrente de escuro

A corrente de escuro é uma Figura de mérito dos fotodetectores que é entendida como a corrente que flui no dispositivo quando aplicamos uma tensão externa com o dispositivo mantido numa situação de escuro, ou seja, sem incidência de radiação eletromagnética de intensidade relevante, na faixa espectral que o sensibiliza. Os mecanismos de geração dessa corrente se devem a efeitos que podem ou não depender da temperatura. Em QWIPs, pode-se distinguir os mecanismos de geração predominantes a partir das faixas de temperatura que o dispositivo é submetido.

O entendimento do funcionamento da corrente de escuro em QWIPs é crucial para que se possa projetar de maneira ótima os QWIPs, visto que esta corrente de escuro contribui de maneira decisiva para o ruído do QWIP e limita a sua temperatura de operação. Quando o QWIP está a baixas temperaturas, a corrente de escuro é associada ao tunelamento sequencial. Para faixas de temperaturas médias ou altas, a corrente de escuro é atribuída aos efeitos de emissão termiônica, e tunelamento termicamente assistido. A Figura 2.10 mostra um esquema destas diferentes contribuições para corrente de escuro.

a - Emissão Termiônica (a energia térmica excita os elétrons do estado fundamental

diretamente para o contínuo;

- **b** Tunelamento termicamente assistido (elétrons termicamente excitados tunelam pela borda mais estreita da barreira) na presença de um campo elétrico externo;
- **c** Tunelamento sequencial (elétrons na sub-banda fundamental tunelam diretamente entre poços).

Para as temperaturas mais comuns de operação dos fotodetectores, os mecanismos A e B são os mecanismos dominantes sendo fortemente afetados pela diferença de potencial aplicada no detector, temperatura de operação e nível da energia de Fermi da estrutura (85).



FIGURA 2.10 – Mecanismos de corrente de escuro. (a) Emissão termiônica, (b) Tunelamento termicamente assistido, e (c) Tunelamento sequencial. Figura adaptada a partir da referência (86).

### 2.3.1 O Modelo de emissão-captura para corrente de escuro

Este modelo aplica-se a QWIPs operando em temperaturas médias. De acordo com Liu et. al. (87) existem várias aproximações feitas para definir o regime físico para este modelo da corrente de escuro. Das quais se pode citar:

- (a) o tunelamento entre poços é desprezível para o cálculo da corrente de escuro;
- (b) a densidade de elétrons em cada poço permanece constante;
- (c) o emissor, altamente dopado, serve como um contato injetor perfeito (que fornece a corrente estritamente necessária, de modo a manter a neutralidade entre a interface deste contato com a estrutura);
- (d) Uma sub-banda ligada é confinada no poço quântico e a sub-banda imediatamente acima (sub-banda final do ISBT) coincide em energia ou está muito próxima do topo da barreira.

O fato de se projetar QWIPs altamente desacoplados, ou seja com barreiras largas, é suficiente para dar conta da suposição (a), para temperaturas normalmente utilizadas. A suposição (b) não é necessariamente válida a altas tensões, como mostrado experimentalmente por Liu et. al. (88). Simulações com pequenos números de QWIPs (89) mostraram que a suposição (c) é válida apenas para QWIPs com número grande de poços. Um bom argumento para essa suposição pode ser encontrado na discussão do artigo do Levine et. al. (21). A consideração (d) leva em conta um regime que é sabidamente vantajoso para QWIPs práticos, que têm barreiras espessas (por exemplo > 250 A que e opera a temperaturas moderadas). A corrente de escuro é controlada pelo fluxo de elétrons acima da barreira, e pelo processo de emissão e captura de elétrons nos poços. Os modelos de emissão-captura são fortemente baseados na consideração de que o campo elétrico não altera a concentração de cargas dentro do poço de forma considerável. A emissão de elétrons do poço por espalhamento elástico de elétrons termicamente excitados (Figura 2.11) é considerada o processo dominante para os típos de QWIPs mais encontrados (barreiras largas, poço com dopagem tipo n, e primeiro estado excitado próximo ao topo da barreira, como é o caso da amostra estudada neste trabalho), especialmente em baixos campos elétricos (23). Elétrons confinados na sub-banda fundamental do poço são distribuídos numa densidade bidimensional de estados  $(N_{2D})$ , e os elétrons de mais alta energia sofrem espalhamentos sendo ejetados do poço e passando a contribuir para a corrente de cargas com energia acima do topo da barreira, onde há uma densidade tridimensional de estados  $(N_{3D})$ . A Figura 2.11 ilustra os processos e tempos característicos de espalhamento que são considerados.



FIGURA 2.11 – Processos de espalhamento de elétrons (círculos) da sub-banda fundamental, com distribuição  $N_{2D}$ , para os estados no contínuo, com distribuição  $N_{3D}$  e captura de elétrons do contínuo de volta para a sub-banda fundamental. A principal contribuição para fuga por espalhamento são os elétrons com sua energia maior que a altura da barreira. Figura adaptada a partir da referência (23).

A Figura 2.12 mostra os processos que ocorrem para geração da corrente de escuro, a uma temperatura típica de operação, os elétrons estão ligados ao estado fundamental do poço, e também distribuídos fora do poço e no topo das barreiras. As setas indicam o caminho da corrente de escuro. Como já foi destacado, nas regiões do topo das barreiras a corrente encontra uma densidade de estados tridimensional (3D) e a densidade de corrente é rotulada como  $j_{3D}$ . Esta é a corrente de escuro  $j_{dark}$ . Se estivermos considerando que, após o dispositivo alcançar o equilíbrio, a densidade de cargas em dado poço é constante, e, consequentemente, a quantidade de elétrons emitidos e capturados por esse poço são idênticas, ou seja, nas vizinhanças de cada poço, a emissão de elétrons do poço contribui para a corrente de escuro  $(j_{em})$ , e essa corrente tende a diminuir a densidade de elétrons no poço, por consequência, ela deve ser equilibrada pela captura de elétrons no poço  $j_{trap}$ . No estado estacionário temos  $(j_{trap} = j_{em})$ .



FIGURA 2.12 – Representação esquemáticas do processo de controle da corrente de escuro. Em condições de estado estacionário temos que  $j_{trap} = j_{em}$ . Figura adaptada a partir da referência (90).

Considera-se que  $\tau_{scat}$  é o tempo médio de espalhamento de um elétron de um estado da sub-banda ligada para o contínuo (91). Ou seja,  $\tau_{scat}$  é o tempo médio que os elétrons com energia maior que a barreira, nessa sub-banda, levam para serem espalhados para estados do contínuo acima da barreira. Assim, podemos definir a densidade de corrente de emissão como:

$$j_{em} = eN_{2D}/\tau_{scat}.$$
(2.15)

A corrente de emissão  $j_{em}$  constitui apenas parte da corrente de escuro total, e  $N_{2D}$  é a densidade bidimensional de elétrons levando em conta apenas elétrons com energia maior que a barreira, disponíveis para a transição para o contínuo por espalhamento elástico ou quase elástico; e é a carga elementar. A probabilidade de captura de um elétron pelo poço pode ser aproximada como (23):

$$p_c = \frac{\tau_{transit}}{\tau_{transit} + \tau_c},\tag{2.16}$$

onde  $\tau_c$  é o tempo médio de captura de um elétron na região poço (poço mais meia barreira de cada lado), e  $\tau_{transit}$  o tempo médio que um elétron leva para atravessar um período,  $L_P$ , sendo  $L_P = L_W + L_B$ . No caso limite de  $p_c \ll 1$ , isto é  $\tau_c \gg \tau_{transit}$ , o que é válido para dispositivos operando na presença de campos elétricos externos, a corrente de escuro é descrita como:

$$j_{dark} = j_{em}/p_c = e \frac{N_{2D}}{\tau_{scat}} \frac{1}{p_c} = e \frac{N_{2D}}{L_p} \frac{\tau_c}{\tau_{scat}} v_d,$$
(2.17)

visto que a velocidade de deriva do elétron no topo da barreira pode ser definida como  $v_d = L/\tau_{transit}$  (87, 83), sendo L uma escala de comprimento relevante. Vamos definir L como o comprimento de um período da estrutura do MQW, ou seja:  $L = L_p$ . Com este comprimento definido, é possível estabelecer uma relação entre  $N_{2D}$  e  $N_{3D}$  devido ao balanço entre emissão e captura, e podemos escrever:

$$\frac{N_{2D}}{\tau_{scat}} = \frac{N_{3D}L_P}{\tau_c} \tag{2.18}$$

Utilizando as aproximações para  $N_{2D}$  e  $N_{3D}$  dadas por (23):

$$N_{2D} \approx \frac{m_w}{\pi \hbar^2} k_B T exp(-E_{act}/k_B t)$$
(2.19)

е

$$N_{3D} \approx 2(m_b k_B T / 2\pi \hbar^2)^{3/2} exp(-E_{act} / k_B t)$$
(2.20)

obtemos a relação dada por:

$$\frac{\tau_c}{\tau_{scat}} \approx \frac{m_b}{m_W} L_p (\frac{m_b k_B T}{2\pi\hbar^2})^{1/2}$$
(2.21)

sendo  $m_b e m_w$  as massas efetivas dos elétrons nas barreiras e nos poços, respectivamente, e  $E_{act}$  a energia de ativação. O cálculo da densidade de portadores de carga é realizado para campos elétricos baixos o suficiente para que não ocorra variação da quase energia de Fermi na região do poço, o que permite utilizar a expressão  $N = \int g(E)f(E,T)dE$ , sendo g(E) a função de densidade de estados e f(E,T) a função de distribuição de Fermi para dada energia, E, e temperatura, T. Também está sendo considerado que a energia térmica média  $(k_BT)$  é suficientemente menor do que a energia de ativação,  $E_{act}$ , para que se possa aproximar a distribuição de Fermi pela distribuição de Boltzmann (23, 92).

O cálculo da corrente de escuro agora depende da obtenção de uma boa estimativa de  $N_{2D}$ . Até agora, calculamos  $N_{2D}$  sem considerar que os elétrons próximos ao topo da barreira, mas abaixo desta, também podem contribuir para a corrente por meio de tunelamento assistido por espalhamento. Esta contribuição deve ser contabilizada. Para isso vamos utilizar o resultado teórico de Meshkov (23) expresso por Levine da seguinte forma: se incluirmos os processos de espalhamento, a taxa de tunelamento de elétrons em um potencial unidimensional é controlada pela energia total e não pela energia associada à direção de tunelamento. Para barreiras espessas, os processos assistidos por espalhamento determinam a probabilidade de transmissão por tunelamento. Usamos a seguinte expressão, que inclui o processo de tunelamento termicamente assistido pelo campo elétrico, F, nos modelos descritos:

$$N_{2D} = \int_{E_0}^{\infty} \frac{m_W}{\pi \hbar^2} T(E, F) [1 + exp(\frac{E - E_F}{k_B T})]^{-1} dE$$
(2.22)

Então temos para a corrente de escuro a seguinte relação:

$$j_{dark} = ev_d \frac{m_W}{\pi \hbar^2 L_p} \frac{\tau_c}{\tau_{scat}} \int_{E_0}^{\infty} T(E, F) \times \left[ 1 + exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) \right]^{-1} dE$$
(2.23)

sendo  $m_W$  a massa efetiva no poço,  $E_0$  a energia do estado fundamental, E a energia total do elétron, T(E, F) o coeficiente de tunelamento, que é igual a 1 para E acima da barreira e um dado campo elétrico externo F, e  $E_F$  é a energia de Fermi. A soma das cargas capturadas e não capturadas permite escrever que  $j_{3D} = j_{trap} + (1 - p_c)j_{3D} =$  $j_{em} + (1 - p_c)j_{3D}$ . Podemos então, modelar  $j_{dark}$  calculando diretamente  $j_{3D}$  ou  $j_{em}$  (93) ou como utilizado por Liu *et. al.* (87):

O método de aproximação WKB permite escrever uma expressão aproximada para o coeficiente de tunelamento dado por:

$$T(E,F) = exp\left[-2\int_0^{z_c} dz\sqrt{2m_b(V-E-eFz)}/\hbar\right].$$
(2.24)

As energias relevantes, e o ponto clássico de retorno  $z_c$  estão representados na Figura 2.13. Para energias menores que a altura da barreira, E < V, com  $V = V_b - eFL_w/2$ incluíndo o redução da barreira com o campo elétrico, e  $z_c = (V-E)/eF$  definindo os pontos clássicos de retorno. Esta é uma aproximação com resultados bem satisfatórios, mesmo quando comparada a resultados utilizando o métodos de matriz de transferência (25, 23)

#### 2.3.2 Energia de Ativação

A energia de ativação,  $E_{act}$ , pode ser definida como a mínima energia que uma carga no quasi nível de Fermi do poço precisa receber para contribuir com a corrente acima da barreira (37). A campo elétrico nulo, esse valor pode ser calculado para cada temperatura como a diferença entre a energia do topo da barreira e a energia de Fermi do sistema (35):

$$E_{act} = V_b - E_F. \tag{2.25}$$

Também podemos assumir, para a maioria dos casos, que  $E_{act}/k_bT >> 1$ , visto que deseja-se uma corrente de escuro relativamente baixa. De acordo com Schneider et. al. (23), a altas temperaturas, a energia de ativação e a corrente de escuro estão correlacionadas de tal modo que quanto maior a energia de ativação, menor é a corrente de escuro. Do ponto de vista experimental, a energia de ativação é calculada a partir das curvas de corrente de escuro obtidas em diferentes temperaturas, sendo a energia de ativação obtida a partir de um gráfico de Arrhenius para a corrente em dada tensão.

A construção do gráfico de Arrhenius se baseia na consideração de que, a menos de um termo multiplicativo que depende do tipo de modelo de corrente de escuro utilizado, a densidade de corrente tem uma dependência exponencial com a temperatura. O termo multiplicativo poderá depender de uma potência da temperatura,  $T^{\beta}$ , sendo o valor de  $\beta$  dependente do modelo utilizado. Se  $j_{dark} \propto T^{\beta} exp(-E_{act}/k_BT)$ , podemos montar um gráfico com  $ln(j_{dark}/T^{\beta})$  em função de 1/T, e será obtida uma reta, cuja inclinação fornece a energia de ativação dividida pela constante de Boltzmann. Esta metodologia é antiga e aplicada em diversos trabalhos (94, 38, 44, 36). Como já foi discutido, existem vários modelos utilizados para o cálculo da corrente de escuro a temperaturas mais altas, obtidos por diferentes princípios físicos, como por exemplo em (2.26), (2.28), e (2.27) respectivamente apresentados por Levine (95), Kane et. al. (93) e Schneider et. al. (23).

$$j_{Levine} = ev_d k_B T \frac{m_w}{\pi \hbar^2 L_p} exp\left(-\frac{E_{act}}{k_B T}\right)$$
(2.26)

$$j_{Kane} = 2ev_d \left(\frac{m_W k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} exp\left(-\frac{E_{act}}{k_B T}\right)$$
(2.27)

$$j_{SchneiderLiu} = e \frac{m_W}{\pi \hbar^2} \frac{v_d \tau_c}{\tau_{scat}} \frac{k_B T}{L_p} exp\left(-\frac{E_{act}}{k_B T}\right)$$
(2.28)



FIGURA 2.13 – Ilustração das energias relevantes da redução da barreira devido ao campo elétrico. A energia do elétron, E, é referenciada ao centro do poço. Figura adaptada a partir da referência (23).

Os parâmetros utilizados já foram discutidos anteriormente. As equações 2.26 e 2.27 referem-se a modelos de corrente de escuro baseados na deriva de portadores acima da barreira, estes modelos consideram um gás de elétrons (para o caso de dopagem tipo n) acima da barreira com concentração N e que apresenta uma velocidade média dependente do campo elétrico aplicado,  $V_d(F)$ . Para o caso de baixos campos elétricos e considerando uma densidade tridimensional de cargas, dada pela equação 2.20, podemos obter a expressão 2.27. Para a formulação que utiliza uma densidade bidimensional de estados, a densidade tridimensional pode ser obtida dividindo-se a densidade de estados pela largura do poço,  $L_W$ , e esa abordagem resulta em 2.26. Podemos escrever as equações 2.27 e 2.28 da seguinte maneira:

$$j_{dark} = bT^{3/2}exp\left(-\frac{E_{act}}{k_BT},\right),\tag{2.29}$$

onde b refere-se aos termos não dependentes da temperatura. Dessa expressão pode-se obter uma equação para a energia de ativação dada por:

$$ln\left(\frac{j_{dark}}{T^{\alpha}}\right) = ln(b) - \frac{E_{act}}{k_B}\frac{1}{T},$$
(2.30)

onde  $\alpha = 3/2$ , para 2.29, e pode-se obter a energia de ativação pelo ajuste linear da curva 2.30, em que  $j_{dark}$  é o valor experimental da corrente de escuro a dada tensão. Na equação 2.30 vemos que para o caso do modelo de Kane, equação (2.27), e o de Schneider Liu, equação (2.28) temos:  $\alpha = 3/2$ , e para o modelo de Levine equação (2.26),  $\alpha = 1$ . Observem que, inserindo a equação (2.21) na equação (2.28), obtemos a equação (2.27).

Observa-se que a energia de ativação encontrada depende da tensão aplicada. O modelo mais simples para estimar essa variação é conhecido como modelo geométrico e considera a diminuição da diferença de energia entre a borda da barreira de saída do poço quântico e seu centro, pela sobreposição de um potencial linear (campo elétrico constante), como já foi ilustrado na Figura 2.13 (94, 35). Esse efeito reduz a  $E_{act}$  por  $\beta = (L_W/2)F$ , sendo  $L_W$  a largura do poço. Esse efeito mais simples costuma subestimar a redução efetivamente observada na energia de ativação. Uma proposta encontrada na literatura para explicar esse efeito é o modelo de Poole-Frenkel, originalmente proposto para dielétricos (96). Nesse modelo, o elétron emitido deixa no poço uma impureza ionizada fixa (94). Veremos, no entanto, que tal modelo superestima a redução da energia de ativação, o que se justifica pela blindagem exercida nessa carga pelos elétrons livres remanescentes no poço. A contribuição deste efeito, na alteração do potencial é mostrada na Figura 2.14, Z = 0 nessa Figura corresponde ao centro do poço (96, 94).



FIGURA 2.14 – Perfil da banda de condução nas vizinhanças das bordas do poço quântico: A curva pontilhada, mostra o efeito geométrico no perfil da banda, e a curva sólida, mostra o efeito da combinação do efeito geométrico e do efeito Poole-Frenckel, o potencial, o perfil para F = 0 também é mostrado. Figura adaptada a partir da referência (94).

#### 2.3.3 Correntes de escuro a baixas temperaturas

O transporte eletrônico a baixas temperaturas, nos QWIPs, é normalmente descrito por um esquema de tunelamento sequencial (22). As medidas de corrente de escuro usualmente apresentam uma faixa de temperatura na qual a corrente praticamente não varia, sendo que, nessa faixa, as I-Vs podem apresentar uma região de platô, em que a corrente é independente da tensão aplicada. Este comportamento pode ser observado na Figura 2.15, para temperaturas entre 4 e 20 K, onde as curvas I-Vs apresentam um platô de corrente no qual a variação na tensão não gera um aumento apreciável na corrente de escuro.



FIGURA 2.15 – Exemplo de densidade d corrente de escuro, I-Vs, típicas para QWIPs de GaAs/AlGaAs a baixas temperaturas. Figura adaptada a partir da referência (97).

No tunelamento sequencial, os portadores de carga tunelam entre poços adjacentes e termalizam no último poço, antes que possam tunelar novamente. Isso se deve ao tempo médio de relaxamento intrassub-banda ser muito menor que o de tunelamento entre poços. A princípio, o tunelamento só seria possível quando as sub-bandas em poços adjacentes se alinhassem, uma condição somente possível para alguns campos elétricos externos, no caso geral de MQW (18). Em QWIPs, é comum que os poços tenham apenas um estado ligado, de forma tal que a ressonância só ocorreria para tensão nula, mesmo assim, supondo que a estrutura seja uniforme. No entanto, na presença de fônons e do espelhamento por impurezas dentro de cada poço, é possível que ocorra tunelamento, apesar de ser mais provável para pequenos desalinhamentos (35). Portanto, a tensões baixas, esperase que ocorra condução através do tunelamento entre sub-bandas fundamentais de cada poço. O processo é esquematicamente representado na Figura 2.16 (b) para uma estrutura MQW com dois estados ligados. Para tensões mais altas, a probabilidade de tunelamento entre sub-bandas fundamentais se reduz fortemente, o que pode resultar numa resistência diferencial negativa (35).



FIGURA 2.16 – Perfil de banda de um MQW para diferentes valores de potencial aplicado: (a) tensão nula; (b) tunelamento sequencial quase ressonante, com flechas indicando a direção de condução; (c) Formação do domínio de campo alto; (d) expansão do domínio de campo elétrico alto, através da inclusão de mais poços devido ao aumento da tensão. Figura adaptada a partir da referência (35).

Em estruturas MQW, que possuem mais de um estado ligado e barreiras não tão largas quanto as dos QWIPs (porém largas), é comum observar-se a formação de um domínio de campo alto adjacente ao coletor do dispositivo, Figura 2.16, que se expande até o emissor à medida que a tensão aumenta, Figura 2.16. Nesse processo, a corrente pouco se altera, visto que é controlada pelo domínio de campo baixo, gerando um platô na curva I-V (24, 14).

Em muitos casos, o processo de expansão do domínio de campo alto gera picos periódicos de condutância negativa nas curva I-V, como mostrado na Figura 2.17, sendo também observados picos similares em curvas de capacitância versus tensão, C-Vs (29).



FIGURA 2.17 – Medida I-V de uma superrrede de GaAs/AlGaAs fracamente acopladas, com uma inserção mostrando uma amplificação da medida I-V e C-V a 100 kHz, entre 3,1 e 3,8 V, mostrando que os picos na capacitância antecedem uma queda brusca na corrente (NDC). Todas as medições foram feitas no escuro a 77 K.Figura adaptada a partir da referência (30).

# **3** Procedimentos Experimentais

Neste capítulo são apresentados a estrutura da amostra utilizada, os procedimentos experimentais de caracterização e uma descrição detalhada do aparato experimental. As técnicas experimentais utilizadas neste trabalho tem seu foco na caracterização elétrica, tendo sido utilizadas técnicas de medição de corrente de escuro, I-V, e medição de capacitância, C-V, ambas realizadas a temperaturas criogênicas.

### 3.1 A amostra utilizada

A amostra utilizada corresponde a um QWIP de estrutura uniforme com transições ocorrendo da sub-banda fundamental para uma sub-banda fracamente ligada, localizada próxima à borda do poço, quase no contínuo. Essa configuração, segundo a literatura (35), fornece a melhor relação entre a eficiência quântica externa e a corrente de escuro. A amostra foi projetada, crescida e processada em uma parceria entre IEAV (LCDS e LEV) e IFUSP (LNMS) no decorrer das atividades do INCT-DISSE (http://inct.cnpq.br/web/inct-disse), tendo sido buscado um pico de absorção em 9.3  $\mu m$ A amostra também foi projetada de modo a minimizar a transferência de cargas entre as camadas de contato e a estrutura de poços múltiplos, evitando, assim, a formação de campos elétricos internos. Na tabela 3.1 estão resumidos os dados de projeto da amostra.

A amostra foi crescida por MBE utilizando o sistema Mod. Gen. II, disponível no LNMS/IFUSP, sobre um substrato de GaAs (100). A região ativa consiste de 50 poços quânticos de largura igual a 5,65 nm, dopados com silício a  $1, 0 \times 10^{18} \, cm^{-3}$  e separados por barreiras largas de  $Al_{0,2}Ga_{0,8}As$  com 30 nm de espessura. A estrutura está entre duas camadas de contato de GaAs de 1  $\mu m$  dopadas com silício a  $1, 4 \times 10^{18} \, cm^{-3}$ . A amostra foi processada pelos métodos padrões de definição de mesas e de posição de contatos elétricos, com corrosão líquida. Cada dispositivo tem uma geometria quadrada de 400 × 400  $\mu m^2$  de área. Os contatos elétricos de Ni/Ge/Au foram depositados utilizando evaporação por feixe eletrônico, e a amostra passou por tratamento térmico a 520 °C durante 30 s, com o intuito de se obter um melhor contato ôhmico. A descrição detalhada do crescimento e processamento da amostra é descrito por Fernandes *et. al.* (27, 98). A Figura 3.1 (a)

TABELA 3.1 – Parâmetros de projeto da amostra que foram utilizados para o cresci
mento por MBE. Estes parâmetros foram obtidos a partir da parceria entre LCDS/IEA
e LEV/IEAv, tendo sido utilizada a ferramenta computacional QWS.

Pico de absorção	$9,3 \ \mu m$
Composição do substrato	GaAs
Espessura do substrato	$450 \ \mu m$
Composição da camada de contato	GaAs
Dopagem da camada de contato	n, 1, 4 × 10 <sup>18</sup> $cm^{-3}$
Espessura da camada de contato superior e inferior	1,0 $\mu m$
Composição das barreiras	$Al_{0,2}Ga_{0,8}As$
Espessura das barreiras	30 nm
Número de barreiras	51
Composição dos poços	GaAs
Dopagem dos poços	n, $1 \times 10^{18} \ cm^{-3}$
Espessura dos poços	5,65 nm
Número de poços	50
Área da amostra	$400 \times 400 \ \mu m^2$

apresenta uma ilustração das camadas da região ativa, e a Figura 3.1 (b) mostra o cálculo de um poço quântico da amostra, com os níveis de energia projetados.



FIGURA 3.1 – (a) Representação da amostra estudada. (b) Níveis de energia calculados nos poços quânticos.

### 3.2 Ferramenta computacional

O QWS é um programa de computador desenvolvido no próprio IEAv (99, 80). O QWS é utilizado para o auxílio ao projeto e à análise de dispositivos semicondutores nanoestruturados, permitindo o cálculo computacional de estruturas tipo poços quânticos ou pontos quânticos. Este programa emprega a aproximação de massa efetiva (com massa efetiva dependente da energia) e resolve de maneira autoconsistente as equações de Poisson

e Schrödinger usando o Método dos Elementos Finitos. Anteriormente a este trabalho, o QWS foi utilizado no projeto desta amostra, e aqui foi utilizado durante as análises das medidas I-V e C-V.

De	evice Layer List							Sub-bands
	Layer Material	Size (Å)	Electron Band (eV)	Doping Conc. (cm-3)	Dopant Bind. Energy (eV)	Effective Mass		Electron Heavy hole
1	I Al <sub>0.22</sub> Ga <sub>0.78</sub> As	300	0.206748	0	0	0.084		Light hole Split off
2	GaAs	5	0	0	0	0.066		Electron hon-parabolic effective mass
3	3 GaAs	40	0	1.11e+18	0.004	0.066		Operation Parameters
4	GaAs	5	0	0	0	0.066	•	Electric field 0 V
5	5 Al <sub>0.22</sub> Ga <sub>0.79</sub> As	300	0.206748	0	0	0.084		T
	Report	Laword	Delete	Lawor	Now Lawer	<u> </u>		Periodic Structure
St	Repeat	Layers	Delete	Layer	New Layer			Periodic Structure Number of periods 1
- St	Repeat	Layers Energy V .31834e-0	Delete	Layer	New Layer	) 	<u> </u>	Periodic Structure Number of periods 1 Solver C Hamitonian expansion C Finite element C Element-Free Galeri
-St	Repeat tructure Draw lessages Fundamental Precision = 2 Continue? Selfconsisten	Layers Energy V 31834e-0 t iteration	 	Layer	New Layer		<u> </u>	Periodic Structure Number of periods  Solver  C Hamitonian expansion  Finite element C Element-Free Galen  Enite Element Options
- St	Repeat tructure Draw Fundamental Precision = 2 Continue? Selfconsisten Selfconsisten	Layers Energy V .31834e-0 t iteration t iteration	 	Layer	New Layer		*	Periodic Structure Number of periods 1 Solver C Hamikonian expansion Finite element C Element-Free Galeri Element-Free Galerian Options Element-Free Galerian Options
-St	Repeat tructure Draw Eessages Fundamental Perceision = 2 Continue? Selfconsisten Selfconsisten Selfconsisten	Layers Energy V .31834e-0 t iteration t iteration t iteration	 	Layer	New Layer		•	Periodic Structure Number of periods 1 Solver C Hamiltonian expansion G Finite element C Element-Free Galeria Element-Free Galerian Options Element-Free Galerian Options Solver Options
M	Repeat tructure Draw Fundamental Precision = 2 Continue? Selfconsisten Selfconsisten Selfconsisten	Layers	Delete alue = 0.072 6. no. 50 fini no. 51 fini no. 52 fini Electron	Layer	New Layer		*	Solver     C     Hamiltonian expansion       © Finite element     C     Element-Free Galeria       Element-Free Galeria     Element-Free Galeria       Element-Free Galeria     Solver

FIGURA 3.2 – Interface principal do programa QWS.

O QWS, cuja interface principal pode ser observada na Figura 3.2, permite a configuração de parâmetros de poços e barreiras como: espessura, composição, e ordenação das camadas que formam a estrutura, e obtém as massas efetivas, largura de banda proibida e alinhamento das bandas para cada camada, a partir de bibliotecas internas ou parâmetros fornecidos pelo usuário. Construído o potencial, os autoestados unidimensionais são calculados, com e sem aplicação de diferença de potencial, considerando ou não as cargas livres, de forma autoconsistente. Também permite o cálculo de propriedades como absorbância, força de oscilador, fotocorrente e corrente de escuro, a partir de modelos que consideram que o campo elétrico é uniforme em toda a estrutura de multipoços (87).

### 3.3 Aparato de medidas elétricas

Para controlar a temperatura e estabelecer contatos elétricos em amostras não encapsuladas (sem fios soldados), utilizou-se uma estação de sondas criogênica, fabricada pela Janis, modelo CCR10 (100), figura 3.3, que opera refrigerada por ciclos de compressão e rarefação de hélio (circuito fechado), especificada para controle da amostra entre 10 K a 325 K. O equipamento tem sensores de temperatura no porta-amostras, no escudo de radiação e nos dois estágios do refrigerador. Os sensores de temperatura são sensores padrão de diodos de Si (modelo DT-670-CU) (101), que têm precisão especificada como:  $\pm 0,004$  K a 4 K,  $\pm 0,085$  K a 80 K e  $\pm 0,07$  K a 270 K. A Figura 3.4 indica a posição em que a amostra é posicionada, e onde se localiza o sensor mais próximo da amostra, separados por um suporte metálico. A estação de sondas tem 6 braços articulados (x-y-z) com conectores triaxiais. As pontas de prova usadas são feitas de tungstênio e banhadas a ouro, para melhorar a resistência de contato. A amostra é fixada dentro de uma câmara de vácuo e as medidas são realizadas a pressões inferiores a  $2 \times 10^{-6}$  Torr, de modo a garantir um bom isolamento térmico com o exterior.



FIGURA 3.3 – Estação de sondas CCR 10 da Janis, a ampliação mostra a câmara de vácuo onde a amostra é posicionada.

Para as medições elétricas, um analisador de dispositivos semicondutores (Agilent B1500) foi utilizado. Este analisador possui um dispositivo chamado SMU (Source Measure Unit), que é uma unidade de alimentação e medição para testes que requerem alta precisão, alta resolução e configurações flexíveis. Cada SMU pode fornecer tensão ou corrente e, ao mesmo tempo, medir tensão e/ou corrente, tendo capacidade de realizar medições I-V na faixa de 0,1 fA a 1 A, numa faixa de 0,5  $\mu V$  a 200 V, com a possibilidade de realizar medições nos modos fixo, de varredura, amostragem e pulsado.

As medições de varredura C-V foram realizadas com uma Unidade de Medição de Capacitância de Múltiplas Frequências (MFCMU), que permite aplicar um sinal modulante de amplitude e frequência escolhidas e executar uma varredura de uma tensão contínua, medindo a impedância. Da impedância obtém-se a capacitância do dispositivo a partir de um modelo escolhido e de uma calibração previamente realizada. O equipamento permite medição de capacitâncias em frequências de 1 kHz a 5 MHz com resolução mínima de 1 mHz. Durante as medições, também foi utilizada uma unidade comutadora SMU/CMU (SCUU) para comutar entre as medições I-V/C-V, sem a necessidade de trocar cabos ou



FIGURA 3.4 – Ilustração da visão em corte lateral da estação de sondas, mostrando duas sondas posicionadas próximas da amostras e os sensores para determinação da temperatura na amostra. Figura adaptada a partir da referência (102).

a configuração de contato que poderiam prejudicar a confiabilidade das medidas, além de aumentar significativamente o tempo de execução, figura 3.5.



FIGURA 3.5 – Diagrama elétrico da unidade SCUU exemplificando os contatos elétricos que permitem alternar entre medidas I-V e C-V. Figura adaptada a partir da referência (100)

## 3.4 Medição da Corrente elétrica, I-Vs

A estação de sondas, permite realizar medidas elétricas utilizado-se de sondas metálicas (agulhas) para fazer o contato elétrico com a parte metalizada da amostra. A resistência de contato entre agulha e filme metálico é dependente da pressão aplicada, além da limpeza da superfície da amostra e das pontas das sondas. É possível que contatos elétricos não adequados alterem os resultados de forma significativa, mesmo para medidas a quatro pontas (102). A estação de sondas possui um controle mecânico das agulhas cujo ajuste é manual. Por isso, para realizar um bom contato elétrico é necessário que o operador tenha um bom domínio do equipamento, de forma que consiga realizar os contatos elétricos

necessários sem danificar a amostra. Um teste de reprodutibilidade das medições deve ser realizado de modo a garantir a qualidade das medidas. Um procedimento de teste foi estabelecido para o início das medições, em que posiciona-sw as sondas realiza-se medições, desfaz-se os contatos e repeti-se o procedimento, a avaliação dos resultados. Assim é possível avaliar a pressão necessária a um contato elétrico reprodutível.

### 3.5 Energia de Ativação

Dois processos distintos são realizados, o primeiro diz respeito a obtenção da  $E_a$  a 0,0 Volts, que é também é obtida através do gráfico de Arrhenius, no entanto, não podemos utilizar a densidade de corrente de escuro, como anteriormente. Visto que, a esta tensão,  $j_{dark}$  é zero, utiliza-se sua derivada em torno de 0,0 V. Para cada curva I-V, a dada temperatura, um ajuste linear em torno de 0,0 V é realizado, escolhendo-se uma faixa suficientemente pequena para que a curva I-V seja linear. De posse da condutância, o cálculo da energia de ativação é idêntico ao feito para as tensão diferentes de zero, apenas substituindo a corrente pela condutância.

A Figura 3.6 ilustra a obtenção da curva de condutância (a), e o gráfico de Arrhenius (b) para alguns dispositivos, de duas amostras diferentes, de modo a exemplificar o procedimento realizado. A curva j-V representa a densidade de corrente (corrente de escuro dividida pela área da amostra) em função da tensão aplicada.

## 3.6 Medição de Capacitâncias, C-Vs

Para realização das medições de capacitância, C-V, é necessário atentar para todos os cuidados destacados na seção (3.4), e além desses cuidados é preciso seguir uma rotina de calibração do equipamento, baseada no método de compensação de fase que reduz os efeitos devido aos cabos e a estação de sondas, e também é realizada uma calibração com o circuito em aberto, para compensar a impedância do circuito de medição. A medição é realizada, aplicando uma tensão DC, no dispositivo, com uma tensão AC sobreposta. A frequência do sinal AC pode ser escolhida em uma faixa permitida pelo equipamento e sua amplitude deve ser pequena, de forma a representar apenas uma leve perturbação na tensão contínua. Como mostrado na Figura 3.4, durante a medição a amostra permanece dentro da estação de sonda com uma temperatura controlada.

Um componente passivo qualquer possui uma impedância a dada frequência da tensão AC aplicada, que pode ser obtida com um circuito equivalente como o mostrado na Figura 3.7, onde C é um elemento capacitor,  $R_S$  e L representam respectivamente uma resistência e uma indutância em série e  $R_P$  é uma resistência em paralelo ao capacitor.



FIGURA 3.6 - (a) Ajuste linear da curva j-V para determinação da condutância próximo de 0,0 V. (b) Exemplo de um gráfico de Arrhenius, mostrando a condutância versus temperatura para QWIPs de duas amostras distintas. Figura adaptada a partir da referência (102).



FIGURA 3.7 – Circuito equivalente de medida de um capacitor. Adaptado de (103).

A impedância deste circuito é dada pela equação abaixo:

$$Z = R_S + \frac{R_P}{1 + \omega^2 R_P^2 C^2} + j \frac{\omega L - \omega R_P^2 C + \omega^3 R_P^2 L C^2}{1 + \omega^2 R_P^2 C^2}$$
(3.1)

O equipamento mede a parte real e a imaginária da impedância, gerando portanto, dois valores. Como o número de variáveis é quatro, fica impossível determinar todas as variáveis com apenas uma medida em uma frequência. Em muitos casos, no entanto, é possível simplificar o circuito equivalente, tornando possível determinar os parâmetros em uma medida de frequência única. A primeira delas é que, para dispositivos de terminais curtos, a impedância indutiva é normalmente desprezível para frequências baixas. Assim, o circuito reduz-se a três variáveis, uma impedância série e uma paralela ao capacitor. O equipamento permite escolher entre o modo série,  $C_S$ , ou no modo paralelo,  $C_P$ , supondo que uma das componentes pode ser despresada, para a análise de dado dispositivo (103, 104). Por exemplo, para o caso do QWIP a ser medido aqui neste trabalho, a corrente é limitada pela região das barreiras, sendo a resistência em série pouco significativa, a baixas temperaturas. Assim sendo, o modo de medição que considera o dispositivo como sendo um capacitor com um resistor em paralelo é mais adequado e foi o utilizado neste trabalho. Nesse modelo a impedância medida é dada por (103):

$$Z = \frac{R_p - j\omega R_p^2 C}{1 + \omega^2 R_p^2 C^2},$$
(3.2)

# 3.7 Procedimento experimental da análise das medidas I-Vs de QWIPs a baixas temperaturas

Para realizar as medições das I-Vs e C-Vs dos dispositivos analisados neste estudo, utilizou-se um analisador de parâmetros de semicondutores, fabricado pela Agilent, modelo B1500A com módulo SCUU (modelo N1301A) que permite a realização destas medidas de modo consecutivo, sem necessidade de mudanças nas conexões elétricas, o que, além dar maior rapidez ao processo de medida, reduz as chances de erros. Todas as medições c-v dos dispositivos foram realizadas à temperatura de 10 K, com estabilidade de 0,05 K. A faixa de tensão utilizada foi de -5 a +5 V (subida e descida) com passo de 100 mV. Para as medições C-V, uma tensão de modulação ac de 30 mV de pico-a-pico (que corresponde a uma tensão por período muito menor que qualquer uma das energia características do sistema em eV) foi utilizada, e todos os dispositivos foram medidos nas frequências de 1 kHz, 10 kHz, 100 kHz e 1 MHz. É necessário refazer as calibrações do analisador de parâmetros a cada variação de 1 °C na temperatura da sala ou após 30 min. consecutivos de medições, o que foi feito. Todas as curvas I-V ou C-V apresentadas aqui são a média de seis medições sequenciais (três na subida e três na descida do intervalo de tensão). A rotina estabelecida aqui, para cada dispositivo, foi medir a curva I-V e, na sequência, a curva C-V. O valor da capacitância foi obtida no analisador de parâmetros, por meio da medida de impedância e determinação da capacitância através da equação 3.1.

Quando se mede duas impedâncias em paralelo, a resultante é mais sensível à menor delas. Sendo assim, um resistor de baixo valor, em paralelo com um capacitor, poderá aumentar significativamente a incerteza na determinação do valor da capacitância, em especial, a baixas frequências, quando a reatância capacitiva é maior. Como a resistência dos dispositivos medidos varia fortemente com a tensão aplicada, é necessário avaliar como essa resistência está afetando a determinação da capacitância em nosso aparato. Para isso, medições utilizando montagens de capacitores com resistores em paralelo, para uma faixa ampla de valores de resistores, foram realizadas. Tais medições tiveram por objetivo, dirimir dúvidas sobre a precisão das medidas de capacitância em uma faixa ampla de tensão aplicada a dispositivos que possuem I-Vs fortemente não lineares.

A representação em um *box-plot* dos resultados das medições com um circuito RC em paralelo, posicionado dentro de uma caixa de teste de circuitos, é mostrado na Figura 3.8. Para essas medidas, um capacitor SMD de capacitância igual a 4,7 pF e tolerância de  $\pm 0.5\%$  e resistores de 270 k $\Omega$ , 180 k $\Omega$  100 k $\Omega$ , 12 k $\Omega$  ou 1,2 k $\Omega$ , com tolerância de  $\pm 5\%$ foram utilizados. Essas medições foram realizadas com o objetivo de avaliar a faixa de valores de resistência que permitem obter a capacitância com uma incerteza razoável. Essas medições foram realizadas, à temperatura de 300 K, verificando que os valores medidos estavam de acordo com o valor esperado para o capacitor de 4,7 pF utilizado, à exceção da medida com o menor resistor, na menor frequência.

Na Figura 3.9, são apresentados os resultados da sequência de medições C-V realizadas utilizando um circuito RC, formado por um capacitor SMD cerâmico de 100 pF com tolerância de  $\pm 0.5\%$ , em paralelo com um resistor. Foi utilizada a representação por meio de um gráfico de *box-plot* para as medidas nas quatro frequências de modulação utilizadas. Os valores apresentados correspondem à média sobre toda a faixa de tensão e a barra de erro corresponde aos valores extremos. Foram realizadas medições com resistores dos seguintes valores: 33 M $\Omega$ , 22 M $\Omega$ , 8,2 M $\Omega$ , 4,7 M $\Omega$ , 1,2 M $\Omega$ , 680 k $\Omega$ , 330 k $\Omega$ , 270 k $\Omega$ 



FIGURA 3.8 – Representação em *box-plot* do valor médio da capacitância, medida sobre a faixa de tensão de -5 V a 5 V, de um circuito RC em paralelo, constituído por um capacitor SMD de 4,7 pF, e resistores de: 270 K $\Omega$ , 180 K $\Omega$ , 100 K $\Omega$ , 12 K $\Omega$  ou 1,2 k $\Omega$ . O circuito foi inserido em uma caixa de teste de circuitos, à temperatura ambiente ( 300 K). As medições foram realizadas nas frequências de modulação de (a) 1 kHz, (b) 10 kHz, (c) 100 kHz e (d) 1 MHz.

, 120 k $\Omega$ , 12 k $\Omega$ , 1 k $\Omega$  e 560 $\Omega$  todos com tolerância de 5%, na faixa de tensão de -5 V a +5 V (subida e descida) com passo de 10 mV. A tensão de modulação foi ajustada para uma amplitude pico-a-pico de 30 mV e as medições foram realizadas para as frequências de 1 kHz, 10 kHz, 100 kHz, e 1 MHz. As curvas C-V utilizadas para a análise correspondem à média de seis medidas C-V (três na subida e três na descida do intervalo de tensão). Observa-se que os circuitos RC com resistores menores apresentaram uma maior variação do valor medido, sendo ainda essa variação ainda mais acentuada para frequências mais baixas, de acordo com o esperado. Observa-se que, para a frequência mais baixa, o desvio do valor esperado torna-se significativo para valores iguais ou menores a 12 k $\Omega$ .



FIGURA 3.9 – Representação em *box-plot* dos dados na polarização positiva e negativa, das medições, a 10 K, da capacitância de um circuito RC em paralelo, capacitor SMD de 100 pF, e resistores de 33 MΩ, 22 MΩ, 8,2 MΩ, 4,7 MΩ, 1,2 MΩ, 680 KΩ, 330 KΩ, 270 KΩ, 120 KΩ, 12 kΩ, 1 KΩ e 560 Ω. Medições realizadas nas frequências de modulação de (a) 1 kHz, (b) 10 kHz, (c) 100 kHz e (d) 1 MHz, com circuito dentro da estação de sondas.

E possível observar em todos os *box-plot* apresentados que os valores obtidos de capacitância são independentes da tensão aplicada para a maioria dos circuitos RC, como era esperado, e que os valores medidos para a capacitância estão um pouco acima do valor nominal do capacitor de 100 pF, mas os resultados para as diferentes frequências são bem próximos entre si para praticamente todo os circuitos RCs. Para medições com resistores em paralelo de resistência acima de 12 k $\Omega$  não se espera, portanto, que ocorra algum erro de medida apreciável devido à faixa de valores de capacitância e resistência da amostra, para as faixas de tensão e frequência utilizadas nesta tese. Todas medidas discutidas nesta seção são somente complementares aos cuidados inerentes as medições elétricas, tanto de corrente de escuro, como de capacitância.

# 3.8 Procedimento experimental das I-Vs de QWIPs a Temperaturas Médias e Altas

As medições elétricas foram realizadas com a amostra no escuro, fixada em um estação de sondas (CCR10 Janis) e utilizando um analisador de parâmetros B1500A, em uma faixa de tensão de -4,0 V até +4,0 V, com um passo de 10 mV, no modo pulsado, com período de 610 ms e largura de pulso de 10 ms. A resolução do equipamento no modo pulsado de medida fica limitada à faixa de tensão total que a medida é realizada (o modo automático fica indisponível) e uma resolução de 10 a 100 nA é esperada para esta faixa de tensão (105). As medidas foram realizadas no modo pulsado com o intuito de evitar problemas de aquecimento dos dispositivos por efeito Joule. Também foi utilizada a técnica de 4 pontas, para melhorar a exatidão das medidas a temperaturas mais altas (60 a 120 K), nas quais a queda de potencial na interface entre a ponta da sonda e o filme metálico do dispositivo tornou-se não desprezível. Ambos os procedimentos se devem às baixas resistividades obtidas nas temperaturas mais altas. As medições foram feitas com intervalos de temperatura de 10 K. Das curvas I-Vs a várias temperaturas, foram obtidas energias de ativação aparente para várias tensões aplicadas.

E importante notar que a borda da amostra, onde se espera maior quantidade de defeitos do substrato, fica no lado esquerdo (Figura 5.4), e por este motivo concentramos as medidas nos dispositivos fora dessa região. Inicialmente foi realizado um estudo para avaliar a reprodutibilidade das medidas I-Vs, e qualidade dos dispositivos medidos.

# 4 Análise das Medidas I-Vs de QWIPs a Baixas Temperaturas

Neste capítulo discutiremos os resultados das análises de medidas I-V e C-V, no regime de baixas temperaturas, de dispositivos QWIP fabricados simultaneamente sobre o mesmo substrato, ou seja, mesmo crescimento epitaxial. Baixas temperaturas, aqui, referem-se ao regime em que o mecanismo dominante para geração de corrente de escuro é o tunelamento sequencial. Neste estudo, utilizamos medidas C-V para identificar a origem das diferenças nas medidas I-V desses dispositivos, que seriam, a princípio, iguais. Uma alta variação entre as I-Vs medidas a 10 K desses dispositivos distintos foi observada, e medidas de C-V foram utilizadas para identificar a origem dessas variações.

### 4.1 Resultados e discussão

Na Figura 4.1 está ilustrado o gráfico das curvas I-V de três QWIPs que têm as mesmas dimensões e foram fabricados no mesmo substrato, simultaneamente, ou seja, mesmo processamento. As curvas I-Vs são apresentadas tanto na escala linear (lado direito), quanto na escala logarítmica (lado esquerdo), para possibilitar uma melhor observação do comportamento da corrente de escuro, tanto para altas quanto para baixas correntes. Os QWIPs foram nomeados como A (linha sólida preta), B (linha vermelha tracejada) e C (linha verde tracejada e pontilhada).

As curvas I-Vs têm um comportamento qualitativo semelhante, incluindo uma assimetria em função da tensão aplicada. A baixas tensões, as curvas apresentam grande coincidência, mas diferem significativamente a tensões maiores. É possível observar que todas as curvas apresentam uma transição de um regime de baixa condutância para um regime de alta condutância, no entanto, a tensão em que isso ocorre é diferente nos três dispositivos. Na escala linear, não se observa platôs em nenhuma das curvas I-Vs. Apesar de não apresentar nenhum platô nas I-Vs, ainda é possível haver acúmulo de cargas dentro da estrutura de poços múltiplos. Esse acúmulo pode se dar de várias formas, o que pode resultar em domínios de campo elétrico bem definidos, campo elétrico variando



continuamente, ou alguma combinação de ambos.

FIGURA 4.1 – Curvas I-Vs, no escuro e a 10 K, de três dispositivos nomeado: Dispositivo A (linha solida preta), dispositivo B (linha vermelha tracejada) e dispositivo C (linha verde tracejada e pontilhada). As mesmas curvas são apresentadas tanto na escala linear (direita) quanto na logarítmica (esquerda), ambas indicadas por setas.

Na Figura 4.2, está representado o comportamento da resistência diferencial para os três dispositivos que foram medidos, essa curva foi obtida a partir da relação  $R = \frac{dV}{dI}$ , sendo I(V) os dados medidos de corrente de escuro e serve para estimar os valores de resistência diferencial para os dispositivos A, B e C. Vemos que a 10 K, para as maiores tensões, o menor valor de resistência diferencial está acima de 20 k $\Omega$ , que está acima dos 12  $k\Omega$ , abaixo do qual as medidas de capacitância dos *SMD* passaram a indicar um erro considerável nas medidas, conforme foi observado pela indicação das medidas apresentadas na Figura 3.9. Isso indica que o aparato experimental deve medir corretamente valor de capacitância para estes dispositivos.

Na Figura 4.3, é apresentado o resultado das medições C-Vs dos dispositivos. São mostradas as médias de três medidas C-V realizadas nos três dispositivos a 1 kHz (a), 10 kHz (b), 100 kHz (c) e 1 MHz (d). Para o caso de um campo elétrico uniforme, o que se espera é que cargas se acumulem somente nas regiões adjacentes às barreiras externas da estrutura de multipoços. Neste caso, o valor da capacitância esperada é a geométrica. Para o cálculo da capacitância geométrica, não basta apenas considerar as constantes dielétricas dos materiais constituintes da estrutura de poços quânticos múltiplos, visto que os poços são fortemente dopados e essa carga livre gerará uma polarização adicional, que irá reduzir o campo elétrico nos poços da estrutura, assim uma correção que leve este efeito em consideração precisa realizada.

Para calcular o efeito dos elétrons livres dentro dos poços da estrutura no campo elétrico nessa região, foi utilizado o programa QWS (realizando um cálculo auto-consistente),



FIGURA 4.2 – Curvas de resistência diferencial obtida das medidas das curvas I-Vs. Dispositivo A (linha sólida preta), dispositivo B (linha vermelha tracejada) e dispositivo C (linha verde tracejada e pontilhada).



FIGURA 4.3 – Medidas C-V dos dispositivos A, B e C a 10 K, usando modulação nas frequências de 1 kHz (a), 10 kHz (b) 100 kHz (c) e 1 MHz (d). A capacitância geométrica é representada por uma linha azul pontilhada. Em (a), além da curva C-V, foi adicionada a curva I-V dos três dispositivos para comparação.

que permitiu determinar a razão entre o campo elétrico esperado na barreira  $(F_B)$  e o campo elétrico médio nos poços  $(F_W)$  a 10 K, para dada queda de potencial por período. Encontrou-se uma relação quase constante para toda a faixa de tensão, sendo o resultado  $F_W = 0.945F_B$ . Como o potencial externo, V, no dispositivo pode ser descrito pela soma das quedas de potencial em todo dispositivo, ou seja:  $V = F_B L_B \times 51 + F_W L_W \times 50$ , para uma distribuição uniforme, e usando a relação para os campos elétricos obtidas por meio do QWS, podemos reescrever esta equação como:  $V = (51L_B + 0, 945 \times 50L_W)F_B$ . Usando a lei de Gauss temos que:  $Q = \epsilon_1 A F_B$ , e portanto,  $C_g$ , foi calculada para o dispositivo por meio da expressão:

$$C_g = \frac{\epsilon_1 A}{(51L_B + 0.945 \times 50L_W)},$$
(4.1)

sendo A a área total da mesa;  $\epsilon_1$  a constante dielétrica do  $Al_{0,2}Ga_{0,8}As$  a baixa frequência, dada por  $\epsilon_1/\epsilon_0 = 13, 18 - 3, 12x$  (68), que, para x = 0, 2, nos dá  $\epsilon_1 = 12, 56\epsilon_0$ ; e  $L_B$ , e  $L_W$  são as espessuras da barreira e do poço respectivamente. O valor da capacitância geométrica calculada utilizando estas considerações é de  $C_g = 9, 9 \ pF$ . Para configurações em que não ocorra acúmulo de cargas dentro da estrutura o que se espera é que o valor medido esteja próximo deste valor, para toda a faixa de tensão utilizada.

O valor da capacitância geométrica também está representado na Figura 4.3 como uma linha azul tracejada e horizontal. Para a frequência de 1 MHz (Figura 4.3 d), pode ser observado que a curva de capacitância medida é independente da faixa de tensão aplicada, apresentando um valor médio próximo do valor calculado para a capacitância geométrica. Calculando o desvio relativo máximo entre o dispositivo de menor capacitância (dipositivo B) e a capacitância geométrica obtemos um valor de 3% o que ilustra bem a coincidência entre valores esperados e os medidos para a capacitância. Por outro lado, com o decréscimo da frequência de modulação, as curvas se tornam mais dependentes da tensão (Figura 4.3 c a, b e c). Os valores de capacitância maiores que o da capacitância geométrica indicam que cargas foram acumuladas em algum lugar dentro da estrutura dos poços quânticos múltiplos, ou seja, que cargas com sinais oposto foram acumuladas próximas uma da outra. No entanto, não é possível, com essa medida, dizer exatamente a posição dessas cargas. A medida da capacitância diferencial obtida para a menor frequência possível para nosso sistema (1 kHz) é mostrada na Figura 4.3 (a). Para esta frequência e a baixas tensões, aproximadamente entre -1 a +1 V, a capacitância é praticamente constante e com valor próximo do calculado para a capacitância geométrica. Segue-se então, um aumento monotônico da capacitância até um máximo na faixa entre 3 e 3,5 V, para ambas as polaridades. Este pico largo nas C-Vs coincide com a transição da região de baixa condutividade para a de alta condutividade nas curvas I-V, como é evidenciado pelas I-Vs inseridas na Figura 4.3 (a). Em tensões ainda mais altas, picos mais estreitos aparecem, o que sugere uma propagação de domínio de campo elétrico, mas nenhuma periodicidade foi encontrada, além de que, esta é uma região de alta condutância, o oposto do que seria um platô. Não se observa coincidência nem na intensidade nem na posição dos picos entre dispositivos, mesmo eles tendo sido processados simultaneamente,

no mesmo substrato.

Outro ponto a ser destacado é que as curvas I-Vs com maiores correntes também mostram maiores capacitâncias para a maior parte da faixa de tensão analizada. Como a carga total acumulada irá indicar qual o maior campo elétrico na estrutura, isso sugere que a maior corrente em dado dispositivo pode estar relacionada a diferentes distribuições de campo elétrico, de tal modo que, apesar de estar à mesma tensão, os dispositivos apresentam diferentes valores para o maior campo elétrico (MCE) na estrutura. Como evidenciado pela dependência das C-Vs com a frequência, o acúmulo de carga dentro da estrutura dos MQW é um processo lento. Assim se estivermos interessados em determinar a carga total estática que está acumulada na estrutura, teremos que fazer esse cálculo a partir das curvas de capacitância nas menores frequências possíveis. Para nosso sistema, essa frequência é 1 kHz. Sendo assim, as curvas medidas a esta frequência foram utilizadas para calcular a carga total acumulada na estrutura do MQW, visto que fornecem o valor mais próximo do real que se pode obter com o aparato disponível. A carga total foi então calculada como:  $Q_t = \int_0^V C(V') dV'$ , onde C(V') é a capacitância diferencial medida a 1 kHz, V é a tensão aplicada e  $Q_T$  é a carga total acumulada na estrutura. Uma representação gráfica dos valores calculados pode ser observado na Figura 4.4.



FIGURA 4.4 – Cálculo da carga total acumulada nas estruturas, obtida através da integração das curvas C-Vs medidas a 10 K e 1 kHz, para os dispositivos A (linha preta sólida), B (linha vermelha tracejada) e C (linha verde tracejada e pontilhada), mostrando o comportamento da carga total estimada para a faixa de tensão aplicada.

Como esperado, o cálculo da carga total acumulada na estrutura, mostra os maiores valores para os dispositivos que apresentaram maior capacitância. Uma vez obtida a carga total acumulada, o MCE na estrutura foi obtido. Após obter  $Q_T$ , para cada tensão, o MCE na estrutura foi calculado usando a aproximação de placas paralelas infinitas,  $MCE = Q_T/\epsilon_1 A$ .

Estes cálculos forneceram uma relação entre a tensão aplicada e o MCE na estrutura,

para cada dispositivo. Se o MCE na estrutura é realmente um parâmetro determinante da corrente fluindo na estrutura, apresentar as medidas de capacitância e de corrente em função do MCE deve mostrar um maior acordo entre as curvas de todos os dispositivos. Isto foi feito e é apresentado na Figura 4.5. Nessas curvas os joelhos de todas as I-Vs apresentam uma razoável coincidência, tanto em posição no campo elétrico quanto nos valores de corrente.



FIGURA 4.5 – Curvas C-V a 10 K e 1 kHz expressas como função do MCE, para os três dispositivos. As curvas I-V nas escalas linear e logarítmica também são apresentadas como função do MCE.

O valor calculado para o nível de Fermi na estrutura é 20 meV acima do fundo da sub-banda fundamental dos poços. Linhas verticais indicando 20 mV por período foram desenhadas na Figura 4.5 para facilitar a observação do comportamento da capacitância e da corrente nesta faixa de MCE. Todos dispositivos apresentam uma capacitância aproximadamente constante nesta região de 20 mV/período, com um valor próximo ao valor calculado da capacitância geométrica, sugerindo que cargas são acumuladas somente nas extremidades da estrutura. As linhas verticais também limitam a região de campo onde a taxa de aumento da corrente de escuro é menor, onde existe a maior coincidência entre os dispositivos, e também a maior linearidade, como pode ser melhor visto nas curvas de corrente em escala linear.

O aumento da capacitância diferencial com a tensão implica que o campo elétrico está se concentrando em uma região pequena, significando que cargas estão sendo acumuladas próximas umas das outras. O primeiro pico de capacitância (o mais alargado), que está relacionado com o início da região de alta condutância, ocorre para o MCE em torno de 86 mV/período. Um cálculo dos estados eletrônicos unidimensionais de dois poços quânticos adjacentes sujeitos a este campo elétrico é apresentado na Figura 4.6. Nessa Figura, pode ser visto que os elétrons, que têm uma energia próxima ao quase nível de Fermi em dado poço, são capazes de tunelar a uma energia próxima da do topo da barreira de saída do próximo poço, que está estreitada pelo campo elétrico. Isso decresce a probabilidade de captura dos elétrons no próximo poço, reduzindo assim o acúmulo de carga nessa região. Como consequência, aumentando-se mais a tensão, as cargas devem ser armazenadas mais longe, diminuindo a capacitância diferencial. Após este decréscimo inicial, a capacitância oscila de um modo irregular, exibindo alguns picos mais estreitos e outros picos alargados. Qualquer aumento da capacitância diferencial é relacionado a um aumento localizado do campo elétrico, de um modo que os picos indicam uma forte mudança na distribuição de campo elétrico. Isso é semelhante ao movimento das fronteiras de domínios de campo elétrico, mas não apresentam nenhum padrão regular, como seria esperado.



FIGURA 4.6 – Representação dos estados eletrônicos unidimensionais para dois poços quânticos adjacentes, sujeitos a uma queda de potencial por período de 86 mV. O cálculo foi realizado utilizando o QWS, e podemos observar o quasi nível de Fermi de um poço próximo do topo da barreira de saída do poço adjacente.

Na Figura 4.3, também foi representado, com linhas verticais, o campo elétrico necessário para alinhar o quase nível de Fermi de um poço, com o topo do barreira de saída do próximo poço (linhas tracejadas em azul, marcando 106 mV/período). De forma semelhante, o campo elétrico que alinha o estado fundamental de um poço com o topo da barreira de saída do poço seguinte também esta indicado pelas linhas verticais posicionadas em 126 mV/período. Essas linhas coincidem com alguns picos na curva de capacitância, mas esses picos não estão presentes em todas as curvas dos dispositivos. Além disso, não existe uma relação clara de coincidência de energia para todos os picos de capacitância. Eles podem estar associados a estados de defeitos na borda das barreiras que diferem de dispositivo para dispositivo. A altos campos elétricos, elétrons podem tunelar através de uma única barreira diretamente para o contínuo, sendo, portanto, um processo mais dependente da densidade local de defeitos, o que também irá afetar a distribuição de campo elétrico dentro da estrutura.

### 4.2 Conclusão

A análise C-V de QWIPs processados simultaneamente no mesmo substrato, permitiu estabelecer a correlação entre diferenças nas curvas I-V a baixas temperaturas destes dispositivos e diferentes distribuições de campo elétrico. Essas diferenças podem estar relacionadas a diferenças nas densidades de defeitos locais das barreiras. Também foi mostrado que a estrutura permanece sob campo elétrico aproximadamente uniforme, ao menos, até uma tensão aplicada que corresponde a uma queda de potencial por período igual a diferença em energia entre o nível de Fermi do sistema e o mínimo da subbanda fundamental dos poços, em eV. A maiores tensões, cargas acumuladas dentro da estrutura geram um campo elétrico não uniforme, que depende do dispositivo medido. O dispositivo com a maior corrente de escuro, tem a maior carga acumulada, significando que o valor máximo do campo elétrico é maior neste dispositivo. Também foi mostrado que é esse campo elétrico máximo na estrutura que dita o fim do regime de baixa condutância, e que isso ocorre quando o quase nível de Fermi de um poço está próximo do topo da barreira de saída do poço seguinte. Para valores ainda maiores de tensão, picos adicionais estão presentes nas curvas de capacitância, mas com posições que variam de dispositivo para dispositivo, mesmo quando as capacitâncias são expressas em termos do maior campo elétrico dentro da estrutura.

# 5 I-Vs de QWIPs a Temperaturas Médias e Altas

Neste capítulo, são apresentados os resultados do trabalho experimental de determinação das curvas I-V para a amostra em estudo, a diversas temperaturas, bem como da obtenção da energia de ativação como função da tensão aplicada. Os resultados experimentais permitiram observar um comportamento não linear e assimétrico na curva de energia de ativação versus tensão aplicada. Por meio de uma colaboração com o aluno de doutorado do ITA Diogo de Moura Pedroso (que efetuou o trabalho teórico, incluindo cálculos computacionais), uma série de melhorias nos modelos de cálculo de corrente de escuro de QWIPs em temperaturas médias e altas foram propostas. Esse trabalho resultou na publicação entitulada *Effect of dopant segregation and negative differential mobility on multi-quantum well activation energy* (36).

### 5.1 Modelo Teórico

### 5.1.1 Difusão e segregação de dopantes

Para tratar a difusão e a segregação de dopantes consideramos que a migração de dopantes provoca a redução da concentração de dopantes no poço e introduz dopantes nas barreiras adjacentes, estes dopantes podem ser encontrados tanto na camada da barreira crescida antes do poço, quanto na camada de barreira crescida depois do poço. Chamase de difusão a migração de dopantes para a barreira imediatamente antes do poço, e de segregação a migração de dopantes para a barreira crescida em cima da camada do poço. Conforme discutido na literatura (42, 78, 77, 106, 107), a concentração de dopantes fora da camada dopada pode ser modelada por uma função de decaimento exponencial dependente da posição. A migração de dopantes para as barreiras por segregação é significativamente mais intensa que por difusão. Para considerar a conservação da carga total de impurezas dopantes, Q, por período, pode-se utilizar a seguinte expressão como uma boa aproximação:

$$Q = n_{3D}L_WA = n^*A\left[\int_{-\infty}^0 exp\left(-\frac{|z|}{\alpha_L}\right)dz + L_W + \int_0^\infty exp\left(-\frac{|z|}{\alpha_R}\right)dz\right],\qquad(5.1)$$

onde  $n_{3D}$  é a concentração nominal de dopantes no poço,  $n^*$  é a concentração de dopantes no poço após a migração para as barreiras,  $L_W$ , é a largura do poço e  $\alpha_L$  e  $\alpha_R$  são os comprimentos de difusão e segregação, respectivamente. A integral é calculada para um período da estrutura (poço + barreira), a concentração  $n^*$  deve ser normalizada de modo que a carga total no período se mantenha inalterada. A Figura 5.1 exemplifica o comportamento da função de distribuição de impurezas dopantes na estrutura.



FIGURA 5.1 – Representação do perfil das impurezas dopantes na estrutura. Figura adaptada a partir da referência (108).

No QWS, a inserção de impurezas dopantes, com variação contínua, é feita por meio de camadas finas e sucessivas, tendo sido usadas camadas de 1 Å de espessura. Com isso, buscou-se reproduzir o perfil descrito pela equação (5.1) para a função de distribuição de impurezas dopantes. Um cálculo autoconsistente, sem tensão aplicada e usando condições de contorno de Neumann homogêneas, foi utilizado para obter o novo perfil da banda de condução, considerando a difusão e a migração de impurezas dopantes nas barreiras. Na Figura 5.2 o novo perfil do potencial de um período é apresentado, este potencial, V(Z), agora dependente continuamente da posição. Ele é determinado utilizando o QWS com o cálculo autoconsistente, considerando diferentes valores de  $\alpha_R$  e considerando  $\alpha_L = 0.3$ nm fixo, como já foi sugerido na literatura (78, 77).

#### 5.1.2 Modelagem da Corrente de Escuro

Foi utilizado o modelo de emissão-captura (23). Este modelo considera o balanço entre as taxas de emissão e captura na região do poço, e a densidade de corrente de escuro é



FIGURA 5.2 – Perfil de banda com e sem a consideração de segragação de dopantes. Figura adaptada a partir da referência (36).

dada pela expressão:

$$J_{dark} = qv_d \frac{m_W}{\pi \hbar^2 L_p} \frac{\tau_c}{\tau_{scat}} \int_{E_0}^{\infty} T(E, F) \left[ 1 + exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) \right]^{-1} dE,$$
(5.2)

onde q é a carga fundamental;  $E_0$  é a energia do estado fundamental; T é a temperatura;  $k_B$  é a constante de Boltzmann;  $E_F$  e E são a quase energia de Fermi e a energia total respectivamente, tomando como zero o fundo da banda de condução do poço;  $L_p$  é a largura do período da estrutura;  $v_d$  é a velocidade de deriva; e  $m_W$  é a massa efetiva dos elétrons no poço. A razão entre os tempos médios de captura e de excitação nos poços pode ser descrito de acordo com Tan *et. al.* (109), como:

$$\frac{\tau_c}{\tau_{scat}} \approx \frac{m_b}{m_W} L_p \left(\frac{m_b k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{1/2}.$$
(5.3)

A probabilidade de transmissão T(E, F) foi obtida por meio da aproximação WKB na sua forma integral:

$$T(E,F) = exp\left[\int_0^{Z_c} -2\frac{\sqrt{2m_b[V(Z) - eFZ - E]}}{\hbar}dZ\right],$$
(5.4)

sendo  $m_b$  a massa efetiva na barreira.  $Z_c$  define os pontos clássicos de retorno ilustrado na Figura 5.3. O potencial V(Z) leva em conta as impurezas não intencionais que migraram para a barreira. O QWS leva em conta as alterações na massa efetiva e no alinhamento de bandas (band-offset) com a temperatura de acordo com o especificado na literatura (71, 110).



FIGURA 5.3 – Banda de condução ilustrando os pontos de retorno clássicos a uma distância  $Z_C$  para uma energia E a partir do fundo da banda. Figura adaptada a partir da referência (36).

A velocidade de deriva apresentada na equação 5.2 é frequentemente utilizada (maioria dos casos presentes na literatura) como sendo dada pela expressão:

$$v_d = \frac{\mu F}{\sqrt{1 + (\frac{\mu F}{v_{sat}})^2}},\tag{5.5}$$

sendo  $\mu$  a mobilidade a baixos campos, e  $v_{sat}$  a velocidade de saturação. No entanto, de acordo com Schneider (23), resultados teóricos do cálculo da corrente de escuro obtidos usando a eq. (5.5) podem diferir significativamente dos valores experimentais. Esta expressão não inclui o efeito da mobilidade diferencial negativa (NDM), conhecido para materiais como *GaAs* e suas ligas. Uma abordagem fenomenológica que inclui este efeito é dada por (111):

$$v_d = \frac{\mu F + v_{sat} \left(\frac{F}{F_C}\right)^4}{\sqrt{1 + \left(\frac{F}{F_C}\right)^4}},\tag{5.6}$$

onde o coeficiente  $F_C$  é o campo crítico em que velocidade de deriva atinge seu valor máximo. A velocidade de deriva, como calculada pela equação (5.6), aumenta até um valor máximo e então decresce como uma função do campo elétrico, até alcançar a velocidade de saturação(112). Este resultado ajusta melhor as curvas de corrente de escuro para campos altos, o que impacta positivamente no cálculo da  $E_{act}$ .

Para se levar em conta a difusão e a segregação de dopantes no cálculo da corrente de escuro dos dispositivos, o seguinte procedimento foi empregado:

1) Os parâmetros de transporte foram determinados para tensões positivas ( $\mu^+$ ,  $v_{sat}^+$ ,  $F_C^+$ ) e negativas ( $\mu^-$ ,  $v_{sat}^-$ ,  $F_C^-$ ), por meio de um processo de ajuste da equação (5.2) aos dados experimentais, considerando as barreiras simétricas. Se elas assim forem  $\mu^+ \approx \mu^-$ ,  $v_{sat}^+ \approx$  $v_{sat}^-$ ,  $e F_C^+ \approx F_C^-$ , o que significa que as curvas I-Vs são simétricas. No entanto, se um dos parâmetros diferir significativamente entre dois sentidos, significa que a barreira é assimétrica e os efeitos da difusão e da segregação de dopantes devem ser incluídos nos cálculos.

2) Se as barreiras são supostas assimétricas, um cálculo auto-consistente usando as equações de Poisson e Schödinger de modo a se obter o perfil da banda de condução, V(Z) levando em conta essa migração de impurezas e os valores adotados para  $\alpha_L$  e  $\alpha_R$  é executado. Com este novo perfil de banda, calcula-se novamente os parâmetros de transporte. Repete-se esse processo variando os valores de  $\alpha_L$  e  $\alpha_R$  até que a condição de convergência  $\mu^+ \approx \mu^-$ ,  $v_{sat}^+ \approx v_{sat}^-$ ,  $e F_C^+ \approx F_C^-$  seja alcançada. Como mencionado, este procedimento de ajuste leva em consideração a condição de que os parâmetros de transporte não devem ser alterados com a direção em que a tensão externa é aplicada, visto que uma assimetria nesses parâmetros não se justifica fisicamente. Ao final do processo, temos o perfil de dopantes capaz de gerar a assimetria observada na corrente, sem uso de mobilidade assimétrica, visto que isto é pouco plausível.

### 5.2 Resultados e Discussão

Na Figura 5.4, está representado o pedaço da amostra que foi utilizado para as medições, cujos resultados são analisados neste capítulo, com todos dispositivos numerados em ordem crescente. Os dispositivos medidos estão indicados em vermelho. Dentre estes alguns apresentaram curto durante a medida, e outros uma corrente de escuro bem acima dos demais dispositivos. Estes dispositivos foram considerados defeituosos e as análises se concentraram nos dispositivos que apresentavam as menores correntes de escuro, com resultados próximos entre si. Os QWIPs selecionados para análise detalhada foram: 47, 63, 65, 97, 99, 118, 119, e 131.

Na Figura 5.5, são mostradas as curvas I-V dos dispositivos medidos. Optou-se em expressar os eixos das curvas por densidade de corrente de escuro,  $A/cm^2$ , versus campo elétrico, V/cm. O campo elétrico é o campo médio sobre a estrutura de poços e barreiras. Para obter a densidade de corrente usamos a área da amostra que é igual a  $A = 1, 6 \times 10^{-3} cm^2$ , e para obter o valor do campo elétrico médio dividimos o eixo de tensão pelo comprimento total da região ativa do dispositivo (poços e barreiras),  $L_{total} = 1,81 \times 10^{-4} cm$ . Tal procedimento se deve ao fato de que a corrente descrita como densidade de corrente permite comparar dispositivos com áreas diferentes, e que a maioria dos modelos teóricos para cálculo da corrente explicitam o campo elétrico na estrutura e não a tensão aplicada. Observando as curvas obtidas a 120 K, vemos que, para valores acima de 2,8 V (15500 V/cm) na polarização positiva, elas apresentaram corrente maior que o limite fixado no B1500A, compliance da medida. Naturalmente, essa faixa de valores não foi


FIGURA 5.4 – Diagrama do pedaço da amostra que foi medido. Em vermelho estão indicados os dispositivos que foram medidos. A parte circular a esquerda é a borda do substrato, e é onde se espera maior inomogeneidade no crescimento, assim evitamos medir os dispositivos próximos da borda.

considerada nas análises. As curvas I-Vs são claramente assimétricas quanto à polarização.



FIGURA 5.5 – Curvas de densidade de corrente de escuro em função do campo elétrico médio na estrutura, para temperaturas de 60 K a 120 K. Medições realizadas utilizando o método de 4 pontas.

Na Figura 5.6 (a), são apresentadas as médias das medidas para as temperaturas de 60 a 120 K, com seus respectivos desvios padrão. Na Figura 5.6 (b) é mostrado o desvio padrão relativo das médias das I-Vs para cada temperatura. O desvio está abaixo de 5% para as medidas entre 90 a 120 K, e aumenta para valores acima de 30% para a temperatura de 60 K. É possível perceber que a utilização do modo pulsado tem funcionado de modo adequado no sentido de evitar o aquecimento da amostra, o que pode ser comprovado pela ausência de histerese térmica nas curvas I-V medidas. Para altas temperaturas, o mecanismo de condução dominante é a emissão termiônica. Este mecanismo é, em geral, menos dependente do dispositivo medido, quando comparado com mecanismos que envolvem tunelamento. Há uma faixa de temperaturas em que o tunelamento termicamente assistido tem um peso maior, gerando uma maior dispersão nas medidas.



FIGURA 5.6 – (a) Curvas de densidade de corrente de escuro média de todos os dispositivos medidos, com os respectivos desvios padrão. (b) Desvio padrão relativo das médias.

A partir do ajuste linear das curvas I-Vs da Figura 5.5, entre -0,1 V a +0,1 V, para cada temperatura medida, foi possível determinar a condutância, na região linear da curva, e com isso calcular a energia de ativação a campo elétrico zero, para todos os QWIPs. Na Fig. 5.7, são ilustrados tanto um gráfico de Arrhenius (a), como os valores calculados de energia de ativação a campo zero, para os dispositivos (b). Para as temperaturas de 60 e 70 K a curva foge da linearidade e esses pontos não foram considerados no ajuste. O valor de  $E_{act}$ , a campo elétrico zero, foi calculado a partir da I-V média e o valor obtido foi de (113 ± 1) meV.

A partir das curvas apresentadas na Figura 5.5, foram construídos os gráficos de Arrhenius, para as temperaturas entre 60 a 120 K e tensões nas faixas de -4,0 V a -0,1 V, e de 0,1 a 3,1 V. Na Figura 5.8 (a e b) como forma de exemplificar o procedimento, são mostrados em vermelho os ajustes lineares que foram utilizados para obtenção da energia



FIGURA 5.7 – (a) Gráfico de Arrhenius da condutância para determinação da energia de ativação. (b) Energia de ativação obtida a campo zero para os dispositivos medidos.

de ativação. Nos dois gráficos nota-se que, para temperaturas abaixo de 80 K, as curvas deixam de ser lineares, e, por isso, no cálculo da energia de ativação foram consideradas somente as temperaturas de 80 a 120 K. Acima de 3,1 V ( $\approx 17130$  V/cm) as correntes a 120 K atingem o valor estabelecido como limite no equipamento. Por isso, decidiu-se por restringir a análise da energia de ativação na polarização positiva a esta tensão máxima.



FIGURA 5.8 – Gráficos de Arrhenius da corrente do dispositivo 119 na faixa de tensão de 0,1 V a -4,0 V (a) e de 0,1 V a 3,1 V (b), para as temperatura de 60 a 120 K.



FIGURA 5.9 – (a) Energia de ativação de todos os QWIPs medidos nas duas polarizações. (b) Energia de ativação obtida a partir da corrente de escuro média de todos os QWIPs, considerando os três modelos de corrente de escuro citados na seção 2.3.2.

Na Figura 5.9 (a), está ilustrado o comportamento da energia de ativação de todos os dispositivos. O primeiro fato a se observar é o comportamento não linear com o aumento do campo elétrico. A energia de ativação entre QWIPs apresenta uma variação máxima da ordem de 4 meV na região de campo nulo. Na fig. 5.9 (b) calculamos a  $E_{act}$  para as curvas I-V médias de todos os dispositivos para a faixa de 60 a 120 K, obtendo assim uma  $E_{act}$  média. São apresentadas duas curvas diferentes para ilustrar como varia a  $E_{act}$  média calculada usando os principais modelos descritos na literatura. Observa-se uma não linearidade da energia de ativação com o campo elétrico. A assimetria entre as duas polarizações é novamente evidente.

O modelo mais simples para obtenção da dependência da  $E_{act}$  com o campo elétrico leva em conta apenas a emissão termiônica e prediz uma dependência linear entre essas variáveis. Além disso, a taxa predita para a redução da  $E_{act}$  é muito inferior à observada. Decidiu-se, então, avaliar qual seria a influência do tunelamento termicamente assistido, ao se calcular a  $E_{act}$  e como isso afetaria o calculo de  $E_{act}$  pelo gráfico de Arrhenius. Para tanto, I-Vs teóricas foram obtidas pelo modelo expresso na equação (5.2) e as energias de ativação foram recalculadas a partir das curvas teóricas. Para tentar reproduzir as assimetrias observadas, os efeitos de difusão e segregação foram incluídos nos cálculos.

A Figura 5.2 ilustra o fato de que com o aumento de  $\alpha_R$  ocorre um aumento da assimetria entre o lado esquerdo e o direito das barreiras em torno do poço quântico. Para todos os cálculos o valor de  $\alpha_L$  foi mantido em 0,3 nm. O valor  $\alpha_R = 5 nm$ , levou ao melhor ajuste da corrente de escuro, mantendo o compromisso de que os parâmetros de transporte não podem variar significativamente nas duas polarizações. Este valor também está próximo de outros dados reportados na literatura como em Wasilewski *et. al.* (77), onde  $\alpha_R = 4 nm$  para amostras similares, mas com dopagem tipo delta ( concentrada em uma camada atômica).

Os parâmetros de transporte utilizados para obter as curvas de corrente de escuro teóricas são apresentados na tabela 5.1 e são semelhantes a dados anteriormente reportados na literatura (113, 114). Foi possível ajustar os valores de mobilidade e velocidade de saturação iguais entre as polaridades, mas  $F_c$  varia de 13 a 15% entre as polaridades. Essa assimetria ainda persistente em  $F_c$ , pode estar associada a imprecisões do modelo, ou a outros mecanismos de condução não considerados, como correntes geradas por tunelamento assistido por defeitos (115).

TABELA 5.1 – Parâmetros utilizados para obter as curvas teóricas de corrente de escuro considerando  $\alpha_R = 0,5 \ nm \ e \ \alpha_L = 0,3 \ nm.$ 

Temperatura (K)	$\mu(cm^2V^{-1}s^{-1})$	$V_{sat}(cms^{-1})$	$F_c(\times 10^4 \ V cm^{-1})$
80	950	$3 \times 10^6$	1,60 (positivo) $1,90$ (negativo)
90			1,60  (positivo)  1,90 (negativo)
100			1,75 (positivo) $2,05$ (negativo)
110			1,85 (positivo) $2,10$ (negativo)
120	900		2,00 (positivo) $2,30$ (negativo)

A Figura 5.10 (a) mostra uma comparação entre as curvas de densidade de corrente de escuro experimentais e teóricas para a faixa de 80 a 120 K. Um excelente acordo entre os dados experimentais e teóricos é observado em toda a faixa de temperatura e campo elétrico aplicado.



FIGURA 5.10 – (a) Curvas experimentais e teóricas da currente de escuro na faixa de temperatura de 80 a 120 K, e (b) comparação das curvas de corrente teóricas e experimentais a 80 K com e sem o uso da mobilidade diferencial negativa (NDM). Adaptado de (36)

A Figura 5.10 (b) apresenta uma comparação dos resultados teóricos e experimentais a 80 K, com e sem utilizar a mobilidade diferencial negativa no cálculo da corrente de escuro. Os parâmetros de transporte utilizados no cálculo sem a NDM foram:  $\mu = 950 \ cm^2 V^{-1} s^{-1}$  e  $v_{sat}$  na faixa de 10<sup>7</sup> até 5 × 10<sup>7</sup>  $cms^{-1}$ . Para todos os cálculos com NDM os parâmetros

estão mostrados na tabela 5.1. Observamos que a inclusão da NDM no cálculo da corrente de escuro contribui de forma a melhorar significativamente a qualidade do ajuste. No caso do modelo sem considerar a NDM, é possível observar que com o aumento da tensão a curva apresenta um comportamento exponencial que não corresponde aos dados experimentais. Ao se alterar os parâmetros de velocidade de saturação e mobilidade é possível aumentar a similaridade entre a curva teórica e a curva experimental, mas não é possível encontrar uma coincidência entre elas, tão boa quanto a obtida com a NDM.

A  $E_{act}$  na polarização negativa é sistematicamente maior que na polarização positiva para todos os dispositivos medidos (figuras 5.9a), e consequentemente também para a curva média 5.9b, o que se deve ao fato das curvas de corrente de escuro com polarização negativa apresentarem uma amplitude menor em comparação à corrente com polarização positiva. Na Figura 5.11 (a) apresentamos curvas de  $E_{act}$  teóricas e experimentais, para a faixa de temperatura de 80 a 120 K. Na curva experimental foi inserida uma barra de erro para representar o desvio padrão das médias. Eles variam entre 2 a 2,5% do valor médio. A maior diferença verificada entre a curva teórica, do modelo empregado neste trabalho, e a experimental média é de aproximadamente 2,5 meV, o que é próximo do desvio padrão encontrado. Os resultado teóricos mostram uma boa coincidência com os dados experimentais para uma grande faixa de tensão aplicada, que é o resultado do excelente ajuste da curva de corrente de escuro, considerando a NDM e as mudanças no potencial devido a segregação de dopantes.



FIGURA 5.11 – (a) Curvas de energia de ativação experimental e teóricas calculadas no intervalo de 80 a 120K para tensão positiva e negativa. (b) Energia de ativação teórica com e sem considerar a dependência da velocidade de deriva com a temperatura. Adaptado de (36).

A Figura 5.11 (a) também apresenta os valores teóricos das curvas de energia de ativação obtidas do modelo geométrico (23), e do modelo de Poole-Frenkel (94, 116). Vemos que o modelo geométrico superestima os valores experimentais da energia de ativação aparente para toda a faixa de campo elétrico, apresentando uma inclinação significativamente menor que a das curvas experimentais. O modelo considera que toda a corrente a altas temperaturas é gerada pelo mecanismo de emissão termiônica, desprezando-se os mecanismos de tunelamento assistido, o que leva a um valor superestimado da energia de ativação medida. No modelo de Poole-Frenkel, a energia de ativação é consideravelmente menor que os valores de energia de ativação aparente obtidos experimentalmente, o que de acordo com Panda *et.al.*(117), está relacionado com o efeito de blindagem eletromagnética gerado pelos elétrons nas camadas dos poços, que reduzem o potencial coulombiano das impurezas ionizadas consideravelmente. O modelo proposto, reproduz muito bem os dados experimentais, tanto com relação a assimetria quanto em relação a não linearidade. Levando em conta o desvio padrão, também apresentado na Figura 5.11 (a), vemos que, de fato, este modelo representa muito bem o comportamento da energia de ativação experimental que foi obtido.

Como é observado na tabela 5.1, a mobilidade,  $\mu$ , apresenta uma variação pequena ( $\approx 5\%$ ) na faixa de temperatura utilizada, enquanto que o campo crítico,  $F_c$ , apresenta uma dependência maior com a temperatura (chagando a variar em torno de 25% para a mesma faixa de temperatura), e portanto a velocidade de deriva,  $v_d$  também possui uma dependência significativa com a temperatura. Na Figura 5.11 (b), são apresentados os cálculos da energia de ativação, tanto considerando quanto sem considerar a dependência da velocidade de deriva com a temperatura. Para o caso sem variação com a temperatura, o valor de  $v_d$  obtido para 80 K foi utilizado. A dependência com a temperatura gera uma não linearidade das curvas teóricas da energia de ativação para valores acima de 10 kV/cm, aumentando a coincidência com os dados experimentais.

## 5.3 Conclusão

Para a amostra estudada, as medidas I-V a altas temperaturas apresentaram uma significativa assimetria com o sentido de polarização, possuindo sistematicamente correntes maiores na polarização positiva. As curvas de Energia de Ativação aparente obtidas apresentaram uma alta não linearidade, e, também, assimetria em relação aos sentidos de polarização.

A utilização de um modelo para corrente de escuro que leva em conta a migração de impurezas dopantes dos poços quânticos para as barreiras, juntamente com a utilização do modelo de corrente de escuro de emissão captura e mobilidade diferencial negativa, levou a um bom ajuste teórico dos dados experimentais, tanto para as curvas de corrente de escuro, quanto para as de energia de ativação, mantendo uma simetria na mobilidade não observada nos modelos previamente existentes. Também permitiu obter valores estimados para os coeficientes de segregação em bom acordo com valores previamente reportados na literatura.

## 6 Conclusões

Neste trabalho, amostras QWIPs com poços quânticos de GaAs com dopagem tipo n (Si) e barreiras de  $Al_xGa_{1-x}As$  largas o suficientes para considerarmos os poços quânticos múltiplos fracamente acoplados foram estudados. Por meio de uma análise das cuvas I-V e C-V a 10 K, foi possível identificar que o campo elétrico máximo na estrutura é responsável por ditar o regime de condução. As medidas também mostraram que a distribuição de campo elétrico em dispositivos fabricados simultaneamente no mesmo substrato pode variar significativamente, sendo tal efeito responsável pelas diferenças observadas nas I-Vs destes dispositivos a baixas temperaturas. Apesar da presença de não uniformidade no campo elétrico ao longo da estrutura, não se observam os elementos característicos normalmente observados nas I-Vs e C-Vs de MQWs, associados à formação e expansão de domínios de campo elétrico alto. Mais especificamente, não se observa platôs ou oscilações nas I-Vs, nem picos periódicos na capacitância diferencial. Picos na capacitância são observados para as maiores tensões aplicadas, mas sem periodicidade, indicando que podem estar associados a estados de defeitos nas barreiras.

Estudos da dependência da corrente de escuro com a temperatura permitiram observar a dependência da energia de ativação com a tensão aplicada, que não segue o esperado pelo modelo mais simples para explicar essa dependência. O esforço de bem explicar o comportamento observado levou ao melhoramento de modelos já existentes. Foi possível ajustar um modelo que levasse em conta tanto o tunelamento termicamente assistido quanto a segregação de dopantes e mobilidade diferencial negativa, de modo a se obter um melhor ajuste das curvas experimentais, reproduzindo muito bem tanto as assimetrias nas curvas I-V, como nas curvas de energia de ativação. O excelente ajuste foi realizado com um modelo que não necessita que a mobilidade eletrônica tenha valores diferentes a depender do sentido de polarização do dispositivo.

Uma sequência bastante interessante desse trabalho seria estudar a variabilidade da corrente de escuro entre dispositivos com a temperatura. Espera-se poder estabelecer uma correlação bastante interessante com a variabilidade observada a tensões mais altas nas medidas a 10 K.

## Referências

- JONES, H. G.; SERRAJ, R.; LOVEYS, B. R.; XIONG, L.; WHEATON, A.; PRICE, A. H. Thermal infrared imaging of crop canopies for the remote diagnosis and quantification of plant responses to water stress in the field. Functional Plant Biology, CSIRO, v. 36, n. 11, p. 978–989, 2009. 20
- 2 VADIVAMBAL, R.; JAYAS, D. S. Applications of thermal imaging in agriculture and food industry—a review. Food and bioprocess technology, Springer, v. 4, n. 2, p. 186–199, 2011. 20
- 3 GREEN, R. O.; EASTWOOD, M. L.; SARTURE, C. M.; CHRIEN, T. G.; ARONSSON, M.; CHIPPENDALE, B. J.; FAUST, J. A.; PAVRI, B. E.; CHOVIT, C. J.; SOLIS, M. *et al.* Imaging spectroscopy and the airborne visible/infrared imaging spectrometer (aviris). **Remote sensing of environment**, Elsevier, v. 65, n. 3, p. 227–248, 1998. 20
- 4 GUNAPALA, S. D.; BANDARA, S. V.; LIU, J. K.; MUMOLO, J. M.; RAFOL, B.; TING, D. Z.; SOIBEL, A.; HILL, C. Quantum well infrared photodetector technology and applications. **IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics**, IEEE, v. 20, n. 6, p. 154–165, 2014. 20
- LOU CHURCHVILLE. What's Next For Enhanced Vision Systems? 2015.
   Disponível em:
   <a href="https://aviationweek.com/business-aviation/whats-next-enhanced-vision-systems">https://aviationweek.com/business-aviation/whats-next-enhanced-vision-systems</a>>.
   Acesso em: 15 de maio 2019. 20
- 6 CHAN, V. W. Free-space optical communications. Journal of Lightwave technology, IEEE, v. 24, n. 12, p. 4750–4762, 2006. 20
- 7 FLIR SYSTEMS, INC. **INFRARED CAMERA FOR METHANE AND VOC DETECTION**. 2019. Disponível em: <a href="https://www.flir.com/products/gf320/>">https://www.flir.com/products/gf320/></a>. Acesso em: 15 de maio 2019. 20
- 8 FAUCI, M.; BREITER, R.; CABANSKI, W.; FICK, W.; KOCH, R.; ZIEGLER, J.; GUNAPALA, S. Medical infrared imaging–differentiating facts from fiction, and the impact of high precision quantum well infrared photodetector camera systems, and other factors, in its reemergence. **Infrared physics & technology**, Elsevier, v. 42, n. 3-5, p. 337–344, 2001. 20
- 9 GRAY, S. A letter to Cromwell Mortimer, MD Secr. RS containing several experiments concerning electricity by Mr. Stephen Gray. **Philosophical Transactions**

of the Royal Society of London, The Royal Society London, v. 37, n. 417, p. 18–44, 1731. 20

- 10 KROEMER, H. Quasi-electric and quasi-magnetic fields in nonuniform semiconductors. **RCA Review**, v. 18, n. 3, p. 332–342, 1957. 20, 32
- 11 ALFEROV, Z. I. Electroluminescence of heavily-doped heterojunctions palxga1-xas-ngaas. Journal of Luminescence, Elsevier, v. 1, p. 869–884, 1970. 20
- 12 RASULOVA, G. K.; GOLUBKOV, M. V.; LEONOV, A. V.; BRUNKOV, P. N.; ZHUKOV, A. E.; USTINOV, V. M.; USOV, S. O.; KONNIKOV, S. G. Domain boundary instability in weakly coupled GaAs/AlGaAs superlattices. Superlattices and Microstructures, Elsevier, v. 37, n. 2, p. 139–150, 2005. 21, 22
- ESAKI, L.; CHANG, L. L. New transport phenomenon in a semiconductor superlattice. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 33, p. 495–498, 1974. 21, 22
- 14 VIEIRA, G. S.; ALLEN, S. J.; GUIMARÃES, P. S. S.; CAMPMAN, K. L.; GOSSARD, A. C. Resonantly enhanced photon-assisted tunneling in a multiple-quantum-well superlattice. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 58, p. 7136–7140, 1998. 21, 22, 46
- 15 GUIMARÃES, P. S. S.; KEAY, B. J.; KAMINSKI, J. P.; ALLEN, S. J.; HOPKINS, P. F.; GOSSARD, A. C.; FLOREZ, L. T.; HARBISON, J. P. Photon-mediated sequential resonant tunneling in intense terahertz electric fields. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 70, p. 3792–3795, 1993. 21, 22
- 16 VIEIRA, G. S.; FEU, W. H. M.; VILLAS-BôAS, J. M.; GUIMARãES, P. S. S.; STUDART, N. Resonant tunneling between thermal excited states tuned by a magnetic field. **Physical Review B**, APS, v. 75, n. 19, p. 193406, 2007. 21
- 17 VIEIRA, G. S.; Villas-Bôas, J. M.; Guimarães, P. S. S.; STUDART, N.; KONO, J.; ALLEN, S. J.; J., K. L. S.; GOSSARD, A. C. Magnetically tuned resonant photon-assisted tunneling. **Phys. Rev. B**, American Physical Society, v. 70, p. 035316, 2004. 21
- 18 ESAKI, L. A new photoconductor. IBM Tech. Discl. Bull., v. 20, n. 2456, 1977.
  21, 46
- 19 ANDO, T.; FOWLER, A. B.; STERN, F. Electronic properties of two-dimensional systems. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 54, n. 2, p. 437, 1982. 21
- 20 SMITH, J.; CHIU, L.; MARGALIT, S.; YARIV, A.; CHO, A. A new infrared detector using electron emission from multiple quantum wells. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena, AVS, v. 1, n. 2, p. 376–378, 1983. 21
- 21 LEVINE, B. F.; CHOI, K. K.; BETHEA, C. G.; WALKER, J.; MALIK, R. J. New 10  $\mu m$  infrared detector using intersubband absorption in resonant tunneling gaalas superlattices. **Applied Physics Letters**, v. 50, n. 16, p. 1092–1094, 1987. 21, 30, 39

- 22 TSU, R.; DöHLER, G. Hopping conduction in a superlattice. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 12, p. 680–686, 1975. 21, 45
- 23 SCHNEIDER, H.; LIU, H. C. Quantum Well Infrared Photodetectors:
  Physics and Applications. 1. ed. Berlin: Springer, 2007. 22, 25, 27, 37, 39, 40, 41, 42, 43, 69, 71, 79
- 24 GRAHN, H. T.; HAUG, R. J.; Müller, W.; PLOOG, K. Electric-field domains in semiconductor superlattices: A novel system for tunneling between 2d systems. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 67, p. 1618–1621, 1991. 22, 46
- 25 LEVINE, B. F. Quantum-well infrared photodetectors. Journal of Applied Physics, v. 74, n. 8, p. R1–R81, 1993. 22, 42
- 26 CHOI, K. K.; KENNERLY, S. W.; YAO, J.; TSUI, D. C. Characteristics of qwips at low background. Infrared Physics & Technology, v. 42, n. 3, p. 221 235, 2001. 22
- 27 FERNANDES, F. M.; CLARO, M. S.; SILVA, E. C. F. D.; QUIVY, A. A. Modeling noise in superlattice quantum-well infrared photodetectors. Journal of Physics D: Applied Physics, IOP Publishing, v. 47, p. 385105, 2014. 22, 48
- 28 LHUILLIER, E.; RIBET-MOHAMED, I.; TAUVY, M.; NEDELCU, A.; E., V. B.; ROSENCHER. Ultimate performance of quantum well infrared photodetectors in the tunneling regime. **Infrared Physics & Technology**, v. 52, n. 4, p. 132 – 137, 2009. 22
- 29 HAN, Z. Y.; YOON, S. F.; RADHAKRISHNAN, K.; ZHANG, D. H. Space charge buildup in tight-binding superlattices induced by electron sequential tunneling. Superlattices and Microstructures, v. 18, n. 2, p. 83 – 90, 1995. 22, 46
- 30 HAN, Z.; YOON, S.; RADHAKRISHNAN, K.; ZHANG, D. Investigation of high-field domain formation in tight-binding superlattices by capacitance–voltage measurements. **Applied physics letters**, AIP, v. 67, n. 13, p. 1908–1910, 1995. 22, 47
- 31 ZHANG, Y.; LI, Y.; JIANG, D.; YANG, X.; ZHANG, P. Giant capacitance oscillations related to the quantum capacitance in *GaAs/AlAs* superlattices. **Applied Physics Letters**, v. 64, n. 25, p. 3416–3418, 1994. 22
- 32 CHIQUITO, A. J.; PUSEP, Y. A.; MERGULHãO, S.; GALZERANI, J. C. Carrier confinement in an ultrathin barrier *GaAs/AlAs* superlattice probed by capacitance–voltage measurements. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, v. 13, n. 1, p. 36 42, 2002. ISSN 1386-9477. 22
- 33 HUANG, X. L.; SHIN, Y. G.; LIM, K. Y.; SUH, E.-K.; LEE, H. J.; SHEN, S. C. Thermally induced capacitance and electric field domains in GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As quantum well infrared photodetector. Solid-State Electronics, v. 41, n. 6, p. 845 – 850, 1997. 22
- 34 RASULOVA, G. K.; YAKIMOV, M. V.; KADUSHKIN, V. I. Capacitance–voltage characteristics of weakly coupled superlattices *GaAs/AlGaAs*. **Superlattices and Microstructures**, v. 24, n. 5, p. 313 319, 1998. ISSN 0749-6036. 22
- 35 LEVINE, B. Quantum-well infrared photodetectors. Journal of applied physics, AIP, v. 74, n. 8, p. R1–R81, 1993. 22, 30, 42, 44, 46, 48

- 36 PEDROSO, D. M.; SANTOS, T. G.; DELFINO, A. C.; VIEIRA, G. S.; FERNANDES, F. M.; QUIVY, A. A.; PASSARO, A. Effect of dopant segregation and negative differential mobility on multi-quantum well activation energy. J. of mat. sci., Springer, v. 52, n. 9, p. 5223–5231, 2017. 22, 23, 43, 68, 70, 71, 78, 79
- 37 AQUILANTI, V.; MUNDIM, K. C.; ELANGO, M.; KLEIJN, S.; KASAI, T. Temperature dependence of chemical and biophysical rate processes: Phenomenological approach to deviations from arrhenius law. Chemical Physics Letters, Elsevier, v. 498, n. 1-3, p. 209–213, 2010. 22, 42
- 38 DING, J.; TSU, R. The determination of activation energy in quantum wells. Applied physics letters, AIP, v. 71, n. 15, p. 2124–2126, 1997. 22, 43
- 39 NUTKU, F.; EROL, A.; GUNES, M.; BUKLU, L.; ERGUN, Y.; ARIKAN, M. I–v characterization of a quantum well infrared photodetector with stepped and graded barriers. Superlattices and Microstructures, Elsevier, v. 52, n. 3, p. 585–593, 2012. 22
- 40 BLAVETTE, D.; DUGUAY, S. Investigation of dopant clustering and segregation to defects in semiconductors using atom probe tomography. **Journal of Applied Physics**, AIP Publishing, v. 119, n. 18, p. 181502, 2016. 23
- 41 YURASOV, D.; ANTONOV, A.; DROZDOV, M.; SCHMAGIN, V.; SPIRIN, K.; NOVIKOV, A. Antimony segregation in ge and formation of n-type selectively doped ge films in molecular beam epitaxy. **Journal of Applied Physics**, AIP Publishing, v. 118, n. 14, p. 145701, 2015. 23
- 42 ARNOLD, C. B.; AZIZ, M. J. Unified kinetic model of dopant segregation during vapor-phase growth. **Physical Review B**, APS, v. 72, n. 19, p. 195419, 2005. 23, 68
- 43 JR, A. M.; PFEIFFER, L.; WEST, K.; MAGEE, C. Mechanisms for si dopant migration in molecular beam epitaxy al x ga 1- x as. Journal of Applied Physics, AIP, v. 88, n. 7, p. 4056–4060, 2000. 23
- 44 LEE, C.; TIDROW, M.; CHOI, K.; CHANG, W.; EASTMAN, L.; TOWNER, F.; AHEARN, J. Activation characteristics of a long wavelength infrared hot-electron transistor. **Applied physics letters**, AIP, v. 65, n. 4, p. 442–444, 1994. 23, 43
- 45 XU, Y.; SHAKOURI, A.; YARIV, A.; KRABACH, T.; DEJEWSKI, S. Direct measurement of doping density and barrier lowering effect with bias in quantum wells. **Electronics Letters**, IET, v. 31, n. 4, p. 320–321, 1995. 23
- 46 ROODENKO, K.; CHOI, K.-K.; CLARK, K.; FRASER, E.; VARGASON, K.; KUO, J.-M.; KAO, Y.-C.; PINSUKANJANA, P. Control over the optical and electronic performance of gaas/algaas qwips grown by production mbe. Infrared Physics & Technology, Elsevier, v. 84, p. 33–37, 2017. 23
- ZHANG, Y.; GU, Y.; CHEN, P.; ZHANG, Y.; ZHENG, Y.; YU, C.; LI, X.; GONG,
  H. Composition uniformity characterization and improvement of algaas/gaas grown by molecular beam epitaxy. Materials Science in Semiconductor Processing, Elsevier, v. 79, p. 107–112, 2018. 23

- 48 TSU, R. Superlattice to nanoelectronics. [S.l.]: Elsevier, 2010. 25
- 49 ROGALSKI, A. Infrared detectors: status and trends. Progress in quantum electronics, Elsevier, v. 27, n. 2, p. 59–210, 2003. 25
- 50 DAVIES, J. H. The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction. [S.l.]: Cambridge university press, 1998. 25
- 51 HARRISON, P. *et al.* Quantum wells, wires and dots. [S.l.]: Wiley Online Library, 2016. 25, 36
- 52 HERSCHEL, W. Experiments on the refrangibility of the invisible rays of the sun. Philosophical Transactions of the Royal Society of London, JSTOR, v. 1, p. 284–292, 1800. 25
- 53 PERŠ, J.; KRISTAN, M.; PERŠE, M.; KOVACIC, S. Observing human motion using far-infrared (flir) camera–some preliminary studies. In: CITESEER. Proceedings of the Thirteenth International Electrotechnical and Computer Science Conference ERK 2004, Portorož, Slovenia. [S.l.], 2004. p. 187–190. 25
- 54 DENNIS, P. Photodetectors: an introduction to current technology. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. 25, 26
- 55 JANELA de absorção Atmosférica. 2017. Disponível em: <a href="http://www.las.inpe.br/~cesar/Infrared/espectro.htm">http://www.las.inpe.br/~cesar/Infrared/espectro.htm</a>. Acesso em: 21 nov. 2017. 26
- 56 BARR, E. S. The infrared pioneers—ii. macedonio melloni. Infrared physics, Elsevier, v. 2, n. 2, p. 67IN1IN271–7074, 1962. 27
- 57 CASE, T. W. Notes on the change of resistance of certain substances in light. **Physical Review**, APS, v. 9, n. 4, p. 305, 1917. 27
- 58 ROGALSKI, A.; ANTOSZEWSKI, J.; FARAONE, L. Third-generation infrared photodetector arrays. Journal of applied physics, AIP, v. 105, n. 9, p. 4, 2009. 27
- 59 LEO, R. T. E. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. **IBM Journal of Research and Development**, IBM, v. 14, n. 1, p. 61–65, 1970. 27
- 60 LEVINE, B.; CHOI, K.; BETHEA, C.; WALKER, J.; MALIK, R. New 10  $\mu$ m infrared detector using intersubband absorption in resonant tunneling gaalas superlattices. **Applied Physics Letters**, AIP, v. 50, n. 16, p. 1092–1094, 1987. 27
- LEVINE, B. F. Quantum-well infrared photodetectors. Journal of Applied Physics, v. 74, n. 8, p. R1–R81, 1993. Disponível em:
  <a href="https://doi.org/10.1063/1.354252">https://doi.org/10.1063/1.354252</a>>. 27
- 62 ROGALSKI, A. Infrared detectors: an overview. Infrared Physics & Technology, v. 43, n. 3, p. 187–210, 2002. 27, 29
- 63 ROGALSKI, A. Infrared thermal detectors versus photon detectors: I. pixel performance. In: INTERNATIONAL SOCIETY FOR OPTICS AND PHOTONICS. Material Science and Material Properties for Infrared Optoelectronics. [S.l.], 1997. p. 14–25. 27

- JONES, R. C. Performance of detectors for visible and infrared radiation. In:
  Advances in Electronics and Electron Physics. [S.l.]: Elsevier, 1953. v. 5, p. 1–96.
  28
- DOWNS, C.; VANDERVELDE, T. E. Progress in infrared photodetectors since 2000.
  Sensors, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 13, n. 4, p. 5054–5098, 2013.
  29
- 66 LEVINE, B.; BETHEA, C.; GLOGOVSKY, K.; STAYT, J.; LEIBENGUTH, R. Long-wavelength 128x128 gaas quantum well infrared photodetector arrays.
  Semiconductor Science and Technology, IOP Publishing, v. 6, n. 12C, p. C114, 1991. 30
- 67 CANTRONIS SYSTEMS INC. Thermal Imaging, Research & Development Cameras. Disponível em: <a href="http://www.cantronics.com/index.php/thermal-cameras/thermal-imaging?id=128">http://www.cantronics.com/index.php/thermal-cameras/thermal-imaging?id=128</a>. Acesso em: 27 jan. 2019. 30
- 68 ADACHI, S. Gaas, alas, and  $Al_xGa_{1-x}As$ : Material parameters for use in research and device applications. Journal of Applied Physics, v. 58, p. R1–R29, 1985. 30, 31, 63
- 69 DU, Y. A.; SAKONG, S.; KRATZER, P. As vacancies, ga antisites, and au impurities in zinc blende and wurtzite gaas nanowire segments from first principles. **Physical Review B**, APS, v. 87, n. 7, p. 075308, 2013. 30
- 70 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. Solid state physics (saunders college, philadelphia, 1976). Appendix N, 2010. 30, 34, 36
- 71 ADACHI, S. Properties of semiconductor alloys: group-IV, III-V and II-VI semiconductors. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2009. v. 28. 31, 70
- 72 NING, C.-Z.; DOU, L.; YANG, P. Bandgap engineering in semiconductor alloy nanomaterials with widely tunable compositions. **Nature Reviews Materials**, Nature Publishing Group, v. 2, n. 12, p. 17070, 2017. 31
- HAO, M. R.; YANG, Y.; ZHANG, S.; SHEN, W. Z.; SCHNEIDER, H.; LIU, H. C. Near-room-temperature photon-noise-limited quantum well infrared photodetector.
  Laser & Photonics Reviews, Wiley Online Library, v. 8, n. 2, p. 297–302, 2014. 32
- 74 ALFEROV, Z. I. The history and future of semiconductor heterostructures from the point of view of a russian scientist. Physica Scripta, IOP Publishing, v. 1996, n. T68, p. 32, 1996. 32
- 75 SINGH, J. Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007. 32
- 76 CHELIKOWSKY, J. R.; COHEN, M. L. Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors. Physical Review B, APS, v. 14, n. 2, p. 556, 1976. 33

- 77 WASILEWSKI, Z.; LIU, H.; BUCHANAN, M. Studies of si segregation in gaas using current–voltage characteristics of quantum well infrared photodetectors. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena, AVS, v. 12, n. 2, p. 1273–1276, 1994. 33, 68, 69, 77
- 78 LIU, H.; WASILEWSKI, Z.; BUCHANAN, M.; CHU, H. Segregation of si δ doping in gaas-algaas quantum wells and the cause of the asymmetry in the current-voltage characteristics of intersubband infrared detectors. Applied physics letters, AIP, v. 63, n. 6, p. 761–763, 1993. 33, 68, 69
- 79 DATTA, S. Quantum Phenomena, Modular Series on Solid State Devices,
   Vol. 8. [S.l.]: Addison-Wesley, 1989. 34
- 80 TANAKA, R. Y.; PASSARO, A.; ABE, N. M.; SPEROTTO, L. K.; PEDROSO, D. P.; VIEIRA, G. S. Computer program for analysis and design of nanostructured semiconductor devices. In: IEEE. 2013 SBMO/IEEE MTT-S International Microwave Optoelectronics Conference (IMOC). [S.l.], 2013. p. 1–5. 36, 49
- 81 KOZLOWSKI, L. J.; WILLIAMS, G. M.; SULLIVAN, G. J.; FARLEY, C. W.; ANDERSON, R. J.; CHEN, J.; CHEUNG, D.; TENNANT, W.; DEWAMES, R. Lwir 128 × 128 GaAs/AlGaAs multiple quantum well hybrid focal plane array. IEEE Transactions on Electron Devices, IEEE, v. 38, n. 5, p. 1124–1130, 1991. 37
- 82 SARUSI, G. Qwip or other alternative for third generation infrared systems. Infrared Physics & Technology, v. 44, n. 5, p. 439 – 444, 2003. ISSN 1350-4495. Proceedings of the Workshop on Quantum Well Infrared Photodetectors. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1350449503001634>. 37
- SCHIMERT, T.; BARNES, S.; BROUNS, A.; CASE, F.; MITRA, P.; CLAIBORNE,
  L. Enhanced quantum well infrared photodetector with novel multiple quantum well
  grating structure. Applied physics letters, AIP, v. 68, n. 20, p. 2846–2848, 1996. 37, 41
- 84 CHOI, K.; CHEN, C.; TSUI, D. Corrugated quantum well infrared photodetectors for material characterization. Journal of Applied Physics, AIP, v. 88, n. 3, p. 1612–1623, 2000. 37
- 85 RAZEGHI, M. Technology of quantum devices. [S.l.]: Springer, 2010. 38
- 86 HOGLUND, L. Growth and characterisation of InGaAs-based quantum dots-in-a-well infrared photodetectors. 82 p. Doutorado em Física — Linköping University Electronic Press, 2008. 38
- 87 LIU, H.; STEELE, A.; BUCHANAN, M.; WASILEWSKI, Z. Dark current in quantum well infrared photodetectors. Journal of applied physics, AIP, v. 73, n. 4, p. 2029–2031, 1993. 38, 41, 42, 50
- 88 LIU, H.; BUCHANAN, M.; WASILEWSKI, Z.; CHU, H. Charge non-neutrality in the quantum well region of a gaas-algaas intersubband 9  $\mu$ m detector. Applied physics letters, AIP, v. 58, n. 10, p. 1059–1061, 1991. 39

- 89 LIU, H.; LI, L.; BUCHANAN, M.; WASILEWSKI, Z. Effect of the shape of the first barrier on quantum well infrared photodetector performance. Journal of applied physics, AIP, v. 82, n. 2, p. 889–892, 1997. 39
- 90 BARNHAM, K.; VVEDENSKY, D. Low-dimensional semiconductor structures: Fundamentals and device applications. [S.l.]: Cambridge university press, 2008. 40
- 91 YU, P. Y.; CARDONA, M. Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties. [S.l.]: Springer, 2010. 40
- 92 LI, N.; XIONG, D.-Y.; YANG, X.-F.; LU, W.; XU, W.-L.; YANG, C.-L.; HOU, Y.; FU, Y. Dark currents of gaas/algaas quantum-well infrared photodetectors. Applied Physics A, Springer, v. 89, n. 3, p. 701–705, 2007. 41
- 93 KANE, M. J.; MILLIDGE, S.; EMENY, M. T.; LEE, D.; GUY, R. P.;
  WHITEHOUSE, C. R. Performance trade offs in the quantum well infra-red detector.
  In: E. VINTER B., L. B. R. (Ed.). Intersubband Transitions in Quantum Wells.
  Boston: Springer, 1992. cap. 3, p. 31–42. 42, 43
- 94 DONCHEV, V.; BOURGOIN, J.; BOIS, P. Dark current through gaas/algaas multiple quantum wells. **Semiconductor science and technology**, IOP Publishing, v. 17, n. 6, p. 621, 2002. 43, 44, 45, 79
- 95 LEVINE, B. F.; BETHEA, C. G.; HASNAIN, G.; SHEN, V. O.; PELVE, E.;
  ABBOTT, R. R.; HSIEH, S. J. High sensitivity low dark current 10 m gaas quantum well infrared photodetectors. Applied Physics Letters, v. 56, n. 9, p. 851–853, 1990.
  43
- 96 SCHUBERT, E. Doping in III-V Semiconductors (Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering). [S.l.]: Cambridge University Press Cambridge, 1993. 44
- 97 LHUILLIER, E.; RIBET-MOHAMED, I.; NEDELCU, A.; BERGER, V.; ROSENCHER, E. Quantum transport in weakly coupled superlattices at low temperature. **Physical Review B**, APS, v. 81, n. 15, p. 155305, 2010. 45
- 98 FERNANDES, F. M. Fotodetectores infravermelhos de alta eficiência baseados em poços quânticos crescidos por epitaxia de feixes moleculares. 2013. 169 p. Tese (Doutorado em Física) — Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013. 48
- 99 TANAKA, R. Y.; PASSARO A.AND ABE, N. M. V.-B. J. M.; VIEIRA G. S. STEPHANY, S. Software tools for the design and analysis of quantum well, quantum wire and quantum dot devices. In: SBMO/IEEE MTT-S INT. MICROW. OPTOELECTRON. CONF., 2007. Proceedings...Piscataway: IEEE. [S.1.]: IEEE, 2007. 49
- 100 RESEARCH, J. Produts Cryogen Free Micromanipulated Probe Stations. 2019. https:

//www.janis.com/Products/productsoverview/MicromanipulatedProbeStations/ CryogenFreeMicromanipulatedProbeStations.aspx. Acessado em 21-01-2019. 50, 52

- 101 CRYOTRONICS, I. L. S. DT-670 Silicon Diodes. 2019. http://www.lakeshore.com/products/Cryogenic-Temperature-Sensors/ Silicon-Diodes/DT-670/pages/Specifications.aspx. Acessado em 21-01-2019. 50
- 102 DELFINO, C.; MENDONÇA, M.; VIEIRA, G.; PASSARO, A.; FERNANDES, F.; QUIVY, A. Use of a cryogenic probe station for measurement of activation energy of qwips. In: SIGE. 2014 XVI SIGE - Simpósio de aplicações operacionais em áreas de defesa. 2014. p. 13–16. Disponível em: <http://www.sige.ita.br/anais/XVISIGE/pdf/ST\_1\_3.pdf>. Acesso em: 21 nov. 2018. 52, 54
- 103 KEITHLEY INSTRUMENTS, INC. Impedance Measurement Handbook: A guide to measurement technology and techniques. Disponível em: <a href="https://literature.cdn.keysight.com/litweb/pdf/5950-3000.pdf">https://literature.cdn.keysight.com/litweb/pdf/5950-3000.pdf</a>>. Acesso em: 27 abril. 2019. 55
- 104 KEITHLEY INSTRUMENTS, INC. Fundamentals of Semiconductor C-V Measurements. Disponível em:

<https://www.scientific-devices.com.au/pdfs/WeTransfer-NZvJB6Cw/Capacitance-/Fundamentals%20of%20CV%20Measurement.pdf>. Acesso em: 27 abril. 2019. 55

- 105 AGILENT. B1500A Semiconductor Device Analyzer Data Sheet, Manual.
  2014. Access date: 02 maio de 2018. Disponível em: <a href="https://www.keysight.com/main-/editorial.jspx?cc=BR&lc=por&ckey=2317124&nid=-33019.0&id=2317124>">https://www.keysight.com/main-/editorial.jspx?cc=BR&lc=por&ckey=2317124&nid=-33019.0&id=2317124></a>.
  59
- 106 HARRIS, J.; CLEGG, J.; BEALL, R.; CASTAGNE, J.; WOODBRIDGE, K.; ROBERTS, C. Delta-doping of gaas and alo. 33ga0. 67as with sn, si and be: a comparative study. **Journal of crystal growth**, Elsevier, v. 111, n. 1-4, p. 239–245, 1991. 68
- 107 MURAKI, K.; FUKATSU, S.; SHIRAKI, Y.; ITO, R. Surface segregation of in atoms during molecular beam epitaxy and its influence on the energy levels in ingaas/gaas quantum wells. **Applied Physics Letters**, AIP, v. 61, n. 5, p. 557–559, 1992. 68
- 108 PEDROSO, D. de M.; PASSARO, A. CA 2016-011 Modelagem teórica de curvas I-V e de energias de ativação em amostras de múltiplos poços quânticos considerando segregação de dopantes. 2016. 1–12 p. 69
- 109 TAN, Z.; GUO, X.; CAO, J.; LI, H.; WANG, X.; FENG, S.; WASILEWSKI, Z.; LIU, H. Temperature dependence of current–voltage characteristics of terahertz quantum-well photodetectors. **Semiconductor Science and Technology**, IOP Publishing, v. 24, n. 11, p. 115014, 2009. 70
- 110 VURGAFTMAN, I.; MEYER, J. á.; RAM-MOHAN, L. á. Band parameters for iii–v compound semiconductors and their alloys. **Journal of applied physics**, AIP, v. 89, n. 11, p. 5815–5875, 2001. 70

- VAINSHTEIN, S.; YUFEREV, V.; KOSTAMOVAARA, J. Ultrahigh field multiple gunn domains as the physical reason for superfast (picosecond range) switching of a bipolar gaas transistor. Journal of applied physics, AIP, v. 97, n. 2, p. 024502, 2005.
  71
- 112 SIBILLE, A.; PALMIER, J.; MOLLOT, F.; WANG, H.; ESNAULT, J. Negative differential conductance in gaas/alas superlattices. **Physical Review B**, APS, v. 39, n. 9, p. 6272, 1989. 71
- 113 ALTUNÖZ, S.; ÇELIK, H.; CANKURTARAN, M. Temperature and electric field dependences of the mobility of electrons in vertical transport in gaas/ga1- y alyas barrier structures containing quantum wells. **Open Physics**, Versita, v. 6, n. 3, p. 479–490, 2008. 78
- QUAY, R.; MOGLESTUE, C.; PALANKOVSKI, V.; SELBERHERR, S. A temperature dependent model for the saturation velocity in semiconductor materials.
   Materials Science in Semiconductor Processing, Elsevier, v. 3, n. 1-2, p. 149–155, 2000. 78
- 115 MIR, L. E.; BOURGOIN, J. Defect-enhanced electron transport through semiconductor barriers. physica status solidi (b), Wiley Online Library, v. 207, n. 2, p. 577–594, 1998. 78
- 116 ALTIN, E.; HOSTUT, M.; ERGUN, Y. Barrier lowering effect and dark current characteristics in asymmetric gaas/algaas multi quantum well structure. **Applied Physics A**, Springer, v. 105, n. 4, p. 833–839, 2011. 79
- 117 PANDA, S.; PANDA, B.; MISHRA, S. Dynamical screening effects on dark current in a quantum-well infrared photodetector. **Physical Review B**, APS, v. 69, n. 19, p. 195304, 2004. 80

## FOLHA DE REGISTRO DO DOCUMENTO <sup>2</sup>. DATA <sup>1.</sup> CLASSIFICAÇÃO/TIPO <sup>3.</sup> DOCUMENTO N° 4. N° DE PÁGINAS TD 4 de Julho de 2019 DCTA/ITA/TD-013/2019 92<sup>5.</sup> TÍTULO E SUBTÍTULO: MELHORIAS EM MODELOS DE TRANSPORTE ELETRÔNICO DE QWIPS <sup>6.</sup> AUTOR(ES): **Tiago Gonçalves Santos** 7. INSTITUIÇÃO(ÕES)/ORGÃOS) INTERNO(S)/DIVISÃO(ÕES): Instituto Tecnológico de Aeronáutica – ITA <sup>8.</sup> PALAVRAS-CHAVE SUGERIDAS PELO AUTOR: Superredes; Poços quânticos multiplos; Campo elétrico não uniforme; Baixas temperatura, Corrente de escuro, Capacitância, Energia de ativação. <sup>9.</sup> PALAVRAS-CHAVE RESULTANTES DE INDEXAÇÃO: Dispositivos de poços quânticos; Campos elétricos; Energia de ativação; Baixa temperatura; Física. <sup>10.</sup> APRESENTAÇÃO: (X) Nacional () Internacional ITA, São José dos Campos. Curso de Doutorado. Programa de Pós-Graduação em Física. Área Física Atômica e Molecular. Orientador: Prof. Dr. Gustavo Voares Vieira. Defesa em 28/06/2019. Publicada em 04 de junho de 2019. <sup>11.</sup> RESUMO: Neste trabalho, modelos tradicionais de transporte eletrônico em sensores de infravermelho a poços quânticos, QWIPs, são reavaliados à luz de dados experimentais obtidos de um QWIP de GaAs/AlGaAs, com poços dopados tipo n, projetado para ter pico de resposta em 9,3 $\mu m$ . É conhecido que esses fotodetectores apresentam transporte eletrônico em regimes diferentes, a depender da faixa de temperatura. Sendo assim, foram realizadas análises para baixas temperaturas, e a temperaturas mais elevadas. Para medições a baixas temperaturas, as análises das curvas de capacitância versus tensão, C-V, foram utilizadas para identificar a origem da diferença entre as medidas de corrente de escuro, I-Vs, dos dispositivos QWIPs fabricados simultaneamente no mesmo substrato, isto é, possuindo as mesmas camadas epitaxiais e mesmas condições de processamento. Os dispositivos têm curvas I-V semelhantes para tensões baixas, mas diferem significativamente para as tensões mais altas. É mostrado que o acúmulo de carga dentro da estrutura de poços quânticos é responsável por alterar o mecanismo de condução a tensões mais baixas do que seria esperado se o campo elétrico fosse uniforme sobre a estrutura. Esse acúmulo de carga varia de dispositivo para dispositivo, indicando uma influência das características locais das camadas. Apesar dos resultados apontarem para um campo elétrico não uniforme, como é identificado pelas medidas C-Vs, nenhum indicativo relacionado à formação e expansão de domínios de campo elétrico está presente nas curvas I-V, ou seja, não foi observado nenhum patamar de corrente de escuro, nem séries de picos de condutividade diferencial negativa. Medidas de I-Vs a temperaturas entre 60 a 120 K foram usadas para determinação das energias de ativação da corrente termicamente induzida nos dispositivos e sua dependência com a tensão aplicada. As energias de ativação são calculadas pressupondo que o mecanismo de emissão termiônica seja dominante, o que, a princípio, levaria à uma dependência linear da energia de ativação com a tensão aplicada, no entanto, observou-se um comportamento bastante distinto do esperado. Uma parceria com outro aluno de doutorado, Diogo de Moura Pedroso, levou a um modelo capaz de reproduzir o comportamento observado da energia de ativação, incluindo as assimetrias, mantendo a mesma mobilidade dos elétrons para ambas as polaridades.

<sup>12.</sup> GRAU DE SIGILO: (X) **OSTENSIVO** 

() **RESERVADO** 

() **SECRETO**