Simulação de Fotodetectores Infravermelhos a Poços Quânticos empregando o Programa ATLAS.

André Gustavo de Souza Curityba, Jayr de Amorim Filho, Fabio Durante P. Alves.
(Divisão de Engenharia Eletrônica) Instituto Tecnológico de Aeronáutica – Praça. Mal. Eduardo Gomes, 50. Vila das Acácias – S. José dos Campos – SP. CEP 12228-900

***Resumo* – Os Fotodetectores Infravermelhos a Poços Quânticos (*Quantum Wells Infrared Photodetectors* - *QWIP*) são dispositivos capazes de "perceber" transições ópticas (interbandas e/ou intrabandas) entre níveis discretos de energia. O emprego de programas para simulação destes dispositivos tem, em função de sua versatilidade e baixo custo, demonstrado ser uma alternativa viável para este fim. A partir desta motivação, o objetivo deste trabalho é propor um método para simulação de fotodetectores infravermelhos a poços quânticos empregando o ATLAS (Silvaco International), que é um programa dedicado à simulação de dispositivos semicondutores. Por fim, será apresentado o impacto esperado por este artigo no contexto da Força Aérea Brasileira (FAB).**

***Palavras-chaves* – Transições interbandas e intrabandas, espectro de absorção, simulação de dispositivos.**

I. INTRODUÇÃO

No ano de 1969, os trabalhos conduzidos por Esaki e Tsu[1] foram os primeiros a propor a idéia dos dispositivos a poços quânticos. Portanto, foi somente no ano de 1977 que Esaki *et al*[1] sugeriram, pela primeira vez, o emprego destes dispositivos para realizar a detecção da radiação infravermelha. No ano de 1987, nas instalações da *Bell Laboratories*, Levine *et al*[2] apresentaram os primeiros resultados experimentais de um fotodetector a poços quânticos para o comprimento de onda de 10.8μm com detectividade de 0.52A/W. Pesquisas mais recentes conduziram ao desenvolvimento de estruturas mais complexas com elevada sensibilidade espectral, formadas por matrizes de fotodetectores a poços quânticos.

Atualmente, os fotodetectores infravermelhos a poços quânticos podem ser encontrados nas mais diversas aplicações, tais como na área espacial (observação terrestre, sensoriamento remoto), e na área da medicina, através do diagnóstico de doenças[3]. Contudo, cabe destacar a crescente aplicação militar destes dispositivos, em função das suas características de alta sensibilidade, seletividade e capacidade multiespectral. Nesta área, os fotodetectores a poços quânticos podem ser observados em sensores embarcados ou não, e em sistemas de visão noturna[4].

II. ASPECTOS TEÓRICOS DOS FOTODETECTORES INFRAVERMELHOS A POÇOS QUÂNTICOS

A. Transições ópticas em poços quânticos

Em poços quânticos, a incidência de um fóton pode provocar transições entre diferentes estados nestas estruturas. Para efeito neste trabalho, são considerados dois tipos de transições possíveis (Fig.1): (i) Transições interbandas, onde elétrons na banda de valência são excitados para a banda de condução. (ii) Transições intrabandas/intersubbandas, onde as transições de elétrons ocorrem entre subbandas dentro de uma mesma banda (condução ou valência)[5].

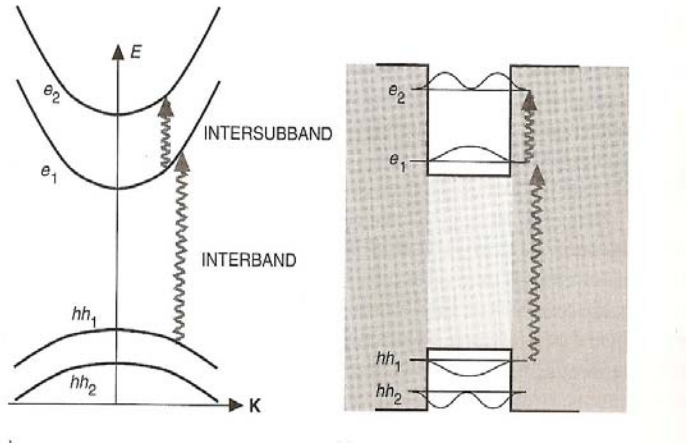

Fig.8 Transições Interbanda e Intersubbanda/Intrabanda no espaço recíproco (esquerda) e no espaço real (direita)[5].

Estas transições podem ainda ocorrer entres estados ligados (*bound-to-bound transitions*), ou entre um estado ligado e o contínuo (*bound-to-continuum transitions*).

B. Princípio de operação dos fotodetectores infravermelhos a poços quânticos

O princípio de operação dos fotodetectores infravermelhos a poços quânticos pode estar baseado em transições interbandas ou intrabandas/intersubbandas. Para efeito deste artigo, será descrito o mecanismo de fotodetecção envolvendo transições intersubbandas.

André Gustavo de Souza Curityba, agscurityba@ig.com.br

Ao projetar um fotodetector a poços quânticos, a largura do poço e a composição do material da barreira são selecionadas de forma que este poço tenha dois estados confinados, cuja diferença de energia entre os mesmos seja igual à energia do fóton que se pretende detectar. O nível de energia excitado é posicionado o mais próximo possível do topo da barreira, para que a aplicação de um campo elétrico externo provoque o tunelamento de portadores (elétrons ou lacunas) através desta e, por conseguinte, ocorra a geração de fotocorrente (Fig.2).

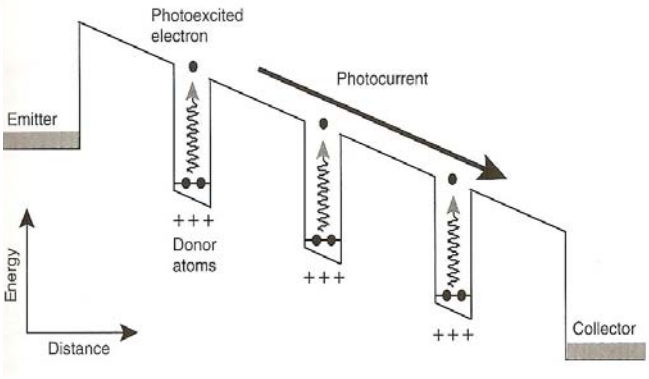

Fig. 2 Operação de Fotodetector a Poços Quânticos Múltiplos sob aplicação de um campo elétrico [5]

III. O PROGRAMA ATLAS E A SIMULAÇÃO DE FOTODETECTORES A POÇOS QUÂNTICOS

A. O programa ATLAS

O Programa ATLAS da Silvaco International é destinado à simulação de dispositivos semicondutores em uma, duas ou três dimensões. Através das ferramentas que o compõe, é possível extrair e analisar as características elétricas, ópticas e de ruído dos dispositivos a serem simulados[6].

A programação no ATLAS segue uma seqüência predeterminada de declarações (*statements*) (Fig.3):

Group	*Statements*
1. Structure Specification	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Material Models Specification	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Numerical Method Selection	METHOD
4. Solution Specification	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Results Analysis	EXTRACT TONYPLOT

Fig. 3 Grupos de declarações empregadas no ATLAS[6]

Estas declarações encontram-se distribuídas em cinco grupos, cada qual com suas respectivas atribuições no processo de simulação de dispositivos no ATLAS[6].

B. A Simulação de dispositivos semicondutores no ATLAS

No ATLAS, a operação de dispositivos semicondutores é modelada através da solução acoplada de, no máximo, seis equações diferenciais não lineares. Para obter estas soluções, o ATLAS dispõe de métodos numéricos, que podem ser selecionados em função da precisão ou da rapidez desejada para realizar a simulação[6].

O domínio físico das simulações no ATLAS é definida por uma malha formada por linhas horizontais e verticais (Fig.4):

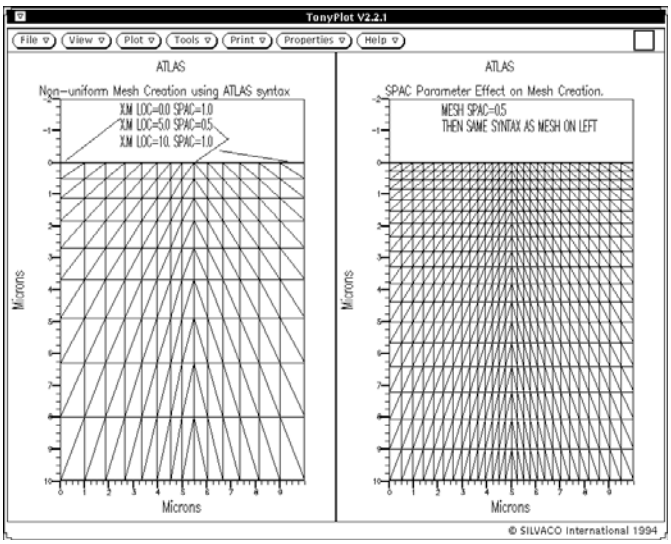

Fig.4 Exemplo de malha definida pelo programa ATLAS[6]

Nesta malha, serão definidos os materiais que compõe o dispositivo a ser simulado. A maior ou menor quantidade de linhas verticais e horizontais irá definir o grau de precisão que se pretende obter na simulação[6].

C. Simulando efeitos Quânticos no ATLAS

Há diversos modelos disponíveis no ATLAS que possibilitam simular os efeitos do confinamento quântico. Dentre os quais, a solução autoconsistente da equação Schrödinger-Poisson (Fig.5):

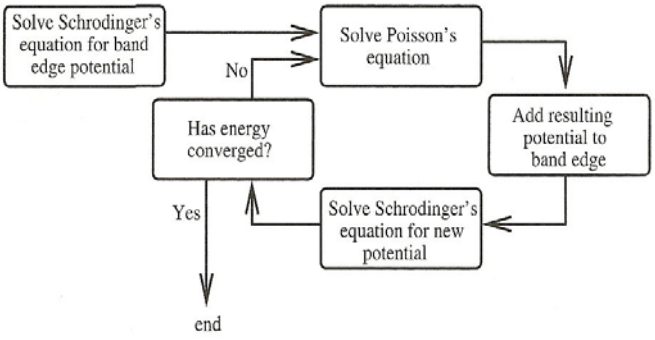

Fig.5 Diagrama de blocos do processo de obtenção da solução autoconsistente de Schrödinger-Poisson [7]

Através desta última, são obtidos os níveis de energia dos portadores (elétrons ou lacunas) confinados em um poço quântico, assim como suas respectivas funções de onda. Para tal, o ATLAS irá resolver a equação de Schrödinger, que para o caso de elétrons confinados em uma dimensão, é apresentada na expressão (1):

$$-\frac{h^2}{2}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{m_y^v(x,y)}\frac{\partial \psi_{iv}}{\partial y}\right)+E_C(x,y)\psi_{iv}=E_{iv}\psi_{iv} \qquad (1)$$

Onde E_C corresponde ao potencial na banda de condução, $m_y^v(x,y)$ é a massa efetiva do elétron, dependente espacialmente, E_{iv} são os autovalores de energia e ψ_{iv} suas respectivas funções de onda. Na solução da equação de Schrödinger para lacunas, o ATLAS também emprega a expressão (1), porém, substituindo nesta a massa efetiva para lacunas e o potencial $-E_V(x,y)$, para a banda de valência. Contudo, a restrição imposta pelo ATLAS não permite o cálculo simultâneo dos autovalores e respectivas funções de onda para elétrons e lacunas[6].

C. Simulação de Fotodetectores Infravermelhos a Poços Quânticos empregando o ATLAS

Após descrever o princípio de funcionamento dos fotodetectores a poços quânticos e apresentar um breve resumo sobre o ATLAS, o próximo passo deste trabalho é apresentar uma proposta de método para a simulação destes dispositivos empregando o referido programa.

Para realizar a simulação de fotodetectores a poços quânticos, foram extraídos dados do dispositivo idealizado por Durante[8], que foi modelado para realizar a detecção na faixa do LWIR (*Long-Wavelength Infrared*). A estrutura deste detector é composta por vinte repetições de GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ (arseneto de gálio / arseneto de gálio e alumínio). As camadas de GaAs (poço) são altamente dopadas ($0.5x10^{18}cm^{-3}$ de silício) e possuem a largura de 52Å. As camadas de $Al_xGa_{1-x}As$ (barreiras) possuem a largura de 300Å e fração molar de x=0.26. Contudo, para efeito deste trabalho a simulação realizada será para a estrutura de um poço único ($Al_xGa_{1-x}As$ /GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$), adicionados dois eletrodos onde serão aplicadas as tensões de polarização.

A partir das dimensões e da composição do poço quântico usado como referência, já se torna possível simular esta estrutura através do ATLAS. Desta forma, nesta primeira simulação o objetivo será calcular o perfil da banda de condução, os três primeiros níveis de energia e suas respectivas funções de onda para elétrons, onde será empregada tensão de polarização nula. Para tal, será instruído nas linhas de comando do ATLAS que seja procedida a solução autoconsistente da equação de Schrödinger-Poisson para elétrons. Após proceder a simulação no ATLAS, o resultado obtido (Fig.6) apresentou os dois primeiros níveis de energia confinados no interior do poço de potencial, onde o segundo nível de energia ocupou a posição bem próxima ao topo do perfil da banda condução, enquanto o terceiro nível obtido foi localizado no lado externo do poço.

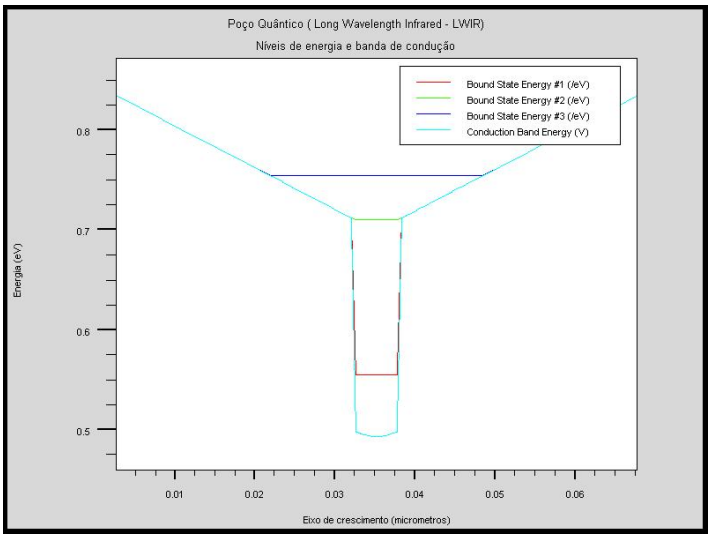

Fig.6 Três autovalores de energia do poço quântico para tensão de polarização nula.

Por sua vez, as três funções de onda calculadas nesta simulação são abaixo ilustradas (Fig.8):

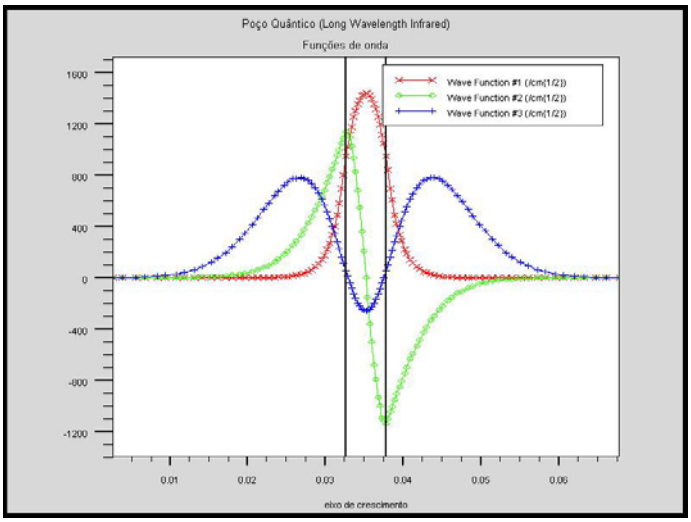

Fig.7 Funções de onda obtidas pelo ATLAS para tensão de polarização nula.

Comparando a simulação realizada no ATLAS (Fig.6) com os resultados presentes no trabalho de Durante[8], podem ser destacados alguns pontos importantes a serem comentados. Inicialmente, pode-se verificar que, em ambos os resultados, a estrutura simulada apresenta dois estados confinados, onde o segundo nível de energia mais elevado se encontra na borda do referido poço de potencial. A diferença verificada é que, no resultado obtido por Durante[8], este nível se encontra a 2.5meV, enquanto no ATLAS este valor é de aproximadamente 10meV. Outro importante aspecto a ser comentado, que está diretamente

relacionado ao desempenho dos fotodetectores, é o comprimento de onda de absorção[5], representado pela expressão (1):

$$\lambda(\mu m) = \frac{1.24}{E(eV)} \qquad (1)$$

onde $E(eV)$ é a diferença entre os níveis de energia, dos quais se pretende que ocorra a absorção. No poço modelado por Durante[8], o valor deste comprimento de onda é de 8,7µm. Aplicando a expressão (1) no modelo simulado no ATLAS, o valor obtido foi de 8,05µm.

Através das funções de onda obtidas pelo ATLAS (Fig.7), também é possível extrair dados úteis para a simulação de fotodetectores a poços quânticos. Por exemplo, a matriz de elemento dipolo[2][7] ilustrada na expressão (2), que é proporcional à probabilidade (*P*) de ocorrer transições entre estados em um poço quântico.

$$P \infty \left| \langle \psi_f | \hat{z} | \psi_i \rangle \right|^2 \qquad (2)$$

onde ψ_i representa a função de onda correspondente ao estado inicial, e ψ_f a função de onda correspondente ao estado final.

Empregando-se a ferramenta Tonyplot[6] do ATLAS, é possível obter-se o valor para a matriz de elemento dipolo entre os dois estados confinados no poço usado como referência(Fig.8).

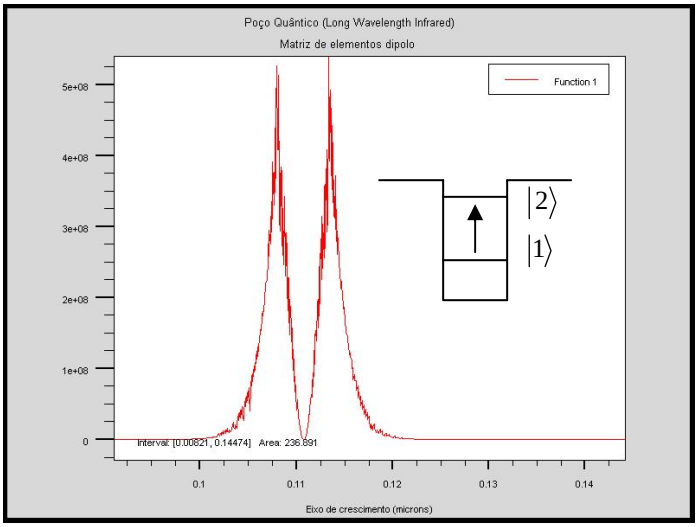

Fig.8 Gráfico da matriz elemento dipolo calculada para transição entre os dois estados confinados no poço para tensão de polarização nula.

Para obter a matriz de elemento dipolo, foi necessário gerar uma função no Tonyplot, que representasse as operações matemáticas entre as funções de onda relativas aos estados confinados. Em seguida, através da ferramenta de integração deste aplicativo, a área do gráfico obtido foi integrada e este valor elevado ao quadrado para, enfim, obter-se o valor para a matriz de elemento dipolo.

Outro aspecto importante para a simulação de fotodetectores a poços quânticos é a obtenção da velocidade de deriva, que depende diretamente da mobilidade dos portadores. Desta forma, o objetivo das simulações a seguir é medir a variação desta velocidade no interior do poço quântico, dadas diferentes condições de temperatura e tensão de polarização aplicada. Para tal, foi adotado o modelo do ATLAS dependente da aplicação de um elevado campo elétrico externo (*Parallel Electric Field-Dependent Mobility*) representado pela expressão (3)[6]:

$$\mu_n(E) = \mu_{n0} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{\mu_{n0}^{E}}{VSATN} \right)^{BETAN}} \right]^{\frac{1}{BETAN}} \qquad (3)$$

onde μ_{n0} é a mobilidade de elétrons para um campo elétrico reduzido (modelo dependente da temperatura), *VSATN* é a velocidade de saturação[5] para elétrons (modelo dependente da temperatura), *E* representa o campo elétrico externo e *BETAN* é um parâmetro de mobilidade empregado pelo modelo[6].

Escolhido o modelo de mobilidade e estabelecidas as condições da simulação, foram então procedidas as simulações, empregando a mesma estrutura usada anteriormente como referência. O primeiro gráfico da velocidade de deriva (Fig.9) foi obtido para a temperatura de 300K e a tensão de polarização (Vbias) de 0.5 Volt.

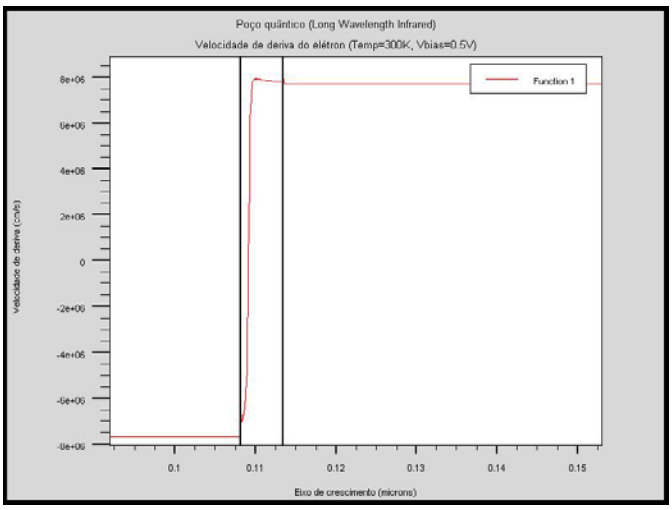

Fig.9 Velocidade de deriva do elétron no poço (300K, Vbias =0.5V)

Nesta primeira simulação, verificou-se que, inicialmente, a velocidade de deriva do elétron elevou-se acentuadamente no início do poço (lado esquerdo), para em seguida estabilizar seu valor em, aproximadamente, $7{,}75 \times 10^6$ cm/s.

Na simulação seguinte (Fig.10), a velocidade de deriva para o elétron foi calculada para a mesma tensão de polarização de 0.5 volt, desta vez para a temperatura de 50K.

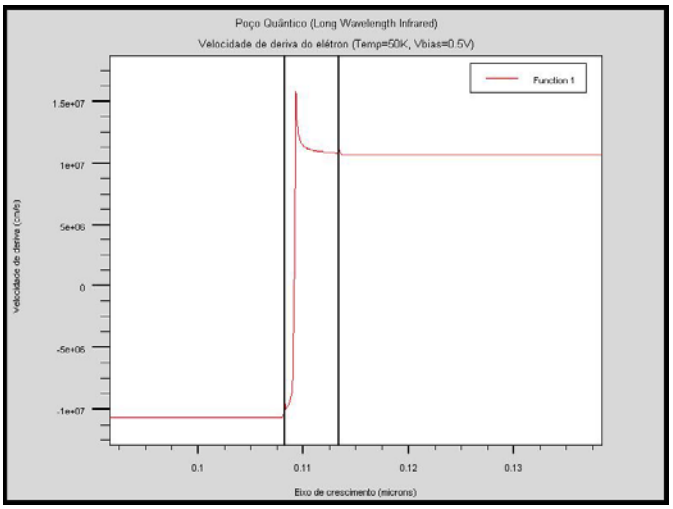

Fig. 10 Velocidade de deriva do elétron no poço (50K, Vbias= 0.5V)

Comparando este último resultado (Fig.10) com o resultado obtido na primeira simulação (Fig.9), verifica-se que, em ambos resultados, a velocidade de deriva aumenta acentuadamente no início do poço, para depois se estabilizar. Contudo, para a temperatura de 50K, a velocidade de deriva, estabiliza-se em um valor superior ao da simulação realizada para a temperatura de 300K, aproximadamente $1{,}1x10^7$ cm/s. A diferença entre as duas velocidades obtidas se justifica na dependência da velocidade de saturação em relação à temperatura.

IV. CONCLUSÕES

A partir dos resultados apresentados neste artigo, pode-se verificar que, através do programa ATLAS e suas ferramentas, é possível simular a estrutura de alguns Fotodetectores Infravermelhos a Poços Quânticos, assim como extrair alguns dados importantes para modelar este tipo de dispositivo. Contudo, ainda restam características a serem obtidas no ATLAS, para que um fotodetector a poços quânticos seja simulado por completo empregando este programa. Por exemplo, a probabilidade de tunelamento, importante dado para a obtenção da corrente de escuro, requer um modelo adequado para medir a probabilidade de portadores tunelarem pelas barreiras, em função de um campo elétrico externo aplicado. Embora o ATLAS possua alguns modelos disponíveis para simular o tunelamento, a aplicação destes é voltada para interfaces semicondutor/metal e semicondutor/isolante. Desta forma, deve-se explorar outros recursos do ATLAS, a fim de obter um método para simular este fenômeno.

Por fim, cabe ressaltar que, as simulações apresentadas neste trabalho foram realizadas em poços quânticos simples (*single quantum wells*), pois são abordagens iniciais, com o objetivo de verificar a consistência do modelo para, futuramente, simular estruturas mais complexas.

V. IMPACTO PARA A FORÇA AÉREA BRASILEIRA

Motivado pelas recentes descobertas petrolíferas e os questionamentos internacionais sobre a soberania da Amazônia, o tema Defesa Nacional deixou o âmbito da caserna, para fazer parte da agenda do Governo e despertar interesse na sociedade. Face este novo cenário, as discurssões acerca do reaparelhamento das Forças Armadas tem buscado soluções diferentes das tomadas anteriormente, onde o produto (armamento, aeronave, navio, etc.) era comprado na "prateleira", ou seja, o fornecedor vende o produto sem haver o compromisso da transferência de tecnologia. Desta forma, a postura adotada pelo atual Ministério da Defesa foi a de reativar nosso parque industrial, promovendo a soberania nacional através do desenvolvimento de tecnologias nacionais, reduzindo a dependência internacional de itens militares considerados estratégicos.

Com este intuito, o objetivo deste trabalho é promover o desenvolvimento da sensível área de fotodetectores infravermelhos a poços quânticos no âmbito nacional. Através da pesquisa e desenvolvimento destes dispositivos, é possível para a Força Aérea Brasileira obter sensores com elevada sensibilidade, seletividade e capacidade multiespectral, desta forma contribuindo para elevar o poder dissuasório da força.

VI. REFERÊNCIAS

[1]B. R. Nag, *Physics of Quantum Well Devices*, pp. 1-5, Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 2000.

[2]B. F. Levine, "Quantum Well Infrared Photodetectors," *Journal of Applied Physics*, Vol. 74, No. 8, pp. 1-81, 1993.

[3]S.D. Guanapala, "Applications of Long-wavelength 256x256 Quantum Well Infrared Photodetector (QWIP) Hand-held Camera", *Infrared Technology and Applications XXIII*, Vol. 3061, No.292, pp. 4-6, 1997.

[4]Gabby Sarusi, "QWIP or other alternative for third generation infrared systems", *Infrared Physics & Technology*, Vol. 44, pp.441-444, 2003.

[5]Emanuel Rosencher and Borge Vinter, *Optoelectronics*, pp. 258-360, Cambridge University Press, London, 2002.

[6]SILVACO International, ATLAS User's Manual, Vol.1 2-13, Califórnia, USA, 2005.

[7]Paul Harrison, *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics*, pp. 112-336, John Wiley & Sons Inc., New York, 2001.

[8]Alves, F. D. P. Design and Analysis of a Multicolor Quantum Well Infrared Photodetector. United States Naval Postgraduate School Master´s Thesis. September 2005.