Trabalho Individual apresentado à Divisão de Engenharia Eletrônica do Instituto Tecnológico de Aeronáutica como parte dos requisitos para a obtenção do certificado de Especialista em Análise de Ambiente Eletromagnético.

Ali Kamel Issmael Junior – Capitão-Tenente (EN)

ESTUDO, MODELAMENTO E SIMULAÇÃO DAS PRINCIPAIS FIGURAS DE MÉRITO DE FOTODETECTORES INFRAVERMELHOS A POÇOS QUÂNTICOS.

Trabalho Individual aprovado em sua versão final pelos abaixo assinados:

Fabio Durante Pereira Alves – Ten Cel Av Orientador

Ricardo Augusto Tavares Santos – Cap Av Orientador

Prof. Dr. José Edimar Barbosa Oliveira Coordenador do CEAAE

Campo Montenegro São José dos Campos, SP - Brasil 2007

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)

Divisão Biblioteca Central do ITA/CTA

Issmael Jr., Ali Kamel "Estudo, modelamento e simulação das principais figuras de mérito de fotodetectores infravermelhos à poços quânticos."/ Ali Kamel Issmael Junior. São José dos Campos, 2007. Número de folhas no formato 106f.

Monografia – Curso de Especialização em Análise do Ambiente Eletromagnético Área de concentração: Guerra Eletrônica.

Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2007. Orientadores: Fabio Durante Pereira Alves, D. Sc. and Ricardo Augusto Tavares Santos, M. Sc.
1. Fotodetectores. 2. Poços Quânticos 3. Caracterização 4.Aplicações militares
I. Comando Geral de Tecnologia Aeroespacial. Instituto Tecnológico de Aeronáutica. Divisão de Engenharia

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

Issmael Jr., Ali Kamel. "Estudo, modelamento e simulação das principais figuras de mérito

de fotodetectores infravermelhos à poços quânticos".2007. Total de folhas: 106. Monografia -

Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos.

CESSÃO DE DIREITOS

Eletrônica. II. Título

NOME DO AUTOR: CT(EN) ALI KAMEL ISSMAEL JUNIOR

TÍTULO DO TRABALHO: "Estudo, modelamento e simulação das principais figuras de mérito

de fotodetectores infravermelhos à poços quânticos".

TIPO DO TRABALHO/ANO: Monografia / 2007

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

CT (EN) ALI KAMEL ISSMAEL JUNIOR

Rua Batista das Neves nº 38/ ap. 403 – Rio Comprido – CEP: 20261-020 – Rio de Janeiro/RJ.

ESTUDO, MODELAMENTO E SIMULAÇÃO DAS PRINCIPAIS FIGURAS DE MÉRITO DE FOTODETECTORES INFRAVERMELHOS À POÇOS QUÂNTICOS.

Ali Kamel Issmael Junior – Capitão-Tenente (EN)

Composição da Banca Examinadora:

Prfa. Dra. Lara Kuhl Teles	ITA	Presidente
Prf. Dr. Marcelo Marques	ITA	Membro
Prf. Dr. Jayr de Amorim Filho	ITA	Membro
Cap Av Ricardo Augusto Tavares Santos	ITA	Orientador

DEDICATÓRIA

À minha esposa Janayna.

AGRADECIMENTOS

À minha esposa Janayna, minha mãe Maria de Fátima e meu padrasto Roberto, pelo apoio fundamental em mais este desafio de minha vida.

Ao Almirante Uzêda, ao Comandante Péricles, ao Comandante Gomes Braga, à Comandante Marília, ao Comandante Ricardo Coutinho, ao Comandante Ávila, à Comandante Gelza e aos amigos da Diretoria de Sistemas de Armas da Marinha, pela confiança em mim depositada para a realização do Curso de Especialização em Análise de Ambiente Eletromagnético.

Ao Prof. Dr. José Edimar, pela forma como me motivou e mostrou que o único caminho para a evolução do ser humano e do nosso país, é o da educação.

Aos meus orientadores da FAB, Coronel Durante e Capitão Tavares, que me deram os conhecimentos e o suporte necessário para concretizar este trabalho.

À professora Lara e ao professor Jayr, pelos conselhos e sugestões na área de Física Quântica, tema tão difícil para um iniciante como eu.

Aos companheiros da turma CEAAE-2006 e os novos amigos do CTA e do ITA, pela grande amizade que me ajudou a superar os momentos de saudade de minha família. Que a nossa amizade perdure por longo do tempo, fortalecendo cada vez mais a união das Forças Armadas do Brasil.

Aos amigos do LabGE, Felipe, Sargento Euphrásio e Soldado Carreiro, pelo suporte administrativo que descomplicou os entraves burocráticos à nossa turma.

RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo dos processos de detecção de radiação infravermelha que utilizam a tecnologia de poços quânticos. Modelos matemáticos das principais figuras de mérito, tais como coeficiente de absorção, corrente de escuro, eficiência quântica, ganho e responsividade, disponíveis na literatura especializada, são estudados, comparados e implementados em MatLab. Os resultados das simulações numéricas são comparados com dados experimentais publicados nas referências ^{[4], [5] e [8]} e mostram que os modelos, convenientemente utilizados, apresentam grande potencialidade para serem utilizados em projetos de dispositivos reais.

ABSTRACT

This work presents a study of quantum well infrared photodetectors. Mathematical models of the main figures of merit, such as absorption coefficient, dark current, quantum efficiency, fotocondutive gain and responsivity, available in specialized literature, are studied, compared and implemented in MatLab. The results of the numerical simulations are compared with experimental data published in the references ^{[4], [5] and [8]} and show that the models, conveniently used, present great potentiality to be used in projects of actual devices.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	ASPECTOS TEÓRICOS	17
2.1	Definições	17
2.2	Radiação infravermelha	
2.3	Fontes de radiação infravermelha	
2.4	Radiação Infravermelha na Atmosfera	21
2.5	Detecção Infravermelha (Fotodetectores)	23
2.6	Fotodetectores a poços quânticos - "QWIPs"	
2.7	Teoria de Poços Quânticos	
2.7.1	Confinamento Quântico	
2.7.2	Heteroestruturas	
2.7.3	Transições nos poços quânticos	
2.7.4	Fotocorrente nos "QWIPs"	
2.8	Figuras de Mérito	
2.8.1	Espectro de Absorção	
2.8.2	Eficiência Quântica e Ganho de fotocondutividade	
2.8.3	Responsividade	
2.8.4	Corrente de escuro	
2.8.5	Detectividade	
3	SIMULAÇÕES E RESULTADOS	
3.1	Espectro de Absorção	46
3.2	Ganho de Fotocondutividade	
3.3	Eficiência Quântica	49
3.4	Corrente de Escuro	
3.5	Responsividade	

4	CONCLUSÃO	
4.1	Resultrados Alcançados	61
4.2	Considerações finais	
4.3	Propostas para trabalhos futuros	
REFE	ERÊNCIAS	
ANEX	XO - ROTINAS EM MATLAB UTILIZADAS	

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1 – Subdivisões da banda Infravermelha1	19
Tabela 3.1 – Amostras utilizadas nas simulações4	15
ÍNDICE DE FIGURAS	
Figura 2.1 – O espectro eletromagnético e a localização da radiação infravermelha 1	18
Figura 2.2 – Radiância Espectral de um Corpo Negro com área de emissão constante2	20
Figura 2.3 – Espectro de transmissão da atmosfera terrestre, nas faixas do infravermelh	10
próximo, médio e longo2	22
Figura 2.4 – Esquema de operação de um detector fotocondutor e o circuito de medição de	da
radiação incidente	24
Figura 2.5 – Criação de um par elétron-lacuna através de transição direta e indireta resultad	do
da absorção de um fóton2	25
Figura 2.6 – Transições intrínsecas e extrínsecas com respeito a perfis verticais das energia	as
das bandas2	26
Figura 2.7 – Diagrama de Bandas de um poço quântico. A absorção entre sub-bandas poc	de
levar a trocas entre os níveis de energia de um poço quântico associado a banda de conduçã	ão
(dopado com cristal tipo n) ou a banda de valência (dopado com cristal tipo p)2	27
Figura 2.8a – Imagem infravermelha gerada por uma câmera com detectores QWIP2	28
Figura 2.8b - Matriz de detectores QWIP utilizados para sensoriamento de mísseis balístico	os
Figura 2.8b – Matriz de detectores QWIP utilizados para sensoriamento de mísseis balístico de defesa.	os 28
 Figura 2.8b – Matriz de detectores QWIP utilizados para sensoriamento de mísseis balístico de defesa. Figura 2.9 – Níveis discretos de energia em um poço simétrico. 	os 28 30
 Figura 2.8b – Matriz de detectores QWIP utilizados para sensoriamento de mísseis balístico de defesa. Figura 2.9 – Níveis discretos de energia em um poço simétrico. Figura 2.10 – Construção de uma super-rede cristalina, consistindo de camadas epitaxia 	os 28 30 1is
 Figura 2.8b – Matriz de detectores QWIP utilizados para sensoriamento de mísseis balístico de defesa. Figura 2.9 – Níveis discretos de energia em um poço simétrico. Figura 2.10 – Construção de uma super-rede cristalina, consistindo de camadas epitaxia alternadas com diferentes energias de banda proibida. 	os 28 30 tis 31
 Figura 2.8b – Matriz de detectores QWIP utilizados para sensoriamento de mísseis balístico de defesa. Figura 2.9 – Níveis discretos de energia em um poço simétrico. Figura 2.10 – Construção de uma super-rede cristalina, consistindo de camadas epitaxia alternadas com diferentes energias de banda proibida. Figura 2.11 – Gráfico de energia de banda proibida x constantes de rede para a maioria do 	os 28 30 11s 31 0s

Figura 2.12 – Diagrama de energias para os tipos I, II-"staggered" e III de heteroestruturas
utilizadas em dispositivos a poços quânticos
Figura 2.13 - A aplicação de um campo elétrico externo diminui a altura das barreiras
suficientemente até que o processo de tunelamento permita o escape dos elétrons do poço em
uma transição da borda para borda do poço ("bound-to-bound")
Figura 2.14 – Diagrama esquemático do processo de geração de fotocorrente I_p em um bloco
de estrutura de multipoços quânticos
Figura 2.15 – Diagrama esquemático da geração de fotocorrente através das transições
a) <i>bound-to-bound</i> e b) <i>bound-to-continum</i>
Figura 2.16 - Representação diagramática da seqüência de rotinas e suas funções utilizadas
para o cálculo do espectro de absorção46
Figura 2.17 – Comparação entre o espectro de absorção medido na amostra A e o resultado
obtido pelo pacote de simuladores para valores a) em amplitude; e b) normalizados47
Figura 2.18 - Comparação entre o espectro de absorção medido na amostra B e o resultado
obtido pelo pacote de simuladores para valores a) em amplitude; e b) normalizados47
Figura 2.19 – Ganho de fotocondutividade para a amostra de Levine e a previsão simulada
para o detector de Durante
Figura 2.20 – Gráficos da eficiência quântica para os QWIPs de Levine e Durante51
Figura 2.21 - Comparação entre o modelo de corrente de escuro com a mobilidade e a
velocidade de saturação constantes, com correção da altura da barreira, e as medidas do
QWIP de Levine em função do campo aplicado, aqui representado pelo Vbias, para as
temperaturas indicadas

Figura 2.22 - Comparação entre o modelos de corrente de escuro com a mobilidade e a
velocidade de saturação variando com a temperatura, sem correção da altura da barreira, e a
medida do QWIP de Durante em função do campo aplicado, aqui representado pelo Vbias,
para T=100K
Figura 2.23 - Comparação entre o modelo de corrente de escuro com a mobilidade e a
velocidade de saturação variando com a temperatura e sem correção na altura do poço, e as
medidas do QWIP de Durante em função do campo aplicado, aqui representado pelo Vbias,
para as temperaturas indicadas
Figura 2.24 - Resultados normalizados da responsividade simulada e medida em função do
comprimento de onda para a tensão de bias de 0,5V58
Figura 2.25 – Resultados normalizados da responsividade simulada e medida em função do
comprimento de onda para a tensão de bias de 1,0V58
Figura 2.26 – Resultados normalizados da responsividade simulada e medida em função do
comprimento de onda para a tensão de bias de 1,5V59

1. INTRODUÇÃO

A fotodetecção é hoje uma realidade tecnológica que ampliou as possibilidades em diversas áreas do conhecimento. Uma delas é justamente a de Defesa, pois a caracterização dos objetos ou cenas por meio de fotodetectores com grande sensibilidade e seletividade em amplas faixas do espectro infravermelho, permite que sistemas, como por exemplo, de guiamento de mísseis obtenham maior precisão na seleção e acerto de um alvo.

Dentro deste contexto, os detectores infravermelhos a poços quânticos ("QWIP") tornaram-se uma boa alternativa para modernos sistemas de fotodetecção. Por conseguirem gerar imagens em uma faixa ampla do espectro infravermelho (6-20µm)^[1] com alto poder discriminativo (640×512 linhas)^[1] em mais de uma banda simultaneamente, a um custo significantemente^[2] baixo, esses sistemas são uma opção atraente para serem utilizados em armamentos com guiamento infravermelho^[3]. Com o aumento significativo do poder de letalidade desses sistemas bélicos, esta tecnologia se torna um fator gerador de assimetria para as Forças Armadas que os empregam.

O conhecimento das características de construção dos QWIPs e os seus fatores de avaliação de desempenho, subsidiam tecnicamente futuras aquisições de dispositivos e aumentam as chances de se realizar o projeto, desenvolvimento e fabricação no país. Além disso, o estudo das figuras de mérito e o desenvolvimento de ferramentas matemáticas que as simulem aceleram e reduzem os custos com o processo de desenvolvimento. Tal fato contribui para a independência tecnológica em sistemas de Defesa.

Buscando essa independência, iniciou-se no ITA, dentro da linha de pesquisa de análise e desenvolvimento de sensores IR e RF, um trabalho de investigação, modelamento, projeto e fabricação de fotodetectores a poços quânticos com capacidade de detecção simultânea em três faixas do infravermelho: NIR, MWIR e LWIR.

Esse trabalho vem sendo feito em parceria com o Sensor Research Laboratory (SRL) da

Naval Postgraduate School (NPS) e o *National Research Council (NRC)* do Canadá. Os resultados, publicados nas referências ^{[4]. [5] e [22]} mostram o grande potencial desses dispositivos para as aplicações militares em questão.

A abordagem de Durante^[4], no tocante ao projeto de QWIPs deixa uma lacuna no modelamento e simulação das figuras de mérito dos referidos detectores e sugere que esse tópico seja tratado em futuros trabalhos.

Nesse contexto, para dar continuidade à pesquisa, identifica-se a necessidade de se investigar o modelamento das figuras de mérito de detectores de forma que os mesmos possam ser simulados, utilizando-se ferramentas matemáticas que possam fazer parte do processo de projeto e análise de fotodetectores.

Assim sendo, pode-se definir como objetivo desse trabalho o estudo dos processos de detecção de radiação infravermelha que utilizam a tecnologia de poços quânticos, que influenciam nas principais figuras de mérito, a simulação e análise de alguns modelos disponíveis na literatura e a comparação com resultados práticos previamente mencionados [4].[5],[8],[9] e [22]

Para realizar essa tarefa, o trabalho foi dividido em quatro fases, registradas em quatro capítulos descritos como se segue.

Nesse capítulo foi feita uma breve contextualização do problema de pesquisa. Os fatores motivadores, bem como os objetivos do trabalho também foram identificados.

O segundo capítulo traz os conceitos teóricos básicos necessários ao entendimento do trabalho. São discutidos os aspectos principais da Física de QWIPs e principalmente os elementos necessários ao entendimento das figuras de mérito e análise de performance.

Os resultados das simulações desenvolvidas na pesquisa são apresentadas no terceiro capítulo e comparados com as principais medidas registradas por Levine^{[8],} Gunapala^[9] e por Hanson^[5]. Ao final do capítulo é feita uma analise dos resultados alcançados.

O capítulo final traz as considerações finais onde são expostos aspectos sobre a realização da pesquisa, bem como sugestões para a continuidade do trabalho.

2. ASPECTOS TEÓRICOS

Neste capítulo serão tratados os conceitos necessários para o entendimento do trabalho. Serão abordadas as teorias sobre radiação infravermelha, fotodetectores a poços quânticos e as figuras de mérito para caracterização destes detectores e o sensor que será utilizado nas simulações.

2.1 Definições

Para o entendimento dos próximos tópicos é necessário o conhecimento de alguns conceitos^[12]:

<u>Fonte lambertiana</u> – quando uma fonte emite radiação obedecendo à lei do cosenos de Lambert é chamada lambertiana ou emissora perfeita.

Energia radiante (U) - é a energia transferida por ondas eletromagnéticas radiadas a partir de uma fonte, expressa em Joules (J).

<u>Fluxo radiante (P) ou Potência Radiante</u> - é a quantidade de energia radiante **transferida** por unidade de tempo, expressa em Watts (W).

Emitância radiante (W) - é o fluxo radiante (P) emitido por uma fonte lambertiana, expressa em W/m^2 .

Intensidade radiante (J) - é o fluxo radiante (P) emitido por uma fonte, por unidade de ângulo sólido (Ω), expressa em W/sr.

<u>Radiância (N)</u> - é a intensidade radiante por unidade de área, ou seja, o fluxo radiante por ângulo sóli<u>do, por unidade de área, expressa em $W/(m^2.sr)$.</u>

<u>Irradiância (H)</u> - é o fluxo radiante (P) **incidente** em uma determinada unidade de área, expressa em W/m^2 .

<u>Fluxo espectral radiante (Φ_{λ}) </u> - é o fluxo radiante correspondente a um determinado comprimento de onda λ , expresso em W/m.

Definidas as principais grandezas de interesse, os conceitos referentes à radiação infravermelha podem ser apresentados na próxima seção.

2.2 A radiação infravermelha

A radiação infravermelha é uma forma de radiação eletromagnética com comprimentos de onda na faixa de 0,75 μm até cerca de 1000 μm, situada entre a faixa de microondas e da luz visível ^[12]. A figura 2.1 apresenta as diversas faixas de freqüência de emissão eletromagnética e a localização da faixa infravermelha.



Figura 2.1 – O espectro eletromagnético e a localização da radiação infravermelha (adaptado da fonte:^[14]).

A radiação infravermelha é proveniente da agitação molecular provocada pelo aumento da temperatura em que se encontram corpos e objetos. Mais precisamente, todos os corpos que se encontram acima do zero absoluto emitem radiação.

A região infravermelha, dependendo da referência utilizada, pode ser subdividida ^[4] em quatro faixas: Infravermelho próximo (NIR – *Near Infrared*) na faixa entre 0.7-3.0 μ m, Infravermelho Médio (MIR - *Mid-wavelength Infrared*) na faixa entre 3.0-6.0 μ m, Infravermelho Longo (LWIR - *Long-wavelength Infrared*) na faixa entre 6.0-15.0 μ m e Infravermelho Muito Longo (VLWIR – *Very Long-wavelength Infrared*) com valores de comprimento de onda acima de 15.0 µm. Podemos visualizar melhor estas subdivisões a partir da tabela 2-1.

Nomenclatura	Abreviatura	Limites (µm)
Infravermelho Próximo	NIR	0,75 a 3
Infravermelho Médio	MIR	3 a 6
Infravermelho Longo	LWIR	6 a 15
Infravermelho Muito Longo	VLWIR	15 a 1000

Tabela 2-1: Subdivisões da Faixa de Radiação Infravermelha^[4]

2.3 Fontes de radiação infravermelha

De forma geral, o espectro de radiação infravermelho que um corpo quente emite depende da temperatura e composição da fonte. Entretanto, Kirchhoff propôs teoricamente em 1860, a adoção de uma classe de corpos que emitissem um espectro com características universais de forma a criar uma referência de comparação para os demais corpos ^[12]. Esses corpos-padrão foram chamados de corpos negros e definiu-se que possuem superfícies que absorvem toda a energia que incide sobre eles em qualquer comprimento de onda, não refletem luz e possuem a mesma distribuição espectral em temperaturas iguais. Para cada temperatura há um comprimento de onda específico onde a intensidade radiante é máxima. A radiância total do corpo negro é a área sob as curvas da distribuição espectral relativa a cada temperatura, conforme visto na Figura 2.2. Na mesma figura observa-se que quanto maior a temperatura, maior a emitância. e que o comprimento de onda onde a emitância é máxima diminui com o aumento da temperatura.



Figura 2.2 – Radiância Espectral de um Corpo Negro com área de emissão constante^[12].

Como o corpo negro é uma idealização proposta por Kirchoff para a definição de um padrão, correlaciona-se o que se encontra na natureza e os corpos através da emissividade (ɛ) e seu valor é obtido pela razão entre a emitância radiante da fonte a ser estudada (W') e a emitância radiante (W) de um corpo negro, ambos a mesma temperatura e com características físicas semelhantes, como visto na expressão

$$\varepsilon = \frac{W'}{W}.$$
(2.1)

A emissividade é um valor numérico que está entre zero, para um corpo que não emite radiação, e a unidade, para um corpo negro. Ela também varia em função da composição do material, do tamanho do corpo, do comprimento de onda emitido e da temperatura do corpo, conforme exposto anteriormente.

Quando se aplica o conceito de emissividade para metais, verifica-se que este valor é baixo, mas aumenta com o aumento da temperatura e pode aumentar ainda mais com a formação de oxidação na superfície do corpo. Para não-metais a emissividade é alta, normalmente maior que 0,8 e decresce com o aumento da temperatura. Porém podem-se achar emissividades diferentes para o mesmo tipo de material devido às diferentes condições das superfícies das amostras comparadas.

Há três tipos de fontes que são classificadas conforme sua emissividade espectral:

- Corpo negro, para $\varepsilon(\lambda) = \varepsilon = 1$,
- Corpo cinza, para $\varepsilon(\lambda) = \varepsilon = const. < 1$,
- Radiador seletivo, onde $\varepsilon(\lambda)$ varia com o comprimento de onda.

2.4 Radiação Infravermelha na atmosfera

A atmosfera, meio onde se efetua a propagação de radiação, é composta por gases e partículas em suspensão distribuídas por diferentes temperaturas e pressões que são função da altitude e posição geográfica. Os gases e as partículas podem se localizar em seis diferentes camadas distribuídas através da variação de altitude. A mais baixa, que é o cenário mais utilizado em aplicações militares, é a troposfera que se estende do nível do mar até a aproximadamente 11 Km^[12], dependendo da estação do ano de da latitude. Nesta camada, a temperatura decresce a medida em que a altitude aumenta numa razão de 6,5 K/Km, podendo, entretanto, ocorrer variações nesta razão que causam efeitos de espalhamento^[12]. A maioria dos atenuadores da radiação infravermelha se encontra nessa camada, tendo como principais a água, o gás carbônico, as nuvens e a fumaça. As outras camadas são a estratosfera, a mesosfera, a ionosfera, a termosfera e a exosfera. Quando se verifíca a transmissão do infravermelho através da atmosfera, observa-se que há uma absorção seletiva feita pelos gases presentes, um espalhamento provocado pelas partículas em suspensão e, às vezes, uma modulação causada por rápidas mudanças de temperatura e/ou pressão.

O vapor d'água é o grande atenuador da radiação óptica, sendo predominante em altitudes inferiores a 10 km. A atenuação acima deste nível é desprezível. O dióxido de carbono está presente até a 5 km aproximadamente e só atenua a radiação infravermelha.

Considerando os efeitos atenuadores da atmosfera, os detectores infravermelhos são projetados para responder nas faixas de freqüência onde a transmitância de radiação infravermelha da atmosfera seja máxima. Podemos verificar na figura 2.3 que a transmitância da atmosfera limita a possibilidade de detecção em três regiões bem definidas: de 0.7-2.5µm, de 3.0-5.0µm e de 8.0-15.0µm, correspondendo dessa forma às faixas NIR, MIR e LWIR respectivamente^[6].



Figura 2.3 - Espectro de transmissão da atmosfera terrestre, nas faixas do infravermelho próximo, médio e longo. O espectro corresponde a uma camada de 1830 m de ar ao nível do mar e com 40% de umidade relativa a 25°C. Na parte de baixo da figura estão indicadas as linhas de absorção de alguns componentes do ar atmosférico, responsáveis pela forma da curva de transmissão ^[6].

2.5 Detecção Infravermelha

A detecção do espectro eletromagnético na faixa de comprimento de onda de 0.2 µm a 1000 µm é considerada como detecção óptica^[7]. Os principais detectores ópticos são os fotodetectores e os detectores térmicos. Nos fotodetectores, os fótons incidentes são absorvidos pelo material por meio de interação com elétrons. A modificação na configuração eletrônica (por exemplo, uma variação de corrente) resulta no sinal observado. Os fotodetectores medem a taxa de chegada de partículas e mostram uma dependência, seletiva com o comprimento de onda, da resposta com a unidade de radiação incidente. Nos detectores térmicos, a radiação incidente é absorvida e aumenta a temperatura do material. O sinal de saída é observado como uma mudança em alguma(s) propriedade(s) do material dependente(s) com a temperatura.

Há diferenças consideráveis entre esses dois tipos de detectores, como por exemplo, o tempo de resposta. Para o detector térmico esse tempo é muito maior que para o fotodetector, devido ao fato que a absorção de radiação pelo mesmo causa uma alteração em sua temperatura, fato este que compromete o seu desempenho devido à excitação térmica provocada^[7]. Já na fotodetecção, a formação de pares elétron-buraco (*exitons*) não promove o aumento de temperatura do detector, não influenciando seu tempo de resposta. Por possuir uma maior faixa de resposta espectral, o fotodetector é mais vantajoso em relação a detecção térmica ^[7]. Por esse motivo, os detectores térmicos são mais utilizados na faixa do VLWIR ou onde os requisitos de refrigeração do detector não apresentam melhoria no desempenho. Como os fotodetectores são mais abrangentes, captando mais detalhes de um ambiente, o uso dos fotodetectores é mais adequado para sistemas que necessitem de uma alta discriminalização de objetos.

Os fotodetectores podem ser divididos em três categorias, quanto ao modo de operação: detectores fotovoltaicos, fotocondutores, e fotoemissores ^[7]. Este trabalho se limita a QWIPs no modo fotocondutivo.

Nos detectores que operam no modo fotocondutivo, os fótons são absorvidos pelo material semicondutor, produzindo pares elétron-buraco, que são separados por um campo elétrico. Esses detectores utilizam a energia dos fótons incidentes nos mesmos, que deve ser suficiente alta para levar os elétrons da banda de valência para a banda de condução do material semicondutor, para que haja absorção. O fotocondutor é essencialmente um resistor sensível à radiação. O esquema de operação de um fotocondutor pode ser visto na figura 2.4.



Figura 2.4 – Esquema de operação de um detector fotocondutor e o circuito de medição da radiação incidente ^[7].

Um fóton de energia (*hv*) maior que a energia do *bandgap* entre as bandas de condução e de valência, é absorvido para produzir um par elétron-buraco, alterando conseqüentemente a condutividade elétrica do semicondutor. Em geral, a mudança na condutividade é medida por meio de eletrodos fixados no semicondutor. Para um material com baixa resistência, o fotocondutor é normalmente operado em um circuito de corrente contínua. Estes fotocondutores utilizam, geralmente, uma junção p-n composta por dois semicondutores que são escolhidos em função das características que o detector deverá possuir. Exemplos são os fotocondutores compostos por junções de GaAs e AlGaAs, que são utilizados em diversas aplicações.

Os materiais semicondutores tem uma característica óptica exclusiva em que se um fóton com energia *hv* é absorvido pelo material, ocorre a excitação de um elétron, seja por transição direta ou indireta, da banda de valência para a banda de condução, surgindo dessa forma um par elétron-buraco ^[5]. No exemplo da figura 2.5, Eg é a energia de *bandgap* do material ou a energia necessária para a transição entre o topo da banda de valência e fundo da banda de condução. A criação de portadores de carga a partir dos pares elétron-buraco geram alterações nas

características elétricas do material.



Figura 2.5 – Criação de um par elétron-lacuna através de transição direta e indireta resultado da absorção de um fóton^[5].

A concentração de elétrons na banda de condução de um semicondutor puro varia de forma exponencial com a temperatura, o que faz sua condutividade depender fortemente da temperatura. Esta é um dos motivos pelo qual os semicondutores puros, também conhecidos como intrínsecos, são utilizados em poucos dispositivos^[20]. A condutividade dos semicondutores também pode ser drasticamente alterada através de dopagem (semicondutores extrínsecos). Isto permite a fabricação de diversos dispositivos eletrônicos a partir do mesmo material semicondutor ^[20].

No caso dos fotocondutores, estes portadores de cargas são produzidos intrinsecamente através de transições banda-a-banda, ou extrinsecamente ao longo de estados de energia localizados no interior do *bandgap*, como mostrado na figura 2.6. Fotocondutores extrínsecos possuem apenas um tipo de portador de carga, dependendo do tipo de dopagem, e devem ser resfriados para minimizar a temperatura de operação do detector de forma a evitar a ionização dos portadores (efeito termiônico). Uma vez que o dispositivo é iluminado por radiação óptica, estes portadores de carga podem ser detectados sob a forma de fotocorrente usando uma tensão de polarização externa ^[5].



Figura 2.6– Transições intrínsecas e extrínsecas com respeito a perfis verticais das energias das bandas ^[5].

2.6 Fotodetectores a poços quânticos – QWIPs

A absorção óptica interbandas (entre a banda de valência e a banda de condução) envolve a fotoexcitação de portadores do nível mais alto da bnada de valência até o nível mais baixo da banda de condução. Desde que a energia de fóton incidente seja maior que a da banda proibida, elétrons e buracos são criados na estrutura cristalina (lattice) do semicondutor, conforme já vimos na seção anterior. Em um detector, esses portadores são coletados e produzem uma fotocorrente. Por meio do controle da energia do *bandgap*, selecionando os materiais desejados e controlando a composição da liga, o espectro de absorção pode ser controlado pelo projetista. Esse tipo de detector é chamado de bulk detector e é relativamente fácil de ser implementado para detecção monocromática nas faixas de NIR e MWIR. Quando o comprimento de ondas de interesse aumenta, são necessários materiais, como o In, com menores bandgap. Esses semicondutores são difíceis de fabricar, manipular e, conseqüentemente, caros. Em adição, quando a detecção multi-cromática ou o imageamento é requerido, são necessários complexos arranjos ópticos e caros processos de controle de repetitividade na implementação desses dispositivos utilizando fotodetectores convencionais. Uma solução para esses problemas pode ser obtida através de fotodetectores a poços quânticos (QWIPs). Quando uma fina camada de material semicondutor é "sanduíchada" por outras duas camadas de semicondutor com maiores bandgaps, é formado um poço quântico. O perfil de potencial é determinado pelo offset dos *bandgaps*, permitindo a existência de níveis de energia quantizados, confinados dentro do poço e estados contínuos fora do poço. Essas estruturas permitem a exploração de efeitos quânticos e se mostram muito adequadas para dispositivos optoeletrônicos. A tecnologia dos poços quânticos começou a ser estudada na final da década de 60 do século passado por L. Esaki and R. Tsu que investigavam a idéia de que uma variação periódica na composição da liga ou da densidade de impurezas, introduzidas durante o crescimento epitaxial, poderia criar potenciais periódicos ou superestruturas cristalinas (*superlattice*") em um semicondutor monocristalino. Esta estrutura seria responsável pela formação de sub-bandas nas bandas de condução e valência do semicondutor, conforme podem-se ver na figura 2.7^[4].



Figura 2.7 – Diagrama de Bandas de um poço quântico. A absorção entre sub-bandas pode levar a trocas entre os níveis de energia de um poço quântico associado a banda de condução (dopado com semicondutor tipo n) ou a banda de valência (dopado com cristal tipo p)^[9].

As absorções interbandas e intersub-bandas nos poços quânticos permitem uma detecção monolítica integrada multiespectral que vai da faixa do infravermelho próximo (NIR: 0.75-3µm) ao infravermelho de comprimento de onda longo e muito longo (LWIR: 8-15µm e VLWIR: 15-26µm), alta velocidade de resposta e uma banda de detecção estreita e sintonizável, características difíceis de se obter com os fotodetectores convencionais. Depois de Esaki, uma série de estudos foram conduzidos resultando em aplicações em laser (1975), transistores de alta mobilidade eletrônica, os "HEMT" (1980), e finalmente em 1987 o primeiro trabalho em

fotodetecção com os "QWIPs". Hoje em dia já se encontra câmeras FPA (*Focal Plane Array*) com resoluções de 640 x 512 pixels com 4 bandas, baseadas na tecnologia QWIP^[4]. A figura 2.8 mostra um exemplo de imagem gerada por uma câmera com tecnologia QWIP (a) e uma matriz de QWIPs utilizados para sensoriamento de mísseis balísticos de defesa (b).



Figuras 2.8 – a) Imagem infravermelha gerada por uma câmera com detectores QWIP [15]; e b) matriz de detectores QWIP utilizados para sensoriamento de mísseis balísticos de defesa ^[16].

Para o entendimento dos conceitos físicos envolvidos na fotodetecção através dos dispositivos a poços quânticos, é necessário o estudo de alguns conceitos de Mecânica Quântica. A próxima seção abordará os princípios teóricos necessários para o entendimento dos fenômenos físicos envolvidos nos QWIPs visando o entendimento dos modelos matemáticos que serão vistos nas próximas seções.

- 2.7 Teoria de Poços Quânticos
- 2.7.1 Confinamento Quântico

Como se pode observar na figura 2.7, em poços quânticos há a ocorrência de confinamento de portadores em níveis de energia bem definidos dentro do poço, tanto para a banda de condução, como para a banda de valência. Os valores de energia dos estados confinados na banda de condução podem ser obtidos a partir da solução da equação de Schrodinger^{[10], [11]}.

Para que haja o efeito de confinamento quântico na estrutura, é necessário que a largura

do poço seja próxima do comprimento de onda de De Broglie (λ), que é calculado pela expressão [10], [11].

$$\lambda = \frac{h}{2\pi p},\tag{2.2}$$

onde *h* é a constante de Planck e *p* é o momento do elétron no material. Para o GaAs, os comprimentos de onda de De Broglie variam entre 10 Å e 500 Å^[11]. Considerando que em um poço retangular com uma altura de barreira V_o , os portadores são livres no plano perpendicular ao eixo de crescimento e confinados neste último, também pode ser considerado que este mesmo perfil de potencial do poço seja independente do tempo. Desta forma, é possível utilizar a Equação de Schrodinger unidimensional e independente do tempo, dada por:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right)\psi_n(z) = E_n\psi_n(z).$$
(2.3)

onde m^* é a massa efetiva do elétron no poço, \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , E_n é o nível de energia do estado n, z é a coordenada espacial, V(z) é o perfil de potencial e $\psi_n(z)$ é a função de auto-estados. Em um poço quântico finito, como mostrado na figura 2.9, apresenta-se um perfil de potencial V(z) descontínuo, não permitindo soluções analíticas para a equação 2.3. Além disso, a existência de duas variáveis, $E_n \in \psi_n(z)$ exige a utilização de métodos numéricos. As referências ^{[21],[22]} discutem detalhadamente os procedimentos para se resolver a equação 2.3 utilizando o método de *Shooting*. Esse método é utilizado neste trabalho. A figura 2.9 mostra um poço retangular com quatro níveis de energia confinados e as respectivas funções de onda.



Figura 2.9 – Poço retangular com quatro níveis de energia confinados e suas respectivas funções de onda ^[5].

2.7.2 Heteroestruturas

Conforme dito anteriormente, uma das características mais importantes dos semicondutores é a existência de *bandgaps*, responsáveis pela separação dos elétrons que estçao situados na banda mais densamente populada (valência) da menos densamente populada (condução). A diferença de energia entre o nível mais baixo da banda de condução e o nível mais elevado da banda de valência ("bandgap") é determinada através dos potenciais periódicos do material cristalino. Quando uma camada semicondutora é crescida em cima de outra, uma heterojunção é formada. Isto pode ser obtido selecionando-se semicondutores que tenham estruturas cristalinas e constantes de redes compatíveis. Utilizando modernas técnicas tais como o Feixe Molecular Epitaxial (MBE) e a Deposição por Vapor Químico Orgânico (MOCVD), sob condições de controle extremamente cuidadosas, a transição de composição entre dois materiais pode ser feita de forma quase perfeitamente abrupta, com as heterointerfaces sendo definidas em uma escala de monocamadas atômicas ^[4]. Quando se realiza esta combinação em estruturas periódicas com camadas de dois ou mais materiais semicondutores, tem-se a criação de uma super-rede cristalina (superlattice), o que gera um novo material semicondutor, com propriedades ópticas e elétricas diferentes de qualquer um dos materiais constituintes e que podem ser controladas pela espessura das camadas, espaçamento e composição. Pode-se ver um exemplo desta estrutura de super-rede cristalina na figura 2.10 a partir de compostos de GaAs e AlGaAs.



Figura 2.10 – Construção de uma super-rede cristalina, consistindo de camadas epitaxiais alternadas com diferentes energias de *bandgap*^[10].

Em regiões distantes da heterojunção, a distribuição eletrônica está relacionada com as propriedades de cada material. Na heterojunção, o potencial muda abruptamente de um material para o outro. Além disso, a transferência de carga elétrica ocorre acima da escala de algumas camadas atômicas próximas da interface. A redistribuição de cargas cria um dipolo de interface responsável por um salto agudo no potencial eletrostático que é superposto ao potencial cristalino. Em cada lado, os elétrons levam as características dos semicondutores constituintes. A posição relativa das bandas, entretanto, é considerada, do ponto de vista macroscópico, como uma descontinuidade nas bandas de valência e de condução, que dependem unicamente do par de materiais que formam a heterojunção. O casamento das constantes de rede entre camadas é desejável, mas não imperativo, para a construção da heteroestrutura. Os tipos de materiais usados

determinam o grau de deformações internas da estrutura cristalina, o número de camadas permitidas e a técnica de crescimento a ser utilizada. Na figura 2.11 têm-se um gráfico de energia de banda proibida em função das constantes de rede dos materiais III-V mais utilizados para a construção de heteroestruturas.



Figura 2.11 – Gráfico de energia de *bandgap* em função das constantes de rede para a maioria dos compostos de materiais III e V^[5].

Em termos de descontinuidades de bandas, três tipos de estruturas são possíveis, classificadas em quatro grupos: tipo I, tipo II-*staggered*, tipo II-*misaligned* e tipo III^[4], conforme podemos ver na figura 2.12 abaixo.



Figura 2.12 – Diagrama de energias para os tipos I, II e III de heteroestruturas utilizadas em dispositivos a poços quânticos ^[10].

O tipo I ocorre quando todo o *gap* do semicondutor de menor *bandgap* está dentro das bandas de valência e condução do semicondutor de maior *bandgap*. Alternativamente, o tipo II

ocorre quando um (*staggered*) ou ambos (*misaligned*) os *band offsets* (altura dos poços) são maiores que a diferença entre os *bandgaps* dos semicondutores. Finalmente o tipo III ocorre quando a heterojunção é formada por um semicondutor com *bandgap* positivo e por outro semicondutor com *bandgap* negativo. Devido a isso, ocorre a superposição das bandas de valência e de condução, o que faz com que heteroestruturas deste tipo se comportem como um semimetal ^[4]. As estruturas do tipo I são de interesse deste trabalho.

2.7.3 Transições em poços quânticos

Transições entre diferentes estados em um poço quântico podem ocorrer de várias formas. Entretanto, dois tipos de transições, causadas por perturbações eletromagnéticas variáveis no tempo (como os fótons de um fluxo luminoso incidente), são de interesse neste trabalho: a transição interbandas, em que um elétron na banda de valência do poço (subbanda) pode ser excitado até a subbanda de condução e a transição intersubbanda, em que um elétron se move de uma subbanda para a outra enquanto permanece na mesma banda de condução ou valência, ou seja, entre níveis de estados confinados dentro do poço. Em ambos os casos, dependendo da característica da estrutura, isto pode ocorrer de um estado confinado dentro do poço para um estado contínuo (*continum*).

Como os fótons são absorvidos em uma estrutura de múltiplos poços quânticos ("Multiple Quantum Well" - MQW), os elétrons são primeiramente excitados de um estado de referência (*ground*) ε_1 para um estado excitado ε_2 , dentro do poço. Entretanto, mesmo com o elétron em ε_2 , não há energia suficiente para a transição do mesmo do potencial do poço para o a banda contínua de condução (*continum*), desconsiderando-se os processos de tunelamento. Para que isto ocorra, uma tensão de polarização ("Vbias") pode ser aplicada externamente, conforme visto na figura 2.13. A aplicação desse "Vbias" reduz a altura relativa da barreira vista pelo elétrons, que são excitados do nível ε_2 para um nível de energia onde os processos de

tunelamento permitem o escape dos mesmos até a banda de condução. Este processo é a transição intersubbanda "bound-to-bound".



Figura 2.13 – A aplicação de um campo elétrico externo diminui a altura das barreiras suficientemente até que o processo de tunelamento permita o escape dos elétrons do poço em uma transição *bound-to-bound*^[10].

A interação do fóton de energia ε_2 - ε_1 e um elétron no estado estacionário *ground* causa a transição para o primeiro estado excitado. A menos que o fóton possua energia suficiente para excitar os portadores do estado de referência diretamente para o nível de energia contínuo, transição do nível de *ground* até o nível continuo *bound-to-continum*, o processo requerido é o tunelamento. Este elétron no primeiro estado excitado tem uma energia que é muito próxima da energia da barreira de potencial. Esta condição, associada ao fato de que o potencial da barreira é estreito, através da aplicação da tensão "Vbias", permite que o elétron atravesse a barreira por tunelamento.

É importante ressaltar que o espectro de absorção do fotodetector depende justamente da construção das heteroestruturas e das transições associadas a cada sistema. Na seção 2.3, onde serão verificados os modelos matemáticos para as figuras de mérito, será considerado este fato. Na próxima seção serão mostrados os mecanismos de surgimento da fotocorrente.

2.7.4 Fotocorrente nos "QWIPs"

Conforme já foi visto, os fotodetectores a poços quânticos são basicamente repetições de uma estrutura barreira/poço/barreira entre camadas de contato dopadas e crescidas epitaxialmente em um substrato semi-isolado. Idealmente é possível empilhar um ou mais conjuntos barreira/poço/barreira, conforme as características desejadas. Essa repetição visa multiplicar os efeitos sentidos por um único poço tornando possível a fabricação de dispositivos práticos. Assim sendo, idealmente, quanto maior o número de repetições, maior o valor da fotocorrente e conseqüentemente das outras figuras de mérito.

O processo de geração da fotocorrente se dá basicamente da seguinte forma: quando um fotodetector é exposto a um fluxo de fótons incidente, transições entre os níveis de energia quantizados podem ocorrer. Ao se aplicar uma tensão de polarização ao longo da estrutura, os portadores excitados são extraídos dos poços quânticos para a região do contínuo. Esses portadores, circulam no dispositivo de acordo com a tensão aplicada, gerando então uma corrente. Quando o estado final é confinado (confinamento quântico), pode ocorrer o tunelamento dos portadores através das barreiras de potencial, que foram estreitadas devido a aplicação do campo elétrico externo. A figura 2.14 mostra um diagrama esquemático do processo de geração da fotocorrente.



 $\label{eq:Figura 2.14-Diagrama esquemático do processo de geração de fotocorrente I_p em um bloco de estrutura de múltiplos poços quânticos (MQW) ^{[4]}.$

Se o estado excitado é próximo da barreira de potencial, o que é verdadeiro na maioria dos casos práticos, a probabilidade de um portador, no estado excitado, tunelar através da barreira, pode ser considerada quase unitária e independente da posição do poço ^[4]. Desta forma, um único modelo é utilizado para calcular a fotocorrente para o ambos os tipos mais comuns de transições nos "QWIPs", o *bound-to-bound* e *bound-to-continuum*, que podem ser vistos na figura 2.15.



Figura 2.15 – Diagrama esquemático da geração de fotocorrente através das transições a) *bound-to-bound* e b) *bound-to-continum*.

Considerando somente transições de elétrons na camada de condução, parte-se do princípio que a absorção ocorre apenas nos poços e que a luz entra na estrutura (N poços), cruza o enésimo poço, atinge o topo da camada de metal e é refletida de volta, atravessando o mesmo poço duas vezes. Assim, se a estrutura está submetida a ação de um campo elétrico externo, F, a fotocorrente pode ser escrita como^[4]:

$$I_{P}(F) = \sum_{n=1}^{N} \frac{q\Phi_{o}}{\hbar\omega} \left(e^{-\alpha n L_{W}} + e^{-\alpha (2N-n)L_{W}} \right) \alpha N L e^{-\frac{nL}{\nu(F)\tau}}, \qquad (2.7)$$

onde α é o coeficiente de absorção, Φ_o é a potência óptica incidente, $\hbar\omega$ é a energia do fóton, q é a carga do elétron, L é o período de repetição poço/barreira, L_W é a largura do poço, $\upsilon(F)$ é a velocidade de deriva dos elétrons sobre a influência do campo elétrico F, e τ é o tempo de vida do portador extraído do poço. Sabendo que tipicamente, para detectores a poços quânticos, $\alpha L_{W <<}$ 1, a equação 2.7 pode ser simplificada para:

$$I_{P}(F) \approx \frac{2q\Phi_{o}}{\hbar\omega} \alpha L_{W} \sum_{n=1}^{N} e^{\frac{nL}{\nu(F)\tau}}.$$
(2.8)

Finalmente, no caso de elétrons, a velocidade de deriva é dada por:

$$\upsilon(F) = \frac{\mu_n F}{\sqrt{1 + \left(\frac{\mu_n F}{\upsilon_s}\right)^2}},\tag{2.9}$$

onde μ_n é a mobilidade do elétron e ν_s é a velocidade de saturação do elétron.

Até este ponto, também é importante citar que sob um campo elétrico de intensidade alta, a energia cinética do primeiro elétron extraído no processo de geração de corrente pode ser grande o suficiente para causar a transição de um segundo elétron, podendo ocorrer uma colisão. Este processo repetido muitas vezes na cadeia de poços quânticos causa um efeito de avalanche multiplicativo, aumentando assim a fotocorrente^[8].

Veremos no próximo tópico os principais parâmetros de performance para os "QWIPs", conhecidas como Figuras de Mérito.

2.8 Figuras de Mérito

2.8.1 Espectro de Absorção

O coeficiente de absorção é o parâmetro mais importante do projeto do fotodetector. As heteroestruturas cristalinas são otimizadas para que os requisitos do espectro de absorção e o coeficiente de absorção sejam medidos normalmente depois do crescimento da amostra, depois da fabricação do dispositivo.

Os modelos de absorção em poços quânticos são normalmente complexos e envolvem conceitos que fogem do escopo deste trabalho. A referência ^[4] traz o detalhamento do modelo para absorção de elétrons *bound-to-bound* e *bound-to-continuum*, implementado durante a
pesquisa, dado pelas expressões:

$$\alpha_{CbCb}(\hbar\omega) = \frac{q^2 d}{(m_e^*)^2} \frac{\hbar^3}{\varepsilon_o n_r c(\hbar\omega)} \left| \left\langle \psi_f(z) \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| \psi_i(z) \right\rangle \right|^2 X \cos^2(\phi) \frac{\Gamma}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + (\Gamma/2)^2},$$
(2.10)

onde α_{CbCb} é o coeficiente de absorção *bound-to-bound*, *d* é a densidade de dopagem, E_i é a energia de *ground*, E_f é a energia do último nível do poço, *q* é a carga do elétron, *c* é a velocidade da luz, ε_0 é a permissividade elétrica do vácuo, Γ é o parâmetro de alargamento (*broadening parameter*), ω é a freqüência angular, \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , m_e^* é a massa efetiva do elétron, ϕ é o ângulo entre o fluxo incidente e o eixo de crescimento do

material e $\left\langle \psi_f(z) \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| \psi_i(z) \right\rangle$ é a superposição das funções envelope do estado f e do estado i.

$$\alpha_{CbCc}(\hbar\omega) = \frac{q^2 d}{(m_e^*)^2} \frac{\hbar^3}{\varepsilon_o n_r c(\hbar\omega)} \frac{L_F}{\pi} \sqrt{\frac{m_{e,b}^*}{2(E_f - V_o)}} X \left| \left\langle \psi_f(z) \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| \psi_i(z) \right\rangle \right|^2 X \cos^2(\phi), \qquad (2.11)$$

onde α_{CbCc} é o coeficiente de absorção *bound-to-continuum*, L_F é a razão entre π e o vetor de onda k_{L_F} e V_o é a altura da barreira.

É importante frisar que o coeficiente de absorção para poços quânticos com transições tipo "bound-to-continuum" é consideravelmente menor e com maior largura de banda do que para aqueles com transições tipo "bound-to-bound". Este fato pode ser atribuído à conservação da força de oscilador integrada. Matematicamente podemos afirmar que:

$$\alpha_p \frac{\Delta \lambda / \lambda}{d} \approx \text{constante},$$
(2.12)

onde α_p é o coeficiente de absorção de pico, $\Delta\lambda/\lambda$ é a largura de banda de absorção e *d* é a densidade de dopagem do poço quântico.

2.8.2 Eficiência Quântica e Ganho de fotocondutividade

A fotocorrente em um detector é definida como^[10]:

$$I_p = q \eta \frac{\Phi_o}{\hbar \omega} G, \qquad (2.13)$$

onde η é a eficiência quântica e G é o ganho de fotocondutividade. Comparando esta equação com a equação 2.8, podemos identificar que^[4]:

$$\eta \approx 2\alpha NL, \qquad (2.14)$$

para $\alpha NL \ll 1^{[4]}$:

$$G = \sum_{n=1}^{N} e^{-\frac{nL}{\nu(F)\tau}}.$$
 (2.15)

Para campos elétricos moderados, o que acontece na maioria dos casos práticos, o caminho médio livre, $v(F)\tau$, é consideravelmente maior que o período dos múltiplos poços quânticos (*L*) e assim podemos reduzir a equação 2.15 para^[4]:

$$G = \frac{\tau}{L/\nu(F)},\tag{2.16}$$

que representa a taxa entre o tempo de vida dos portadores extraídos do poço quântico e o tempo de trânsito dos mesmos.

2.8.3 Responsividade

A responsividade quantifica a razão de fotocorrente gerada pela potência de radiação de fótons incidente no detector, em watts. Ela pode ser expressa matematicamente como^[4]:

$$R(F) = \frac{I_p(F)}{\Phi_o}.$$
(2.17)

Combinando as expressões (2.17), (2.13), (2.14) e (2.16), temos^[4]:

$$R(F) = (2\alpha NL) \frac{q}{\hbar\omega} \frac{\nu(F)\tau}{L}.$$
(2.18)

É importante reparar na dependência da responsividade com o coeficiente de absorção e a tensão de polarização de portadores aplicada (Vbias), através da velocidade de deriva dos

elétrons. O coeficiente de absorção é responsável pela forma do espectro de resposta do detector, enquanto o campo elétrico aplicado é responsável pela amplitude da resposta. Aumentando a disponibilidade de portadores (por meio da concentração de impurezas), a fotocorrente será aumentada e conseqüentemente a sua responsividade.

2.8.4 Corrente de Escuro

Quando um fotodetector é submetido a uma tensão de polarização dos portadores para geração da fotocorrente e não há luz incidindo sobre o mesmo, a corrente resultante é conhecida como corrente de escuro. Três mecanismos de geração da corrente de escuro podem ser identificados nos dispositivos de poços quânticos: tunelamento ressonante seqüencial, tunelamento devido à temperatura e efeito termiônico ^[4].

O tunelamento ressonante seqüencial é causado pelos elétrons que tunelam de poço para poço, através das barreiras. Este processo é independente da temperatura e é a fonte dominante da corrente de escuro em temperaturas muito baixas. Esta fonte ruído pode ser reduzida ao se utilizar barreiras largas.

O tunelamento devido à temperatura envolve a excitação termal e o tunelamento através da ponta da barreira estreitada devido ao campo elétrico externo quando aplicado. Este processo é dominante em médias temperaturas e pode ser reduzido através da colocação dos estados excitados o mais longe possível do estado inicial, reduzindo a probabilidade de transições termiônicas.

A emissão termiônica é dominante em altas temperaturas é a dominante na faixa de temperaturas a partir de 70 K. Para reduzir seu efeito, o projeto deve contemplar poços profundos em combinação com a redução dos portadores disponíveis (diminuição de impurezas). Obviamente, isto irá reduzir a fotocorrente e uma relação de compromisso deve ser estabelecida entre ambas as correntes no desenvolvimento do projeto.

Para se estimar a corrente de escuro é necessário estimar o número efetivo de elétrons que serão extraídos do poço, devido à variação de temperatura, até os estados de transporte contínuo

em função da tensão de polarização Vbias. Este valor é dado por^[8]:

$$n^{*}(F) = \frac{m_{w}^{*}}{\pi \hbar^{2}L} \int_{E_{1}}^{\infty} f^{FD}(E)T(E,F)dE, \qquad (2.19)$$

onde o termo fora da integral é a densidade de estados dividida pelo período dos múltiplos poços quânticos (*L*) e o termo $f^{FD}(E)$ representa a distribuição de Fermi-Dirac, que é dada por ^[4]:

$$f^{FD}(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}},$$
(2.20)

onde E_F representa o nível de Quasi-Fermi, k_B é a constante de Boltzman e T a temperatura. O fator da corrente de tunelamento dependente da tensão de polarização para uma barreira simples é representado por T(E,F) e pode ser descrito por^[13]:

$$T(E,F) = \exp\left(-\frac{4L_b}{3qV}\left(\frac{2m^*}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left[(V_o - E)^{\frac{3}{2}} - (V_o - E - qV)^{\frac{3}{2}}\right]\right) \quad E_o < E < V_o - qV$$
(2.21)
$$T(E,F) = \exp\left(-\frac{4L_b}{3qV}\left(\frac{2m^*}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}(V_o - E)^{\frac{3}{2}}\right), \quad V_o - qV < E < V_o$$
(2.22)

onde V_o representa a altura do poço e V representa a tensão aplicada por período de estrutura de poço.

A equação 2.19 considera, simultaneamente, a emissão termiônica acima do nível da barreira e o tunelamento assistido termionicamente abaixo do nível de barreira. Finalmente a corrente de escuro pode ser expressa por^[8]:

$$I_{D}(F) = qn^{*}(F)v(F)A,$$
 (2.24)

onde A é a seção reta do dispositivo e os outros parâmetros já são conhecidos.

O principal mecanismo para reduzir a corrente de escuro é a redução da temperatura de operação do detector. Para verificar a relação entre a corrente de escuro e a temperatura é possível assumir que T(E,F)=0 para $E < V_o$ e T(E,F)=1 para $E > V_o$ na equação 2.19, o que é uma

boa aproximação para sistemas com baixa tensão de polarização ^[4]. Assim, a corrente de escuro pode ser escrita como ^[4]:

$$I_{D}(T) = q \upsilon(F) A \frac{m_{w}}{\pi \hbar^{2} L} k_{B} T e^{\frac{(E_{c} - E_{F})}{k_{B} T}},$$
(2.25)

onde E_c é a energia de corte $(V_o - E_i)$ e E_F é a energia do nível quasi-Fermi, que representa a população de portadores em uma sub-banda. O valor deste nível pode ser obtido a partir do tamanho da população, cujo valor é ^[8]:

$$n_n = \frac{m_e k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + e^{\frac{E_F}{k_B T}} \right].$$
(2.26)

Então, dividindo a corrente de escuro pela temperatura, podemos verificar que essa razão se relaciona com a temperatura exponencialmente ^[8]:

$$\frac{I_D}{T} \propto e^{-\frac{(E_c - E_F)}{k_B T}},$$
(2.27)

indicando que a corrente de escuro diminui com o inverso da temperatura.

2.8.5 Detectividade

A detectividade, D^* , é a medida do menor fluxo de fótons que pode sensibilizar o detector e depende claramente do ruído associado ao mesmo. É definido por ^[4]:

$$D_{\lambda}^{*} = \frac{\sqrt{A\Delta f}}{NEP}, \qquad (2.28)$$

onde Δf é a largura de banda do filtro de integração e *NEP* é a potência de ruído equivalente (*Noise Equivalent Power*) que representa a potência de ruído cuja relação sinal-ruído (SNR) é unitária. A *NEP* pode ser estimada a partir da equação 2.17^[4]:

$$NEP = \frac{i_{ND}(F)}{R_p(F)},$$
(2.29)

onde $i_{ND}(F)$ é a corrente de ruído no escuro, dada por ^[4]:

$$i_{ND}(F) = (4qI_D(F)G\Delta f)^{1/2},$$
 (2.30)

Fazendo $\Delta f = 1$ Hz e combinando as equações 2.29 e 2.30, a detectividade de pico em $[m(Hz)^{1/2}/W]$, no sistema internacional (SI), pode ser escrita como^[4]:

$$D_{\lambda}^{*}(F) = \frac{R_{p}(F)}{i_{ND}(F)} \sqrt{A}$$
(2.31)

Mais relevante que a detectividade de pico, é a detectividade de corpo negro (D_{BB}) que é obtida por meio do cálculo do espectro coincidente da responsividade com o espectro de emissão do corpo negro à temperatura de corpo negro T_{BB} . Assim, a detectividade de corpo negro pode ser expressa por^[4]:

$$D_{BB}^{*}(F) = \frac{R_{BB}(F)}{i_{ND}(F)} \sqrt{A}$$
(2.32)

e R_{BB} é dada por^[4]:

$$R_{BB} = \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} R(\lambda) W_{BB}(\lambda) d\lambda}{\int_{\lambda_1}^{\lambda_3} W_{BB}(\lambda) d\lambda}.$$
(2.33)

A potência irradiada por unidade de comprimento de onda em um comprimento λ , por unidade de área de corpo negro a uma temperatura T_{BB} (densidade espectral do corpo negro) é dada por^[4]:

$$W_{BB} = \frac{2\pi ch^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\left(\frac{hc}{\lambda k_B T_{BB}}\right)} - 1}.$$
 (2.34)

É importante ressaltar que para a maioria das aplicações, a responsividade do corpo negro R_{BB} é reduzida a uma parcela relativamente pequena do valor de pico de responsividade R_p e que a detectividade do "QWIP" aumenta quase exponencialmente com o decréscimo de temperatura. Este fato pode ser explicado por meio da forte dependência da corrente de escuro da emissão termiônica e do tunelamento termiônico assistido. Também deve ser considerado que a melhora da detectividade implica na redução da corrente de escuro de ruído^[4].

Outro importante aspecto é a dependência da detectividade no processo de dopagem de impurezas. Aplicando a mesma simplificação usada para determinar a dependência da corrente de escuro com a temperatura, podemos provar que^[4]:

$$D^* \propto \frac{\rho}{\sqrt{e^{\rho} - 1}},\tag{2.35}$$

onde ρ é linearmente proporcional a densidade de dopantes no poço quântico. Isto indica que a detectividade irá aumentar com o aumento da densidade de dopagem de impurezas até que atinja um máximo e comece a decair de novo. É importante considerar que a região de máximo de detectividade é larga, permitindo, nesta região (máximo), a utilização da densidade de dopantes para otimizar a responsividade ^[4].

3. SIMULAÇÕES E RESULTADOS

Este capítulo descreve e apresenta as simulações numéricas dos modelos teóricos descritos no capítulo anterior. As simulações têm o objetivo inicial de predizer as figuras de mérito de estruturas simples, compostas por poços simétricos e transições intersub-bandas na banda de condução. Configurações mais complexas são deixadas para trabalhos futuros. Pode-se ver na Tabela 3-1 os dados das amostras utilizadas nas simulações, todas com poços compostos por GaAs.

Amostra	Ref	Comprimento da Barreira (Lb) (Å)	Comprimento do poço (Lw) (Å)	Composição barreira	Número de Repetições	Dopagem na Poço (cm ⁻³)
А	[4] pg. 62	300	52	Al _{0.26} Ga _{0.74} As	20	0.5.10 ¹⁸
В	[8] pgs. R22 e R29; e [9] pgs.23 e 34	500	40	Al _{0.26} Ga _{0.74} As	50	1.10 ¹⁸
С	[8] pgs. R22 e R29	500	50	Al _{0.26} Ga _{0.74} As	25	$0.42.10^{18}$
D	[8] pg. R18	305	40	Al _{0.29} Ga _{0.71} As	50	1.4.10 ¹⁸

Tabela 3-1: Amostras utilizadas nas simulações

Cabe ressaltar que o cálculo do perfil de potencial de estrutura, bem como dos níveis de energia quantizados dentro do poço e suas respectivas funções de onda são computados utilizando o método auto-consistente de se resolver as equações de Schrodinger-Poisson da estrutura, implementado por Durante ^[4]. Para resolver as equações diferenciais e obter os autovalores e as autofunções, Durante utilizou o método de *Shooting*, detalhadamente descrito em ^[21]. Todos os modelos foram implementados em MatLab. Os resultados são discutidos ao final do capítulo.

3.1 Espectro de absorção.

A estimação teórica do espectro de absorção consta basicamente da implementação das equações 2.10 e 2.11. Para isso, se faz necessário o conhecimento de todos os parâmetros envolvidos, já descritos. Assim sendo, foram utilizadas algumas rotinas para o computo das grandezas, na seguinte seqüência:



Figura 2.16 – Representação diagramática da seqüência de rotinas e suas funções utilizadas para o cálculo do espectro de absorção.

A utilização dessas rotinas possibilita a obtenção dos parâmetros necessários para cada temperatura e valor de campo elétrico aplicado. A partir desses resultados, chega-se ao espectro de absorção. Simulações do fotodetector A e B, citados na tabela 3.1 com seus parâmetros, foram realizadas e a absorção teórica a 300 K com 0 V de bias foi comparada com os dados medidos pelos autores das referências. As figuras 2.17 e 2.18 apresentam as comparações.



(a) (b) Figura 2.17 – Comparação entre o espectro de absorção medido na amostra A^[4] e o resultado obtido pelo pacote de simuladores para valores a) em amplitude; e b) normalizados.



Figura 2.18 – Comparação entre o espectro de absorção medido na amostra B^[8] e o resultado obtido pelo pacote de simuladores para valores a) em amplitude; e b) normalizados.

Embora haja uma diferença acentuada quando se compara os resultados absolutos medidos e simulados, no momento em que são comparados valores normalizados, verifica-se um resultado bastante satisfatório nas duas comparações. A grande diferença na comparação dos

valores absolutos é devido a simplicidade do modelo de *shooting* adotado por Harrison ^[21], o que limita o resultado. Porém a comparação de valores normalizados mostra que o método matemático mostrou-se adequado ao cálculo que estima o comprimento de onda onde a absorção é máxima. A diferença entre o resultado medido e o simulado gerou diferenças de 1.09% para a amostra A e 2,44% para a amostra B. Estes resultados demonstram que o modelo é adequado ao cálculo do comprimento de onda máximo, mas que precisa ser aperfeiçoado devido aos resultados absolutos. Ou seja, ainda é preciso que se melhore o modelo de modo a obter-se resultados absolutos melhores.

3.2 Ganho de Fotocondutividade

Esta figura de mérito foi simulada a partir da equação 2.16:

$$G = \frac{\tau}{L/\upsilon(F)}$$

implementada na rotina ganho x vbias.m, que foi desenvolvida durante o trabalho.

Foi simulada a amostra B citada na tabela 3.1 com seus parâmetros, extraindo-se empiricamente o valor do tempo médio de vida do elétron no poço (τ) em 160 fs e comparada com o resultado experimental exposto na referência ^[9]. Com esse mesmo valor de τ , simulou-se uma estimativa do ganho para a amostra A. Ambos os resultados são expostos na figura 2.19.



Figura 2.19 – Ganho de fotocondutividade para a amostra de Levine^{[8],} cujo resultado foi exposto em^[9] e a previsão simulada para o detector de Durante^[4].

Ao se analisar a figura, verifica-se que há uma diferença significativa no ganho de fotocondutividade entre as duas amostras, embora sejam parecidas em seus parâmetros. O erro está contido no tempo médio de vida do elétron no poço (τ), pois foi usado um valor extraído empiricamente dos dados de Levine no valor de 160 fs. Este dado foi utilizado para prever o resultado do detector em análise, em função das semelhanças entre as duas amostras. O cálculo realizado está de acordo com os resultados atingidos por ^[9]. Entretanto, oo se aplicar o modelo ao dispositivo de Durante ^[4] é necessário que se tenha o valor do tempo de meia vida do elétron no poço, (τ). Na simulação do dispositivo em análise foi usado o tempo de meia vida extraído empiricamente da amostra B da tabela 3.1, de Levine. O valor extraído empiricamente foi utilizado na simulação devido à similaridade das amsotras. Assim, como já citado, o modelo é limitado pelo uso correto dessa constante, sendo necessário maior pesquisa na literatura ou medições no detector em análise para se chegar ao valor correto do tempo de meia vida do elétron no poço da amostra de Durante. Dessa forma, pode-se dizer que o modelo está válido por reproduzir os resultados da lietarura ^[8], mas com o resultado para a amostra de Durante limitado.

3.3 Eficiência Quântica(η)

O modelo de eficiência quântica utilizado na seção 2.8.2, é extremamente simplificado e se mostrou ineficiente na maioria das comparações. Entretanto, para a obtenção de resultados mais úteis, utiliza-se o modelo de Levine ^[8]. Utilizando a probabilidade de recaptura dos elétrons no poço de origem em função da tensão de *bias* ($p_e(V)$), pode-se afirmar que ^[8]:

$$\eta = \eta_a \cdot p_e(V) \,, \tag{2.36}$$

onde η_a é a máxima eficiência quântica. Pode-se afirmar também que ^[8]:

$$\eta_a = (1 - e^{-2\alpha_p \cdot l}), \tag{2.37}$$

onde α_p é o coeficiente de absorção de pico e *l* é o comprimento da região cristalina da heteroestrutura. O valor de p_e(V) é dado por ^[8]:

$$p_{e}(V) = \left(1 + \frac{\tau_{e}}{\tau_{r}}(V)\right)^{-1},$$
(2.38)

onde τ_e é o tempo de escape do elétron de seu poço de origem e τ_r é o tempo de recaptura do elétron ao seu poço de origem. A razão entre esses dois tempos depende de *Vbias* e é descrita como ^[8]:

$$\frac{\tau_e}{\tau_r}(V) = \left(\frac{\tau_e}{\tau_r}\right)_o e^{-\frac{V}{V_p}},$$
(2.39)

onde V_p é a energia potencial da barreira por período de poços e V é a tensão de bias. Para a amostra B da tabela 3.1 construída por Levine^[8], temos que V_p=13 mev/período e $(\tau_e / \tau_r)_o = 1.9^{[8]}$. A partir desses dados, foi possível simular a eficiência quântica deste detector utilizando a rotina **efqtn x vbias.m** implementada para esse fim. Assim, os resultados de Levine puderam ser reproduzidos, conforme pode ser visto na figura 2.20. Utilizando-se esse modelo, o detector LWIR de Durante (amostra A) foi analisado, utilizando-se os dados complementares da amostra C da tabela 3.1, de Levine, na literatura ^[8] (V_p = 36 meV/período e ($\tau_e / \tau_{r)o} = 26$). Esse resultado também pode ser visto na figura 2.20 abaixo.



Figura 2.20 – Gráficos da eficiência quântica para os QWIPs de Levine^[8] e Durante^[5].

Para o detector de Durante foi prevista uma eficiência em 0 V de bias (η_o) de 1,35% e uma eficiência máxima de 4,9% até cerca de 0,75 V, faixa considerada para a utilização do mesmo^{[4],[5]}. Ao se analisar os resultados obtidos para o cálculo da eficiência quântica, pode-se dizer que os resultados da literatura ^[8] foram repoduzidos, entretanto é necessário o conhecimento da energia potencial da barreira por período de poços (V_p) e a razão entre o tempo de escape do poço e o tempo de recaptura do poço quando o bias aplicado é igual a zero (τ_e/τ_r)_o para a amostrade Durante^[4]. Neste caso, novamente, a simulação foi realizada utilizando-se as constantes da referência ^[8], devido as razões já comentadas..Assim sendo, podese doizer que o emprego deste modelo está limitado ao conhecimento dos parâmetros intrínsecos da amostra analisada.

3.4 Corrente de Escuro

O cálculo da corrente I_d é um procedimento complexo que depende de várias grandezas, necessárias para a determinação do resultado final.

A primeira grandeza a ser calculada é a massa efetiva ponderada do elétron no detector, a partir da proporção de barreiras e poços no detector. O procedimento é feito por meio da determinação das massas efetivas do elétron na barreira ^[17] (formada pelo composição ternária AlGaAs a partir das composições binárias GaAs e AlAs) e no poço (formado somente pela composição binária GaAs). A massa efetiva do elétron no poço^[17] é dada por:

$$m^*_{(GaAs)} = 0.067m_o,$$
 (2.40)

onde m_o é a massa do elétron livre. A seguir obtemos a massa efetiva do binário AlAs^[17]:

$$m^*_{(AlAs)} = 0.15m_o.$$
 (2.41)

Destas duas massas efetivas, obtém-se a massa na barreira^[17]:

$$m^{*}_{(AIGaAs)} = \frac{1}{\frac{x}{m^{*}_{(GaAs)}} + \frac{1 - x}{m^{*}_{(AIAs)}}},$$
(2.42)

onde x é a composição do Alumínio. E, finalmente, a massa efetiva no detector que é a massa efetiva ponderada considerando as duas estruturas:

$$m^* = \frac{6m^*_{(AlGaAs)} + m^*_{(GaAs)}}{7}.$$
 (2.43)

A segunda grandeza a ser calculada é a mobilidade ponderada dos portadores, que também é obtida a partir das mobilidades na barreira e no poço. A mobilidade no poço é dada por ^[18]:

$$\mu_{GaAs} = 8500.10^{-4} \left(\frac{T}{300}\right)^{-2.2},\tag{2.44}$$

onde T é a temperatura no detector.

A mobilidade do binário AlAs é dada por ^[18]:

$$\mu_{AlAs} = 250.10^{-4} \left(\frac{T}{300}\right)^{-2.1}.$$
(2.45)

E a mobilidade da barreira é dada por ^[18]:

$$\mu_{AlGaAs} = \frac{1}{\frac{1-x}{\mu_{GaAs}} + \frac{x}{\mu_{AlAs}} + \frac{x(1-x)}{180.10^{-4}}},$$
(2.46)

onde x é a composição do alumínio no ternário.

E, finalmente, a mobilidade ponderada no detector é dada pela equação:

$$\mu = \frac{6\mu_{AlGaAs} + \mu_{GaAs}}{7} \,. \tag{2.47}$$

A terceira grandeza a ser calculada é a velocidade de saturação ponderada no detector. Da mesma forma que a massa efetiva e a mobilidade, tem-se que, inicialmente, obter a velocidade de saturação no poço^[19]:

$$vsat_{GaAs} = \frac{0.72.10^5}{1 - 0.56 + 0.56 \left(\frac{T}{300}\right)},$$
(2.48)

onde T é a temperatura no detector. A seguir, a velocidade de saturação do binário AlAs é dada por ^[19]:

$$vsat_{AlAs} = \frac{0.85.10^5}{1 - 0.55 + 0.55 \left(\frac{T}{300}\right)},$$
(2.49)

Assim, obtém-se a velocidade de saturação na barreira, que é dada por ^[19]:

$$vsat_{AlGaAs} = (1-x)vsat_{GaAs} + xvsat_{AlAs} + x(1-x)(-0.0512.10^5), \qquad (2.50)$$

onde x é a composição do alumínio no ternário. Finalmente, a velocidade de saturação ponderada no detector é dada por:

$$vsat = \frac{(6vsat_{AlGaAs} + vsat_{GaAs})}{7}.$$
 (2.51)

As constantes das equações para as mobilidades e velocidades de saturação são relacionadas com os binários e o ternário, considerando que os elétrons no interior da

heteroestrutura sofrem transição direta. O modelo adotado, segundo as referências^{[18],[19]} gera resultados confiáveis para temperaturas acima de 60 K. Não foi encontrado um modelo que forneça resultados em função de temperaturas menores que 60 K. Por isso, haverá apenas comparações para temperaturas acima de 60 K.

Além dessas grandezas, o pacote de rotinas **self_con_cb foi** utilizado para gerar o nível de energia estacionário (E_1) e a altura do poço (V_o). O modelo matemático da corrente de escuro utilizada é dado pela equação ^[8]:

$$I_{D}(F) = \frac{ev_{drift} A m_{w}^{*}}{\pi \hbar^{2} L} \int_{E_{1}}^{\infty} f^{FD}(E) T(E, F) dE, \qquad (2.52)$$

Considerando a igualdade representada pela equação 2.20,

$$f^{FD}(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_B T}}}$$

e o fator da corrente de tunelamento em uma barreira simples T(E,F) dado pelas equações (2.21),(2.22) e (2.23)^[13] já mencionadas:

$$T(E,F) = \exp\left(-\frac{4.L_b}{3eV}\left(\frac{2m^*}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\left(V_o - E\right)^{\frac{3}{2}} - \left(V_o - E - eV\right)^{\frac{3}{2}}\right]\right) \quad E_o < E < V_o - eV$$
(2.21)

$$T(E,F) = \exp\left(-\frac{4.L_b}{3eV}\left(\frac{2m^*}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}(V_o - E)^{\frac{3}{2}}\right), \qquad V_o - eV < E < V_o \qquad (2.22)$$

A partir dessas considerações, foi iniciado o teste do modelo de simulação utilizando a amostra D da tabela 3.1 de Levine ^[8] por possuir dados experimentais da corrente de escuro para comparação. Utilizando os valores de mobilidade (μ) igual a 0.1 m²/Vs e a velocidade de saturação (v_{sat}) igual a 5.10⁴ m/s constantese e a rotina **Idark x Vbias.m** criada para implementar os modelos das equações 2.21, 2.22 e 2.23 e 2.52. Devido as incertezas nos parâmetros das

composiçõs binárias, principalmente o *band off-set*, foi inserida uma correção dee 9% no vlaor de V_0 calculado. O resultado é apresentado na figura 2.21.



Figura 2.21 – Comparação entre o modelo de corrente de escuro com a mobilidade e a velocidade de saturação constantes, com correção da altura da barreira, e as medidas do QWIP de Levine^[8] em função do campo aplicado, aqui representado pelo Vbias, para as temperaturas indicadas.

Observa-se que os modelos reprsentam bem os fenômenos, se afastando um pouco mais para valores de tensão de bias menores que 1.0 V.

Em seguida, considerou-se a amostra A, da tabela 3.1, de Durante, utilizando o modelo das referencias ^[18] e ^[19] para os valores de mobilidade (μ) e da velocidade de saturação (v_{sat}) e sem a aplicação da correção no valor de V_o para a temperatura de 100 K. O resultado é apresentado na figura 2.22.



Figura 2.22 – Comparação entre o modelos de corrente de escuro com a mobilidade e a velocidade de saturação variando com a temperatura, sem correção da altura da barreira, e a medida do QWIP de Durante^[5] em função do campo aplicado, aqui representado pelo Vbias, para T=100K.

Ao analisar a figura, verifica-se que os resultados obtidos quase coincidem com os medidos para valores de Vbias > 1V. Com isso, resolveu-se ampliar a análise para as temperaturas de 100, 90, 80, 77, 70, 60, 50 e 40 K. O resultado obtido está na figura 2.23.



Figura 2.23 – Comparação entre o modelo de corrente de escuro com a mobilidade e a velocidade de saturação variando com a temperatura e sem correção na altura do poço, e as medidas do QWIP de Durante^[5] em função do campo aplicado, aqui representado pelo Vbias, para as temperaturas indicadas.

Verifica-se que o comportamento das curvas simuladas representam bem o comcportamento do dispositivo real para temperaturas acima de 60 K e *Vbias* maior que 1.0 V.

Percebe-se que cada modelo é valido para situações específicas. As discrepâncias observadas podem ter várias razões como, por exemplo: o fato da configuração do detector ser parte de um dispositivo multi-detecção mais complexo; o aumento da probabilidade de tunelamento induzido pelo campo elétrico externo; dentre outras não vislumbradas. Estudos mais aprofundados devem ser realizados para a obtenção de um modelo único e genérico.

3.5 Responsividade

O modelo de responsividade em função da temperatura de operação e do Vbias foi implementado na rotina **R x lambda x Vbias.m.** Esta rotina usa os dados obtidos por meio do cálculo do coeficiente de absorção descrito na seção 3.1. Combinado as equações (2.15), (2.8) e (2.13) pode-se obter a responsividade:

$$R_{P}(F) \approx \frac{2q}{\hbar\omega} \alpha L_{W}G. \qquad (2.53)$$

Foram realizadas simulações da responsividade normailizada do fotodetctor de Durante ^[4] (amostra A da tabela 3.1) para as tensões de 0.5, 1.0 e 1.5 V, para uma temperatura de 10 K. Essas curvas foram comparadas com as medidas realizadas por Hanson ^[5] para valores normalizados, uma vez que o método de *shooting* aplicado para o cálculo do coeficiente de absorção é um modelo simplificado, conforme já explicado anteriormente.

O erro entre o valor do comprimento de onda de pico simulado e o medido ficou em 2.25%, para Vbias igual a 0.5 V, conforme pode ser visto na figura 2.24.



Figura 2.24 – Resultados normalizados da responsividade simulada e medida em função do comprimento de onda para a tensão de bias de 0.5V.

O erro entre o valor do comprimento de onda de pico simulado e o medido ficou em 1.68% para Vbias igual a 1.0 V, conforme pode ser visto na figura 2.25.



Figura 2.25 – Resultados normalizados da responsividade simulada e medida em função do comprimento de onda para a tensão de bias de 1,0V.

O erro entre o valor do comprimento de onda de pico simulado e o medido ficou em 1.17% para Vbias igual a 1.0 V, conforme pode ser visto na figura 2.26.



Figura 2.26 – Resultados normalizados da responsividade simulada e medida em função do comprimento de onda para a tensão de bias de 1,5V.

Por fim, ao se analisar os resultados obtidos para a simulação da responsividade, verificase que o modelo matemático utilizado para o cálculo do comprimento de onda de pico é válido em fuinção dos erros obtidos serem inferiores a 2,53% e diminuem à medida que o *bias* é aumentado.

4. CONCLUSÃO

Tem sido publicado na literatura especializada que nos últimos conflitos envolvendo a utilização de mísseis com sistemas de guiamento a infravermelho, esse tipo de armamento tem desempenhado um papel de relevância, devido ao seu alto grau de letalidade. A utilização de sensores com maior poder de discriminação dos alvos e com banda larga de resposta, aumenta consideravelmente a qualidade destes armamentos. Os detectores a poços quânticos, por possuírem estas características, se revelam como uma alternativa a ser considerada no futuro da fabricação dos sistemas sensores de mísseis. Por isso, o entendimento desses dispositivos, suas figuras de mérito e os respectivos modelos que permitem projeta-los tem se tornado cada vez mais importante ^[3].

Foram discutidas no segundo capítulo as bases teóricas do espectro infravermelho, suas fontes, detectores e especificamente os QWIPs.

O terceiro capítulo apresentou modelos das seguintes figuras de mérito: espectro de absorção, ganho de fotocondutividade, eficiência quântica, corrente de escuro e responsividade. Os resultados das simulações realziadas foram comparaos com as medidas publicadas nas referencias. Também foi realizada a análise dos resultados e foram discutidas as limitações e potencialidades dos modelos adotados.

Estes resultados, embora não sejam definitivos, colaboram de forma importante para o futuro desenvolvimento de modelos mais consistentes para a previsão teórica das figuras de mérito dos detectores a poços quânticos.

4.1 Resultados alcançados

Para a obtenção do espectro de absorção foi utilizado um pacote de rotinas em linguagem MatLab, desenvolvidas na referência ^[4] e que utiliza um modelo que apresenta limitação para os valores absolutos da absorção ^[21]. Os resultados se mostraram válidos em relação à previsão do comprimento de onda de pico onde a absorção é máxima, pos obtiveram-se erros no valores de 1.09% para a amostra A da tabela 3.1 e 2,44% para a amostra B da tabela 3.1, mesmo com as limitações do modelo adotado e a diferença entre os valores absolutos medidos e calculados.

Para o ganho de fotocondutividade foi desenvolvida a rotina MatLab **ganho x vbias.m**, que ao ser utilizada para um detector de Levine, repetiu o resultado da literatura. Neste procedimento foi calculado empiricamente o tempo de vida do elétron (τ). Este dado ao ser utilizado com os parâmetros de projeto do detector em análise, permitiu a previsão teórica do ganho para o mesmo, mas como há diferenças entre os dispositivos deve-se considerar que há um erro embutido no resultado devido à diferença nos tempos médios de vida das heteroestruturas. Entretanto, pode-se considerar que este modelo é válido, porém necessita da inclusão do valor correto de tempo de vida para a heteroestrutura a ser simulada.

Para a eficiência quântica foi desenvolvida a rotina MatLab **efqtn x vbias.m**, que ao ser utilizada para um detector descrito na referência ^[8], repetiu o resultado da literatura. Em seguida foram utilizados os dados de energia potencial da barreira por período (V_p) e da razão entre os tempos de escape e de recaptura do elétron (τ_e/τ_c) da amostra de Levine que possuía os parâmetros de projeto mais próximos do detector da referência ^[4], de forma a permitir a previsão teórica da eficiência quântica. Entretanto, da mesma forma que para o ganho de fotocondutividade, pode-se dizer que o modelo é valido, pois reproduz os resultados descritos na literatura, porém necessitando da inclusão dos parâmetros intrínsecos da amostra analisada . Deve-se pesquisar ou calcular os valores corretos de energia potencial da barreira por período e os tempos de escape e recaptura do elétron para que o modelo matemático possa ser usados na

simulação de heteroestruturas.

Para a corrente de escuro conseguiu-se a reprodução os dados previstos na literatura^[8], por meio da rotina **Idark x Vbias - Levine.m**. Porém quando foi utilizado o modelo considerando a moblidade e a velocidade de saturação do elétron, dependentes da temperatura e da composição de alumínio no ternário, e o fator de corrente de tunelamento porposto por Andrews e Miller^[13], com os parâmetros do detector de Durante ^[4], por meio da rotina **Idark x Vbias.m**, conseguiu-se um resultado válido para valores de tensão de bias superiores a 1 V e para temperaturas acima de 60 K. Devem-se pesquisar mais profundamente os modelos adotados para os parâmeros físicos citados anteriormente, para que as faixas de tensão de bias e temperaturas sejam totalmente contempladas em um resultado futuro.

Para a responsividade foi desenvolvida a rotina **R x lambda x vbias.m** que utiliza os resultados de espectro de absorção do pacote de rotinas da referencia ^[4]. Como já foi comentado para o espectro de absorção, o modelo adotado é limitado para valores absolutos ^[21] de responsividade. Nos testes realizados com a responsividade normalizada para o detector em análise ^[4] foram observados para o cálculo do compriomento de onda de pico, um erro de 2,53 % referente a tensão de bias de 0.5 V, de 1.68 % referente a tensão de bias de 1.0 V e de 1.17 % referente a tensão de bias de 1.5 V, demonstrando assim que o modelo é válido e pode ser melhorado.

Por fim pode-se dizer que todos os modelos matemáticos desenvolvidos alcançaram resultados relevantes que, em alguns casos, necessitam de um estudo mais aprofundado de alguns parâmetros físicos utilizados. Ou seja, espera-se que, com a pesquisa de novos modelos mais abrangentes, se consiga simular com uma melhor aproximação o dispositivo projetado na referencia^[4].

4.2 Considerações finais

Considerando este trabalho como um esforço para a geração de conhecimentos estratégicos sobre fotodetectores a poços quânticos, pode-se dizer que o objetivo de estudar os processos de detecção de radiação infravermelha que utilizam a tecnologia de poços quânticos, gerando modelos matemáticos das principais figuras de mérito, tais como coeficiente de absorção, corrente de escuro, eficiência quântica, ganho e responsividade, que simulem sua performance e comparando os resultados alcançados com resultados disponíveis na literatura especializada no intuito de validar os modelos desenvolvidos foi atingido. Porém há a necessidade de se melhorar os resultados, conforme discutido anteriormente.

E, por fim, verifica-se que as considerações feitas durante o trabalho colaboram com o esforço que vem sendo feito pelas Forças Armadas em ampliar seu conhecimento técnico na área de fotodetecção, de forma a permitir ao nosso país a independência e o desenvolvimento autóctone desse campo estratégico do conhecimento.

4.3 Propostas para trabalhos futuros

O trabalho abordou um tema considerado de importante tanto para a área operacional como para a área técnica, no tocante a modelagem matemática e a simulação de fenômenos físicos para previsão do comportamento de fotodetectores a poços quânticos. Entretanto ainda há temas de grande relevância e que usam uma grande parte do conhecimento discutido neste trabalho. Por isso, é necessário que os estudos relativos à utilização destes fotodetectores tenham um prosseguimento baseado nos estudos já realizados. Dentre os inúmeros temas de grande relevância, deve ser dada prioridade àqueles que podem ser realizados em um menor espaço de tempo, trazendo resultados mais rapidamente, visando preencher as lacunas identificadas durante a realização dest etrabalho. Dentre os diversos temas que poderiam ser indicados, destacam-se os seguintes:

• Devem ser verificados modelos físicos para baixas temperaturas para a velocidade de saturação (v_{sat}), a mobilidade do elétron (μ) e o fator de tunelamento para uma barreira simples T(E,V);

• Deve ser aprimorado o modelo para o coeficiente de abosrção dependente do *Vbias*;

• Estudo e análise de um modelo único de corrente de escuro, para qualquer intervalo de temperatura e *Vbias*;

• Implementação de rotinas de simulação para a fotocorrente e a figura de mérito detectividade, que não puderam ser incluídas neste trabalho;

• Realização de novas medições no detector de Durante, de forma a corroborar os modelos das demais figuras de mérito; e

• Adaptação dos modelos para a deteção interbandas.

Estas propostas não esgotam o assunto e toda sugestão que puder ser vislumbrada para colaborar com este esforço será vital para que as Forças armadas possam atingir o estado da arte nessa área.

REFERÊNCIAS

- [1] Gunapala, S. D. et all. 640x512 Pixel Four-Band, Broad-Band, and Narrow-Band
 Quantum Well Infrared Photodetector. Focal Plane Arrays. Disponível em:
 <<u>http://qwip.jpl.nasa.gov</u>>. Acesso em 09 mar. 2007.
- [2] Gunapala, S.D. What is QWIP Technology?. Disponível em: <<u>http://qwip.jpl.nasa.gov</u>>. Acesso em 09 mar. 2007.
- [3] R. Dyer, Walter and Z. Tidrow, Memei. QWIP technology applications to ballistic missile defense. Proc. SPIE Vol. 3553, August 1998, p. 231-238.
- [4] Alves, F. D. P. Design and Analysis of a Multicolor Quantum Well Infrared Photodetector. United States Naval Postgraduate School Master's Thesis. September 2005.
- [5] Hanson, N. A. Characterization and Analysis of a Multicolor Quantum Well Infrared Photodetector. United States Naval Postgraduate School Master's Thesis. June 2006.
- [6] Boschetti, C. O espectro infravermelho. Disponível em: <<u>http://www.las.inpe.br/~cesar/Infrared/espectro.htm</u>>. Acesso em 24 mar. 2007.
- [7] Rogatto, W. D. et all. The Infrared & Electro-Optical Components.Volume 3. Electro-Optical Components.1993.
- [8] Levine, B.F.Quantum well infrared photodetctors. J.Appl. Phys.n.74, Vol.8, 15th October 1993.
- [9] Gunapala, S. D. and Bandara, S.V. Quantum well infrared photodetctor (QWIP)
 Focal Plane Arrays. Semiconductors and Semimetals. Vol.62. 1999.
- [10] Dereniak, E.L. and Boreman, G.G.. Infrared Detectors and Systems. John Wiley & Sons, Inc.1st ed. 1996.
- [11] De Souza , M. S. Desenvolvimento de fotodetectores de infravermelho distante utilizando transições intrabandas em poços quânticos múltiplos de GaAs/AlGaAs. Dissertação de Mestrado. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Fev. de 2006.
- [12] Santos, R. A. T. Proposta de Metodologia para Estimação do Envelope Infravermelho de Aeronaves. 2004. 144f. Tese de mestrado – Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos.

[13]	Andrews, S.R. and Miller, B.A Experimental and theoretical studies o					
	performance of quantum well infrared detectors. J.Appl. Phys.n.70, Vol.2, 15 th					
	July 1991.					
[14]	Disponível em < <u>http://mynasadata.larc.nasa.gov/ElectroMag.html</u> >.					
	Acesso em 24 mar. 2007.					
[15]	Disponível em					
	<http: inovacaotecnologica.com.br="" noticia.php?artigo="010110060526" noticias="">.</http:>					
	Acesso em 8 mar. 2007.					
[16]	Disponível em < <u>http://www.mda.mil/mdalink/html/asptpassive.html</u> >.					
	Acesso em 8 mar. 2007					
[17]	Fu,Y. and Willander. M. Optical coupling in quantum well infrared photodetector					
	by diffraction grating. J.Appl. Phys.n.10.Vol.84. 15 th Nov 1998.					
[18]	Institute of Microelectronic's site.					
	Disponível em:					
	< <u>http://www.iue.tuwien.ac.at/phd/quay/node34.html</u> >;e					
	< <u>http://www.iue.tuwien.ac.at/phd/quay/node35.html</u> >.					
	Acesso em 18 mai. 2007					
[19]	Institute of Microelectronic's site.					
	Disponível em:					
	< <u>http://www.iue.tuwien.ac.at/phd/palankovski/node48.html</u> >.					
	Acesso em 18 mai. 2007					
[20]	Rezende, S. M. Materiais e Dispositivos Eletrônicos. São Paulo. 2.ed. Livraia da					
	Física. 2004.					
[21]	P. Harrison. Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational					
	Physics Wiley. 2 nd ed.Chichester.UK 2005.					
[22]	Alves, F.D.P., Kurunasiri, G., Hanson, N., Byloos, M., Liu, H.C., Bezinger, A. and					
	Buchanan, M. NIR, MWIR and LWIR quantum well infrared photodetector					
	using interband and intersubband transitions. Infrared Physics & Technology.					
	2006. Elsevier.					

ANEXO - ROTINA EM MATLAB UTILIZADAS

A) self_con_cb.m

% Self consistent solution % Fabio Durante % 01/08/2005

%

% This program solves the Schrodinger's equation for band edge potential,

% gets the enginenergies in the heterostructure defined by hetstr.m, solves

% the Poisson's equation for those energy levels, add the potential due to

% the ionised donnor/electron charge distribution to the band edge

% potential. It repeats the cicle until the confined energies converge

% (delta_E between interactions < 0.5 meV)

clear all; clc;

tic;

% continuum analysis flag cont=0; % first run hetstr for confined states

hetstr; format short;

%_____

% Running first for the conduction band

V=V_be; % Using the band edge potential profile for the first trial vb=0; % flag to indicate for the poisson solver to use negative charges

shoot;

% Calling the continuum calculation % if cont==1 cont=1; hetstr; V=V_be; % Using the band edge potential profile for the first trial vb=0; % flag to indicate for the poisson solver to use negative charges

shoot_cont; % end

E_b(1,:)=E_bound; Conv_fac=delta_E; n_int=2;

% while (Conv_fac>0.1*delta_E) & (n_int<6)
% poisson;
%
% Adding the potentialdue to the ionised donnor/electron charge distribution
% to the band edge potential.
%
% V=V_be+V_rho;
% shoet;</pre>

% shoot;

% Plotting the results for the concuction band V_rho=V; E_f=V; sigma=V; plot_result(PSI,E_bound,V,V_be,V_rho,m_star,D,E_f,... sigma,Int_coor,z,delta_z,n_states,1);

% Storing the conduction band values

% Interactions control: Each interaction values of the energies is stored % to control the convergence of the self-consistent method. If the % convergence is not reached is possible to select the suitable number of % interactions for each case

E_b_cb=E_b; E_b_cb*1e3/q

% Confined states of the conduction band

E_bound_cb=E_bound;

% Wavefunctions

PSI_cb=PSI;

% This is the value of the top of the potential, reference to calculate % all band to continuous wavelength

V_cb=V;

```
if F<=0
V_top=V_cb(round((well_ini/delta_z))-1);
else
V_top=V_cb(round((well_end/delta_z))+1);
end</pre>
```

% ------% Remarkable fact: At 2:22 AM of jan/09 the first successful % self-consistent solutions were obtained for a single well. % ------

% Wavelength of the transition from the valence band ground state to the % top of the well (interband transition)

V_top/q*1e3 E_2_offset=(V_top-E_bound_cb(2))/q*1e3 lambida_intersubband_BB=1.24/((E_bound_cb(2)-E_bound_cb(1))/q) lambida_intersubband_BQC=1.24/((V_top-E_bound_cb(1))/q)

Elapsed_time=toc

% Pending points:
% 1. It is necessary to calculate the well dimentions based
% on the desired transitions. (Design Tool)
% 2. Include differnt materials in the program.

B) well.m

first_c=10; last_c=15;

%**********	***************************************
%*********	***************************************
% My Design	(last update - 02/11/2005)

% Streined in GaAs

% MWIR

% w_len=52; s_len=43; b_len=300;lamb_end=2; lamb_ini=7; % Al(0.4)Ga(0.6)As/GaAs/In(0.1)Ga(0.9)As/GaAs/Al(0.4)Ga(0.6)As % using the thin GaAs layers we use less In. % % % % lambda_c=4.8um f=0.38 E2_offset=0 +ok

% % % w_len=40; s_len=0; b_len=200;lamb_end=2; lamb_ini=7; % % % Sub_Cell=[200 0.4 0 0 4; 13 0 0 0 1; 14 0.15 2e18 0 5; 13 0 0 0 1; 200 0.4 0 0 4]; % % % p_align_1=0.65; p_align_2=0.62; step=1; F=0; T=300; n_states=2;

% and

% NIR - step well

% GaAs/In(0.3)Ga(0.7)As/In(0.1)Ga(0.9)As/GaAs

% % lambda_c=23.5um (intersubband B-C) and lambda_c=0.85um (interband) f_vb= 0.032 +ok % % E2_offset=0

% w_len=40; s_len=43; b_len=250;lamb_end=2; lamb_ini=18; % Sub_Cell=[250 0 0 0 1; 40 0.25 2e18 0 5; 43 0.10 0 0 5; 250 0 0 0 1]; % p_align_1=0.62; p_align_2=0.62; step=1; F=0; T=300;

% and

% LWIR

% Al(0.23)Ga(0.77)As/GaAs/Al(0.23)Ga(0.77)As % % lambda_c=8.5um f=0.45 E2_offset=0meV $\label{eq:w_len=40; s_len=0; b_len=500; lamb_end=2; lamb_ini=18; \\ Sub_Cell=[500\ 0.26\ 0\ 0\ 4;\ 40\ 0\ 1e18\ 0\ 1;\ 500\ 0.26\ 0\ 0\ 4]; \\ p_align_1=0.65; p_align_2=0.62; step=0; F=0; T=300; n_states=2; \\ \end{array}$

C)AlAs.m

% AlAs

function f=AlAs(T)

% Parameters

m0=9.11e-31; Eg_T0=3.099; alfa_T=0.885/1e3; beta_T=530; delta_so=0.28; Ep=21.1; F=-0.48; gama_1=3.76; gama_2=0.82; gama_3=1.42;

% Bandgap Narrowing Values

% Eg_narrowing=[];

% Electric Permittivity

epson=12;

% Band Gap

Eg=2.671; % prev, 3.03 at 300K given by Vurgaftman

% this expression gives Eg=3.003 at 300K

% Eg=Eg_T0-(alfa_T*T^2)/(T+beta_T);

% Eg=2.95; % given by Shur

% Eg=2.140; % at T=300K (indirect bandgap), Blakemore, 1982

% Electron Effective mass

m_star_e=0.15*m0; %prev 0.15 given by Vurgaftman

% this expression gives m_star=0.1456 at 300K

% m_star_e=m0*(1/((1+2*F)+((Ep*(Eg+2*delta_so/3)/(Eg*(Eg+delta_so))))));

% m_star_e=m0*0.1; % at T=300K, Blakemore, 1982

```
% Holes Effective mass
% m_star_hh=m0*0.76; % Shur (average values)
% m_star_lh=m0*0.15; % Shur
m_star_hh=m0*(1/(gama_1-2*gama_2)); % [z]
m_star_lh=m0*(1/(gama_1+2*gama_2)); % [z]
% m_star_hh=m0*(2/(2*gama_1-gama_2-3*gama_3)); % [110]
% %
% m_star_lh=m0*(2/(2*gama_1+gama_2+3*gama_3)); % [110]
f=[Eg, m_star_e, m_star_hh, m_star_lh, epson, Ep, F, delta_so, epson];
```

D)GaAs.m

```
% GaAs
```

```
function f=GaAs(T)
```

```
% Parameters
```

```
m0=9.11e-31;
Eg_T0=1.509; % given by Karunasiri % 1.519 given by Vurgaftman
%Eg_T0=1.8443; %given by russian paper
alfa T=0.5405/1e3;
beta_T=204;
delta_so=0.341;
Ep=28.8;
F = -1.94;
gama_1=6.98;
gama_2=2.06;
gama_3=2.93;
ni=2.25e18; % at T=300K, Blakemore, 1982
% Bandgap Narrowing Values
Eg_narrowing=[1*1e18, 2*1e18; 31, 36];
% Electric Permittivity
epson=13.18;
% Band Gap
% % % To be coherent with previous used values
% % %if T==300
8 8 8
       Eq=1.424;
% % %elseif T==0
% % Eq=Eq T0;
% % end
% this expression gives Eg=1.4225 at 300K
Eg=Eg_T0-(alfa_T*T^2)/(T+beta_T);
```

```
% Electron Effective mass
m_star_e=m0*0.067; % prev
% this expression gives m_star=0.0623 at 300K
% m_star_e=m0*(1/((1+2*F)+((Ep*(Eg+2*delta_so/3)/(Eg*(Eg+delta_so))))));
% Holes Effective mass
% m_star_hh=0.62*m0; % Shur % average values
% m_star_hh=0.51*m0; % Blakemore, 1982
% m_star_lh=0.074*m0; % Shur
% m_star_lh=0.082*m0; % Blakemore, 1982
m_star_lh=m0*(1/(gama_1-2*gama_2)); % [z]
m_star_lh=m0*(1/(gama_1+2*gama_2)); % [z]
% m_star_hh=m0*(2/(2*gama_1-gama_2-3*gama_3)); % [110]
% %
% m_star_lh=m0*(2/(2*gama_1+gama_2+3*gama_3)); % [110]
```

f=[Eg, m_star_e, m_star_hh, m_star_lh, epson, Ep, F, delta_so, epson];

E) AlGaAs.m

```
% Al(x)Ga(1-x)As
```

function f=AlGaAs(T,x)

% Parameters

m0=9.11e-31; C_Eg=(-0.127+1.310*x); C_delta_so=0;

% Guetting the GaAs values

Data=GaAs(T);

```
Eg_GaAs=Data(1);
delta_so_GaAs=Data(8);
Ep_GaAs=Data(6);
F_GaAs=Data(7);
epson_GaAs=Data(5);
m_star_e_GaAs=Data(2);
m_star_hh_GaAs=Data(3);
m_star_lh_GaAs=Data(4);
```

% Guetting the AlAs values

Data=AlAs(T);

Eg_AlAs=Data(1); delta_so_AlAs=Data(8);

```
Ep AlAs=Data(6);
F_AlAs=Data(7);
epson_AlAs=Data(5);
m_star_e_AlAs=Data(2);
m_star_hh_AlAs=Data(3);
m_star_lh_AlAs=Data(4);
% Bandgap missmatch (conduction band) between AlGaAs/GaAs
% p_align-0.64; % Vurgaftman
p_align=0.65;
% Electric Permittivity
epson=(1-x)*epson_GaAs+x*epson_AlAs;
% Band Gap (This is for x<0.45, due to indirect bandgap of AlAs)</p>
% if T==0
% Eg=1.519+1.247*x;
% elseif T==300
% Eq=1.424+1.247*x;
% end
% Eg=(1.424+1.247*x) % prev Eg=1.7891 for 300K and x=0.3
% this expression gives Eg=1.7422 for 300K and x=0.3
% Eg=(1-x)*Eg_GaAs+x*Eg_AlAs-x*(1-x)*C_Eg;
%Eg=(1-x)*Eg_GaAs+x*Eg_AlAs;%-x*(1-x)*C_Eg; % without Bowing Parameters
Eg_T0=1.519+1.247*x;
Eg_T300=1.424+1.247*x;
Eg=(T/300)*(Eg_T300-Eg_T0)+Eg_T0;
%Eg=(1.519+1.155*x+0.37*x^2)-(5.41e-4)*(T^2)/(T+204);
% Spin orbit splitting
delta_so=(1-x)*delta_so_GaAs+x*delta_so_AlAs-x*(1-x)*C_delta_so;
% Interpolatting F and Ep parameters
F=interp1([0 1],[F_GaAs F_AlAs],x,'linear');
Ep=interp1([0 1],[Ep GaAs Ep AlAs],x,'linear');
% Electron Effective mass
% m_star_e=(0.067+0.083*x) % given by Harrison
% this expression gives m_star= 0.0835 for 300K and x=0.3
% m_star_e=(1/((1+2*F)+((Ep*(Eg+2*delta_so/3)/(Eg*(Eg+delta_so))))));
```
% this is the linear interpolation of the masses of the Binaries % m_star_e=(1-x)*m_star_e_GaAs+x*m_star_e_AlAs; m_star_e=(m_star_e_GaAs*m_star_e_AlAs)/(x*m_star_e_GaAs+(1-x)*m_star_e_AlAs); % Holes Effective mass (linear interpolation from the binaries) % m_star_hh=(0.62+0.14*x)*m0; % standard value for testing purposes % m_star_hh=interpl([0 1],[m_star_hh_GaAs m_star_hh_AlAs],x,'linear'); % m_star_lh=interpl([0 1],[m_star_lh_GaAs m_star_lh_AlAs],x,'linear'); % m_star_hh=(1-x)*m_star_hh_GaAs+x*m_star_lh_AlAs; % m_star_lh=(1-x)*m_star_lh_GaAs+x*m_star_lh_AlAs; m_star_hh=(m_star_hh_GaAs*m_star_hh_AlAs)/(x*m_star_hh_GaAs+(1x)*m_star_lh=(m_star_lh_GaAs*m_star_lh_AlAs)/(x*m_star_lh_GaAs+(1x)*m_star_lh=(m_star_lh_GaAs*m_star_lh_AlAs)/(x*m_star_lh_GaAs+(1x)*m_star_lh_AlAs);

f=[Eg, m_star_e, m_star_hh, m_star_lh, epson, Ep, F, delta_so, epson];

F) hetstr.m

% Heterostructure Definitions% Fabio Durante% last update 01/26/2005

% This program receives as imputs the parameters of the layers such as thickness,

% alloy composition, dopping density, from "cell.m"

% and defines the growing axis (z) in terms of lenght and steps and the

% Potential (V) and Effective Mass (m_star) profiles, etc.

% Global Definitions:

m0=9.11e-31; q=1.6e-19; c=3e8; h=6.626e-34; h_bar=h/2/pi; Kb=1.38e-23; epson_0=8.8542e-12;

% Loading the basic cell specification; well;

% Also the program adds an initial and a final user defined layers to % the structure.

% Continuum calculation flag: % cont=1, proceed the continuum calc. % cont=0, don't.

% cont=0; %just for testing - remove this to run with self_con

% Adjusting the barrier width according to the computation if cont==0 L=10; Lb=L; else L=Pseud_fac; Lc=L; end

Ini_lay = [L Sub_Cell(1,2) 0 0 Sub_Cell(1,5)]; End_lay = [L Sub_Cell(1,2) 0 0 Sub_Cell(1,5)];

% Number of repetition of the basic cell:

N_cell=1;

% Heterostructure

 $\label{eq:cell_Sub_Cell;} \begin{array}{l} Cell=Sub_Cell;\\ S=size(Cell);\\ Cell(S(1),:)=[];\\ End_Cell=Sub_Cell(S(1),:); \end{array}$

Hetstr=[Ini_lay; Cell];

for n=1:N_cell-1 Hetstr=[Hetstr; Cell]; end Hetstr=[Hetstr; End_Cell; End_lay];

Hetstr;

% Interface coordinates (z): It is the cumulative sums of the first column % of Hetstr. Theese are z coordinates of the different layers interfaces.

coor=Hetstr(:,1); Int_coor=cumsum(coor);

% Coordinates of the starting and ending points of the well well_ini=Int_coor(2)*1e-10; well_end=Int_coor(length(Int_coor)-2)*1e-10; well_coor=[well_ini, well_end];

% The Heterostructure has length (in Angstroms) defined by the last element of the % first column of Int_coor:

Het_length=Int_coor(length(Int_coor),1);

% The material type is defined by material=Hetstr(:,5);

% the vector z starts at 0 Angstrom (index 1) and ends at Het_length % Angstroms (index Het_length), in delta_z (Amgstroms) steps.

delta_z=1*1e-10; z=0:delta_z:(Het_length-1)*1e-10;

% Potential, Effective Mass and dopping profiles;

% The material parameters equations, extracted from [Harrison, Paul, Quantum % Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics, John Willey & % Sons Inc., New York, June 2001, pg 431] are applied to the % Heterostructure and stored in the vetors V and m_star for potential and mass % respectively. The dopping profile is based on the information provided by % the user.

% Taking the bias voltage and converting to V/m F=F/1e-6;

% Rmk: under external bias a reference must be well estabilished otherwise % the Energy levels don't have any meaning. In this program the reference % is taken in the first interface of the lower potential side.

```
if F<=0
    z_ref_cb=well_ini;
    z_ref_vb=well_end;
else
    z_ref_vb=well_ini;
    z_ref_cb=well_end;
end
n=1; m=1; o=1;
thick=Int_coor(1);
while (n<=thick)
    x=Hetstr(m,2); % Ternary Composition
    y=Hetstr(m,4); % Quaternary Composition
    r=Hetstr(m,3)*1e6; % convets the dopping density unity from cm^-3 to m^-3</pre>
```

% It selects the material and runs their functions

```
switch material(m)
case 1 %GaAs
Data(m,:)=GaAs(T);
name(m,:)='GaAs
';
case 2 % AIAs
Data(m,:)=AIAs(T);
name(m,:)='AIAs
';
case 3 % InAs
Data(m,:)=InAs(T);
name(m,:)='InAs
';
```

case 4 % AlGaAs

```
Data(m,:)=AlGaAs(T,x);
%
         name(m,:)=['Al_{',num2str(x(m)),'}Ga_{',num2str(1-x(m)),'}As
                                                                              '];
    case 5 % InGaAs
      Data(m,:)=InGaAs(T,x);
      name(m,:)='ln(x)Ga(1-x)As
    case 6 % InP
      Data=InP(T);
                                     ';
      name(m,:)='InP
    case 7 % InGaAsInP
      Data(m,:)=InGaAsInP(T,x,y);
      name(m,:)='(ln(x)Ga(1-x)As)(y)(lnP)(1-y)';
    case 8 % In(0.52)AI(0.48)As
      Data(m,:)=In52AI48As(T);
      name(m,:)='In(x)AI(1-x)As
                                         ';
    otherwise
      disp('Unknown material')
      break
 end
 % storing the profiles
 Eg(o)=Data(m,1)*q;
 m_star(o)=Data(m,2);
 m_star_os(m)=Data(m,2); % for the oscillator strength calculation
 Eg_tm(m)=Data(m,1);
 m_star_hh(o)=Data(m,3); % effective mass of the hevy hole
 m_star_lh(o)=Data(m,4); % effective mass of the lite hole
 epsilon(o)=Data(m,9);
 D(o)=r;
 n=delta_z/1e-10+n;
 n=roundn(n,-1); % This is to avoid numerical errors
 o=o+1;
 if (n==thick) & (m<length(Int_coor))</pre>
    m=m+1;
    thick=Int_coor(m);
 end
end
Data(:,2:4)=Data(:,2:4)/m0;
% The first reference level for energy is the minimum value of Eg
```

Eg_ref=min(Eg);

% finding the second energy reference u=1; if step==1

```
while (Eg(u) = max(Eg)) | (Eg(u) = min(Eg))
    u=u+1:
  end
  Eg_ref_2=Eg(u);
end
m=1;
for n=1:length(z)
  if step==1 % checking flag that indicates it is a step well
    if Eg(n)>Eg ref 2
       V_be(n)=((Eg(n)-Eg_ref_2)*p_align_1+(Eg_ref_2-Eg_ref)*p_align_2)-...
         (F*z(n)-F*z_ref_cb)*q;
       % Using the same methodt for the valence band. The external bias here
       % is the oposite.
       V_be_vb(n)=(Eg(n)-Eg_ref_2)*(1-p_align_1)+(Eg_ref_2-Eg_ref)*...
          (1-p_align_2)-((-F)*z(n)-((-F)*z_ref_cb))*q;
     else
       V_be(n)=(Eg(n)-Eg_ref)*p_align_2-(F*z(n)-F*z_ref_cb)*q;
       V_be_vb(n)=(Eg(n)-Eg_ref)*(1-p_align_2)-((-F)*z(n)-((-F)*z_ref_vb))*q;
    end
  else
    V_be(n)=(Eg(n)-Eg_ref)*p_align_1-(F*z(n)-F*z_ref_cb)*q;
    % Using the same methodt for the valenve band. The external bias here
    % is the oposite.
```

V_be_vb(n)=(Eg(n)-Eg_ref)*(1-p_align_1)-((-F)*z(n)-((-F)*z_ref_vb))*q; end end

% plot(z/1e-10, (V_be/q)*1e3, 'r', 'LineWidth', 1.5); hold on; % plot(z/1e-10, (V_be_vb/q)*1e3, 'r', 'LineWidth', 1.5); hold on; %plot(z/1e-10, (m_star_os)*1e3, 'r', 'LineWidth', 1.5); hold on;

G) carr_dist.m

% Carrier population is computed for each of the two subbands of interest

function f=carr_dist(E,delta_E,m_star,Tot_carr, well_coor,T,V,n_states)

% If there is no dopping there is no carrier distribution

if (Tot_carr~=0)

if(T>300) % If the temperature is zero, all carriers are in the ground state

% Global definitions

m0=9.11e-31;

q=1.6e-19; c=3e8; h=6.626e-34; h_bar=h/2/pi; Kb=1.38e-23;

% The distribution of carriers within the 2 first confined energy levels % follows the approach from [Ref Prof. Karunasiri's book, pg357 equation % (8.45)

% Only the first two states are taken into consideration here becouse of % the design characteristics.

% The Fermi is computed using Newton Raphson method with the first gess % being the fermi level if all carriers would occupy the first energy % level. The method keeps interacting until Ef is 1e-3 accurate.

delta_Ef=delta_E;

% Calculating the average m_star (for assimetric wells) % This aproach needs to be verified.

```
m_star_av=0;
for w=round(well_coor(1)/1e-10):1:round(well_coor(2)/1e-10)
    m_star_av = m_star_av + m_star(w);
end
m_star_av=m_star_av/((well_coor(2)-well_coor(1))/1e-10);
```

```
n_c=m_star_av*Kb*T/(pi*h_bar^2);
Ef(1)=E(1)+Kb*T*log(exp(-Tot_carr/n_c)-1);
Ef_pres=q*1e-12;
epson_Ef=q*1e-10;
```

```
% to prevent probelms with non confined energies and to assure that if % T=0 all carriers will be in the first state
```

```
if E(2)<max(V)
```

```
Ef_err=2*Ef_pres;
while (Ef_err>Ef_pres)
  g=Tot_carr-n_c*(log(1+exp((Ef-E(1))/(Kb*T)))+log(1+exp((Ef-E(2))/(Kb*T))));
  dg=((Tot_carr-n_c*(log(1+exp((Ef+epson_Ef-E(1))/(Kb*T)))+log(1+exp((Ef+epson_Ef-E(2))...
     /(Kb*T)))))...
     -(Tot_carr-n_c*(log(1+exp((Ef-epson_Ef-E(1))/(Kb*T)))+log(1+exp((Ef-epson_Ef-E(2))...
    /(Kb*T)))))/(2*epson_Ef);
  Ef_err=g/dg;
  Ef=Ef-Ef_err;
end
for n=1:n states
  if n<=2 % distributing the carriers only in the two first states
    N_carr_sub(n)=n_c^{(log(1+exp((Ef-E(n))/(Kb^T))));
  else
    N_carr_sub(n)=0;
  end
end
```

```
else
       for n=1:n_states
         if n<=1 % assuming all the carriers are in the first state
            N_carr_sub(n)=Tot_carr;
         else
            N_carr_sub(n)=0;
         end
       end
    end
  else
    for n=1:n_states
       if n<=1 % assuming all the carriers are in the first state
         N_carr_sub(n)=Tot_carr;
       else
         N_carr_sub(n)=0;
       end
    end
  end
else
  N_carr_sub(1:n_states)=0;
end
```

f=N_carr_sub;

H) plot_psi.m

% Potential profile and wavefunctions plots

% This program plots the potential profile and wavefunctions for a given % heterostructure and energy levels

function f=plot_psi(PSI_cb,PSI_vb,E_bound_cb,E_bound_vb,V_cb,V_vb,... V_be_vb,n_states,z,delta_z,n_fig,Int_coor)

% Global definitions

q=1.6e-19;

%-----

% Plot the well potential and the wavefunctions for the selected states

figure(n_fig) subplot(1,2,1) plot(z/1e-10, (V_cb/q)*1e3, 'r', 'LineWidth', 1.0); hold on; plot(z/1e-10, (V_vb/q)*1e3, 'r', 'LineWidth', 1.0); hold on;

% Determining caracter separation for the text function c_s=0.02*max(z)*1e10;

%Conduction Band for n=2:n_states

% Plotting the Eingenstates levels

for m=1:length(z)
 if abs(E_bound_cb(n))>=abs(V_cb(m))

```
plot(z(m)/1e-10,(E_bound_cb(n)/q)*1e3,'--gs','LineWidth',1,...
'MarkerEdgeColor','g', 'MarkerFaceColor','g','MarkerSize',0.5);hold on;
end
end
% For ploting purpouses, a plotting factor is created to renormalize the
% wavefunctions
Plot_fac=(1/max(PSI_cb(n,:)))*0.1*max((V_cb/q)*1e3); % The maximum of PSI will be 50 meV
plot (z/1e-10,PSI_cb(n,:)*Plot_fac+E_bound_cb(n)*1e3/q, 'b', 'LineWidth', 1); hold on;
% text(Int_coor(length(Int_coor)-2), E_bound_cb(n)*1e3/q-10, 'E');
% text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+c_s), E_bound_cb(n)*1e3/q-10, num2str(n));
% text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+2*c_s), E_bound_cb(n)*1e3/q-10, '=');
text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+1*c_s), E_bound_cb(n)*1e3/q-55,...
num2str(roundn(E_bound_cb(n)*1e3/q,-1)));
```

end

```
plot(z(m)/1e-10,(E_bound_vb(n)/q)*1e3,'--gs','LineWidth',1,...
'MarkerEdgeColor','g', 'MarkerFaceColor','g','MarkerSize',0.5);hold on;
end
```

end

```
% For ploting purpouses, a plotting factor is created to renormalize the % wavefunctions
```

Plot_fac=(1/abs(min(PSI_vb(n,:))))*0.2*max((V_be_vb/q)*1e3); % The maximum of PSI will be 50 meV plot (z/1e-10,PSI_vb(n,:)*Plot_fac+E_bound_vb(n)*1e3/q, 'b', 'LineWidth', 1); hold on;

```
% text(Int_coor(length(Int_coor)-2), E_bound_vb(n)*1e3/q-10, 'E');
```

```
% text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+c_s), E_bound_vb(n)*1e3/q-10, num2str(n));
```

```
% text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+2*c_s), E_bound_vb(n)*1e3/q-10, '=');
```

```
text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+1*c_s), E_bound_vb(n)*1e3/q-55,...
num2str(roundn(E_bound_vb(n)*1e3/q,-1)));
```

end

```
% ind_V_vb=(Int_coor(length(Int_coor)-2)/delta_z)*1e-10;
% text(Int_coor(length(Int_coor)-2), (V_vb(ind_V_vb)*1e3/q)+10, 'Vb');
```

```
% text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+2*c_s), (V_vb(ind_V_vb)*1e3/q)+10, '=');
% text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+1*c_s), (V_vb(ind_V_vb)*1e3/q)+20,
num2str(V_vb(ind_V_vb)*1e3/q));
```

b=0.1*max((V_cb/q)*1e3); % These factor limits the y-axis

```
axis([80 (max(z)/1e-10)-80 min((V_vb/q)*1e3)-10*b max((V_cb/q)*1e3)+10*b]);
title('Quantum Well Transitions')
ylabel('Potential Height (meV)')
xlabel('Growing Axis (Angstrom)')
grid on
```

% Ploting only the Intersubband Transitions

```
subplot(1,2,2)
plot(z/1e-10, (V_cb/q)*1e3, 'r', 'LineWidth', 1.0); hold on;
plot(z/1e-10, (V_vb/q)*1e3, 'r', 'LineWidth', 1.0); hold on;
```

% Determining caracter separation for the text function c_s=0.02*max(z)*1e10;

%Conduction Band for n=1:n_states

% Plotting the Eingenstates levels

```
for m=1:length(z)
    if abs(E_bound_cb(n))>=abs(V_cb(m))
        plot(z(m)/1e-10,(E_bound_cb(n)/q)*1e3,'--gs','LineWidth',1,...
        'MarkerEdgeColor','g', 'MarkerFaceColor','g','MarkerSize',0.5);hold on;
    end
end
```

% For ploting purpouses, a plotting factor is created to renormalize the % wavefunctions

Plot_fac=(1/max(PSI_cb(n,:)))*0.2*max((V_cb/q)*1e3); % The maximum of PSI will be 50 meV plot (z/1e-10,PSI_cb(n,:)*Plot_fac+E_bound_cb(n)*1e3/q, 'b', 'LineWidth', 1); hold on;

```
% text(Int_coor(length(Int_coor)-2), E_bound_cb(n)*1e3/q-10, 'E');
% text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+c_s), E_bound_cb(n)*1e3/q-10, num2str(n));
% text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+2*c_s), E_bound_cb(n)*1e3/q-10, '=');
% if n==1
text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+1*c_s), E_bound_cb(n)*1e3/q-20,...
num2str(roundn(E_bound_cb(n)*1e3/q,-1)));
% end
```

end

```
ind_V_cb=(Int_coor(length(Int_coor)-2)/delta_z)*1e-10;
% text(Int_coor(length(Int_coor)-2), (V_cb(ind_V_cb)*1e3/q)+10, 'Vb');
% text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+2*c_s), (V_cb(ind_V_cb)*1e3/q)+10, '=');
```

text((Int_coor(length(Int_coor)-2)+1*c_s), (V_cb(ind_V_cb)*1e3/q)+20,... num2str(roundn(V_cb(ind_V_cb)*1e3/q,-1)));

b=0.1*max((V_cb/q)*1e3); % These factor limits the y-axis

```
axis([60 (max(z)/1e-10)-60 min((V_cb/q)*1e3)-3*b max((V_cb/q)*1e3)+3*b]);
title('Eigenstates')
ylabel('Potential Height (meV)')
xlabel('Growing Axis (Angstrom)')
grid on
```

f=1;

I) plot_result.m

% Resuults Plot

% This program plots the potential, effective mass, dopping and electric field % profiles as well as the wavefunctions for a given heterostructure and % energy levels

function f=plot_result(PSI,E_bound,V,V_be,V_rho,m_star,D,E_f,... sigma,Int_coor,z,delta_z,n_states,n_fig)

% Global definitions

q=1.6e-19;

figure(n_fig)

```
%Ploting the Potential Profile and the wavefunctions of the selected n_states
subplot(3,2,1)
b=0.1*max((V_be/q)*1e3); % This factor limits the y-axis
plot(z/1e-10, (V_be/q)*1e3, 'b', 'LineWidth', 1.5); hold on;
axis([0 max(z)/1e-10 min((V_be/q)*1e3)-b max((V_be/q)*1e3)+b]);
title('Quantum Well Profiles')
ylabel('Band Edge Potential (meV)')
grid on
```

```
subplot(3,2,3)
b=0.1*(max((V_rho/q)*1e3)+eps); % This factor limits the y-axis
plot(z/1e-10, (V_rho/q)*1e3, 'b', 'LineWidth', 1.5); hold on;
axis([0 max(z)/1e-10 min((V_rho/q)*1e3)-b max((V_rho/q)*1e3)+b]);
ylabel('Doping Potential (meV)')
grid on
```

subplot(3,2,5) b=0.1*max((V_be/q)*1e3); % This factor limits the y-axis plot(z/1e-10, (V/q)*1e3, 'b', 'LineWidth', 1.5); hold on; axis([0 max(z)/1e-10 min((V_be/q)*1e3)-b max((V_be/q)*1e3)+b]); ylabel('Total Potential (meV)') xlabel('Growing Axis (Angstrom)') grid on

subplot(3,2,2) b=0.1*(max(D/1e6)+eps); % This factor limits the y-axis plot(z/1e-10, D/1e6, 'b', 'LineWidth', 1.5); hold on; axis([0 max(z)/1e-10 min(D/1e6)-b max(D/1e6)+b]); title('Quantum Well Profiles') ylabel('n-type Doping (cm^-3)') grid on

subplot(3,2,4) b=0.1*(max(sigma)+eps); % This factor limits the y-axis plot(z/1e-10, sigma, 'b', 'LineWidth', 1.5); hold on; axis([0 max(z)/1e-10 min(sigma)-b max(sigma)+b]); ylabel('Areal Charge Density (em^-2)') grid on

subplot(3,2,6) b=0.1*(max(E_f)+eps); % This factor limits the y-axis plot(z/1e-10, E_f, 'b', 'LineWidth', 1.5); hold on; axis([0 max(z)/1e-10 min(E_f)-b max(E_f)+b]); ylabel('Electric Field (V/m)') xlabel('Growing Axis (Angstrom)') grid on

% Plot the well potential and the wavefunctions for the selected states

figure(n_fig+1) % plot(z/1e-10, (V_be/q)*1e3, ':k', 'LineWidth', 1.5); hold on; plot(z/1e-10, (V/q)*1e3, 'k', 'LineWidth', 1.5); hold on;

% Determining caracter separation for the text function c_s=0.02*max(z)*1e10;

Size_PSI=size(PSI); % for n=1:Size_PSI(1)

% Plotting the Eingenstates levels

```
% for m=1:length(z)
```

- % if abs(E_bound(n))>=abs(V(m))
- % plot(z(m)/1e-10,(E_bound(n)/q)*1e3,'--gs','LineWidth',0.5,'MarkerEdgeColor','g',...
- % 'MarkerFaceColor','g','MarkerSize',1.5);hold on;
- % end
- % end

%

% For ploting purpouses, a plotting factor is created to renormalize the % wavefunctions

Plot_fac=(1/max(PSI(1,:)))*0.07*max((V_be/q)*1e3); % The maximum of PSI will be 50 meV plot (z/1e-10,PSI(1,:)*Plot_fac+E_bound(1)*1e3/q, 'k', 'LineWidth', 1.5); %hold on;

- % text(Int_coor(length(Int_coor)-1), E_bound(n)*1e3/q-10, 'E');
- % text((Int_coor(length(Int_coor)-1)+c_s), E_bound(n)*1e3/q-10, num2str(n));
- % text((Int_coor(length(Int_coor)-1)+2*c_s), E_bound(n)*1e3/q-10, '=');
- % text((Int_coor(length(Int_coor)-1)+3*c_s), E_bound(n)*1e3/q-10, num2str(E_bound(n)*1e3/q));

pause

% end

for n=3:3:12

% Plot_fac=(1/max(PSI(n,:)))*0.04*max((V_be/q)*1e3); % The maximum of PSI will be 50 meV plot (z/1e-10,PSI(n,:)*Plot_fac+E_bound(n)*1e3/q, 'k', 'LineWidth', 1.5); hold on;

end

% ind_V=(Int_coor(length(Int_coor)-1)/delta_z)*1e-10; % text(Int_coor(length(Int_coor)-1), (V(ind_V)*1e3/q)+10, 'Vb'); % text((Int_coor(length(Int_coor)-1)+2*c_s), (V(ind_V)*1e3/q)+10, '='); % text((Int_coor(length(Int_coor)-1)+3*c_s), (V(ind_V)*1e3/q)+10, num2str(V(ind_V)*1e3/q));

b=0.1*max((V_be/q)*1e3); % This factor limits the y-axis axis([0 max(z)/1e-10 min((V_be/q)*1e3)-b max((V_be/q)*1e3)+3*b]); title('Quantum Well Wavefunctions') ylabel('Potential (meV)') xlabel('Growing Axis (Angstrom)') % grid on

f=1;

J) poisson.m

% Poisson's Equation Solution

% Fabio Durante

% 01/08/2005

%

% This program solves the Poisson's equation to compute the additional potential % arising from the dopping concentation.

% Global definitions

% epsilon relative for GaAs is 13.8. It is necessary to define a epsilon % profile, deppending on the layer material.

epsilon_0=8.8542e-12; epsilon_r=epsilon*epsilon_0;

% Calculating the total carrier concentration per unit area

```
Tot_carr=0;
for n=1:length(z)
Tot_carr=Tot_carr+D(n)*delta_z;
end
```

% Computing the number of carriers in each subband

```
% for m=1:n_states
% N(m)=Tot_carr*Level_perc(m);
% end
```

N=carr_dist(E_bound,delta_E,m_star,Tot_carr, well_coor,T,V,n_states);

% Calculating the net areal charge density (sigma)

```
for n=1:length(z)
    sigma(n)=0;
    for m=1:n_states
        sigma(n)=sigma(n)+N(m)*(PSI(m,n)*PSI(m,n)*delta_z);
    end
    sigma(n)=-sigma(n)+D(n)*delta_z;
end
```

% Computing the electric field along the growing axis (z);

```
for n=1:length(z)
E_f(n)=0;
for m=1:length(z)
```

% using positive charges for the valence band
% if vb==1
% q=q;
% else
% q=q;
% end

```
\label{eq:eq:end} \begin{split} E_f(n) = & E_f(n) + (q^* sigma(m)/epsilon_r(n))^* sign(z(n)-z(m)); \\ end \\ end \end{split}
```

% Calculating the potential along the growing axis (z);

```
V_rho(1)=0;
for n=2:length(z)
V_rho(n)=V_rho(n-1)+q*E_f(n)*delta_z;
end
```

K) poisson_vb.m

% Poisson's Equation Solution
% Fabio Durante
% 01/08/2005
%
% This program solves the Poisson's equation to compute the additional potential
% arising from the dopping concentation.

% Global definitions

% epsilon relative for GaAs is 13.8. It is necessary to define a epsilon

% profile, deppending on the layer material.

epsilon_0=8.8542e-12; epsilon_r=epsilon*epsilon_0;

% Calculating the total carrier concentration per unit area

```
Tot_carr=0;
for n=1:length(z)
Tot_carr=Tot_carr+D(n)*delta_z;
end
```

% Computing the number of carriers in each subband

```
% for m=1:n_states
% N(m)=Tot_carr*Level_perc(m);
% end
```

N=carr_dist(E_bound,delta_E,m_star,Tot_carr, well_coor,T,V,n_states);

% Calculating the net areal charge density (sigma)

```
for n=1:length(z)
    sigma(n)=0;
    for m=1:n_states
        sigma(n)=sigma(n)+N(m)*(PSI(m,n)*PSI(m,n)*delta_z);
    end
    sigma(n)=-sigma(n)+D(n)*delta_z;
end
```

% Computing the electric field along the growing axis (z);

```
for n=1:length(z)
E_f(n)=0;
for m=1:length(z)
```

```
% using positive charges for the valence band
% if vb==1
% q=q;
% else
% q=q;
% end
```

$$\label{eq:eq:end} \begin{split} & \mathsf{E}_f(n) {=} \mathsf{E}_f(n) {+} (q^* sigma(m) / epsilon_r(n))^* sign(z(n) {-} z(m)); \\ & \text{end} \end{split}$$

% Calculating the potential along the growing axis (z);

```
V_rho(1)=0;
for n=2:length(z)
V_rho(n)=V_rho(n-1)+q*E_f(n)*delta_z;
end
```

L) psi_inf.m

% Wavefunction at infinity

function f=psi_inf(E,delta_z,z_length,m_star,V,Eg)

% Global definitions

m0=9.11e-31; q=1.6e-19; c=3e8; h=6.626e-34; h_bar=h/2/pi; Kb=1.38e-23;

% Nonparabolicity of m_star(E,z). This aproach is from [Harrison, Paul, Quantum % Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics, John Willey & % Sons Inc., New York, June 2001, pg 103, equations (3.76) and (3.77)]

```
for n=1:z_length
    alfa=((1-m_star(n)/m0)^2)/Eg(n);
    m_star(n)=m_star(n)*(1+alfa*(E-V(n)));
end
```

```
% Boudary conditions
```

psi(1)=0; psi(2)=1;

% This aproach is adapted from [Harrison, Paul, Quantum % Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics, John Willey & % Sons Inc., New York, June 2001, pg 89 equation (3.53)]

f=psi(3);

M) shoot.m

% Shooting Method
% Fabio Durante
% 01/06/2005
%
% This program runs the m-file hetstr to get the structure parameters, Potential
% (V) and Effective Mass (m_star) profiles. Then, it solves the Scrodinger
% Equation for the structure using the shooting method. Considering that
% the wavefunction of for a confined energy level must be zero at infinity,
% it calculates the wavefunction value for an increasing energy level until
% it crosses zero. Then, it uses Newton-Hafson method to refine the value
% of the confined energy level.

% Getting the Heterostructure Parameters

% n_states is the number of states that will be calculated

% The routh energy step delta_E is used in the first computatinon

delta_E=q*1e-5; % delta_E=q*1e-3;

% The fine energy step epson_E is used to refine the first estivative

% epson_E=q*1e-5; epson_E=q*1e-9;

% The energy precision E_pres is the desired precision level

% E_pres=q*1e-9; E_pres=q*1e-12;

% The starting energy level is the minimum potential

E=delta_E;

```
for n=1:n_states
    psi_1=psi_inf(E,delta_z,length(z),m_star,V,Eg);
    psi_2=psi_1;
    while psi_1*psi_2>0
        psi_1=psi_2;
        E=E+delta_E;
        psi_2=psi_inf(E,delta_z,length(z),m_star,V,Eg);
    end
```

% This improves the estimation of the energy by getting the mid point % between the up-divergence and down-divergence

```
E_mid=E-delta_E*(abs(psi_2)/(abs(psi_1)+abs(psi_2)));
```

% The Newton-Raphson method is applied here to refine the estimated % confined energy levels

```
E_err=2*E_pres;
while (E_err>E_pres)
  y=psi_inf(E,delta_z,length(z),m_star,V,Eg);
  dy=(psi_inf(E+epson_E,delta_z,length(z),m_star,V,Eg)...
    -psi_inf(E-epson_E,delta_z,length(z),m_star,V,Eg))/(2*epson_E);
  E_err=y/dy;
  E=E-E err;
end
```

% The bounded energy levels are stored in E bound

E_bound(n)=E;

% The increase of the energy level prepares the loop to estimate the % next bounded state

E=E+delta E: end

% Checking if the there is a second bound state or not

```
V_cb=V;
```

```
if F <= 0
  V_top=V_cb(round((well_ini/delta_z))-1);
else
  V_top=V_cb(round((well_end/delta_z))+1);
end
```

% V_top must account on doped assymetric wells. It must be included this % effect here.

```
% if E bound(2)>V top
% cont=1;
% end
```

% A function may be created to store only the confined levels. It is % possible to notice that when the Energy levels are greater than the % maximum potential, they are very close to each other (continum).

% Also under external bias a reference must be well estabilished otherwise % the Energy levels don't have any meaning.

% E_test_routh/q % intermediary step to test the convergence % E test mid/q % intermediary step to test the convergence

% E_bound/q*1e3

% Computing and Plotting the wavefunctions for the energy levels.

for n=1:n_states
 ns=n;
 PSI(n,:)=wavefunc(E_bound(n),delta_z,length(z),m_star,V,Eg,cont,ns);
end

PSIc=PSI;

% This tests the wavefunction normalization

% teste=sum((PSI(2,:).*conj(PSI(2,:)))*delta_z)

% Calling the continuum calculation if needed

% Defining the proportion of charge in each of the quantum well energy % levels. This is done manually here. However it is necessary to develop an % algorithm based upon the theory to calculate that.

% For testing purposes, all the charge carriers will be assumed in the % lowest energy level.

```
% for n=1:n_states
% if n==1
% Level_perc(n)=1;
% else
% Level_perc(n)=0;
% end
% end
```

N) shoot_con.m

% Shooting Method
% Fabio Durante
% 01/06/2005
%
% This program runs the m-file hetstr to get the structure parameters, Potential
% (V) and Effective Mass (m_star) profiles. Then, it solves the Scrodinger
% Equation for the structure using the shooting method. Considering that
% the wavefunction of for a confined energy level must be zero at infinity,
% it calculates the wavefunction value for an increasing energy level until
% it crosses zero. Then, it uses Newton-Hafson method to refine the value
% of the confined energy level.

% Getting the Heterostructure Parameters

% n_states is the number of states that will be calculated

% The routh energy step delta_E is used in the first computatinon

delta_E=q*1e-5; % delta_E=q*1e-3;

% The fine energy step epson_E is used to refine the first estivative

% epson_E=q*1e-5; epson_E=q*1e-9;

% The energy precision E_pres is the desired precision level

% E_pres=q*1e-9; E_pres=q*1e-12;

% The starting energy level is the minimum potential

```
% E=0.08*q+E_bound(1);
```

```
E=q*(1.243/lamb_ini)+E_bound(1); % This is to handle the biased structure
n=1; E_cont(1)=0;
% while E_cont(n)<0.2554*q+E_bound(1)
% while E_cont(n)<(q*(1.243/lamb_end)+E_bound(1))
while E_cont(n)<1.5*max(V)
```

```
n=n+1;
% for n=1:n_states
psi_1=psi_inf(E,delta_z,length(z),m_star,V,Eg);
psi_2=psi_1;
while psi_1*psi_2>0
    psi_1=psi_2;
    E=E+delta_E;
    psi_2=psi_inf(E,delta_z,length(z),m_star,V,Eg);
end
```

% This improves the estimation of the energy by getting the mid point % between the up-divergence and down-divergence

E_mid=E-delta_E*(abs(psi_2)/(abs(psi_1)+abs(psi_2)));

% The Newton-Raphson method is applied here to refine the estimated % confined energy levels

E_err=2*E_pres; while (E_err>E_pres) y=psi_inf(E,delta_z,length(z),m_star,V,Eg);

```
dy=(psi_inf(E+epson_E,delta_z,length(z),m_star,V,Eg)...
  -psi_inf(E-epson_E,delta_z,length(z),m_star,V,Eg))/(2*epson_E);
  E_err=y/dy;
  E=E-E_err;
end
```

% The bounded energy levels are stored in E_bound

E_cont(n)=E;

% The increase of the energy level prepares the loop to estimate the % next bounded state

E=E+delta_E;

end

E_c=E_cont(2:length(E_cont));

% V_top must account on doped assymetric wells. It must be included this % effect here.

% A function may be created to store only the confined levels. It is % possible to notice that when the Energy levels are greater than the % maximum potential, they are very close to each other (continum).

% Also under external bias a reference must be well estabilished otherwise % the Energy levels don't have any meaning.

% E_test_routh/q % intermediary step to test the convergence % E_test_mid/q % intermediary step to test the convergence

% E_bound/q*1e3

% Computing and Plotting the wavefunctions for the energy levels.

```
S_PSI=size(PSIc);
% C1=Lc-Lb;
C1=Lc-Lb;
C2=C1+S_PSI(2);
C3=length(z);
PSI=[];
```

```
% forcing convergence for the confined states
for n=1:n_states
PSI(n,1:C1)=0;
PSI(n,C1+1:C2)=PSIc(n,:);
PSI(n,C2+1:C3)=0;
end
```

```
for n=1:length(E_c)
```

ns=n;

```
E_bound(n+n_states-1)=E_c(n);
PSI(n+n_states-1,:)=wavefunc(E_bound(n+n_states-1),delta_z,length(z),m_star,V,Eg,cont,ns);
% storing all energies in the same vector
% for ploting purposes
```

end

cont=0; % This tests the wavefunction normalization

```
% teste=sum((PSI(2,:).*conj(PSI(2,:)))*delta_z)
```

% Defining the proportion of charge in each of the quantum well energy % levels. This is done manually here. However it is necessary to develop an % algorithm based upon the theory to calculate that.

% For testing purposes, all the charge carriers will be assumed in the % lowest energy level.

```
% for n=1:n_states
% if n==1
% Level_perc(n)=1;
% else
% Level_perc(n)=0;
% end
% end
```

O) wavefunc.m

% Wavefunction

% This program computes the wavefunction for a given confined energy level

function f=wavefunc(E,delta_z,z_length,m_star,V,Eg,cont,ns)

% Global definitions

m0=9.11e-31; q=1.6e-19; c=3e8; h=6.626e-34; h_bar=h/2/pi; Kb=1.38e-23;

% Nonparabolicity of m_star(E,z). This aproach is from [Harrison, Paul, Quantum % Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics, John Willey & % Sons Inc., New York, June 2001, pg 103, equations (3.76) and (3.77)]

```
for n=1:z_length
alfa=((1-m_star(n)/m0)^2)/Eg(n);
m_star(n)=m_star(n)*(1+alfa*(E-V(n)));
end
```

```
% Boudary conditions
```

psi(1)=0; psi_fun(1)=psi(1); psi(2)=1; psi_fun(2)=psi(2);

```
% This aproach is adapted from [Harrison, Paul, Quantum
% Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics, John Willey &
% Sons Inc., New York, June 2001, pg 89 equation (3.53)]
```

s=2; for n=1:z_length-2 psi(3)=((2*((delta_z/h_bar)^2)*(V(s)-E)+(2/(m_star(s)+m_star(s+1)))... +(2/(m_star(s)+m_star(s-1))))*psi(2)-(2/(m_star(s)+m_star(s-1)))*psi(1))... *(m_star(s)+m_star(s+1))/2; psi(1)=psi(2);psi(2)=psi(3); s=s+1; % if ns==1 & cont==1 & s>z length/2+200 % psi_fun(s)=0; % else psi_fun(s)=psi(3); % end end

% The wavefunction is normalized by Nor_fac that is one over the squareroot % of the integral over all z of the wavefunction times its complex % conjugate.

Nor_fac=1/sqrt(sum((psi_fun.*conj(psi_fun))*delta_z)); psi_fun=psi_fun*Nor_fac;

f=psi_fun;

P) absorp_t

% Absorption coefficient

```
E_inc=[];Avbb=[];Cbb1=[];Cbb2=[];alfa_bb=[];d_PSI=[];
Efc=[];kf=[];Avbc=[];Cbc2=[];Cbc3=[];PSIbc=[]; alfa_bc=[];
Dens_stat=[]; alfa_fit=[]; wavelength_fit=[]; wavelength_bc=[];
alfa_max=[];lambida_max=[];alfa_max_fit=[];
phi=0;
wavelength=(3:0.01:18)*1e-6;
E_inc=h*c./wavelength; % wh_bar
Ei=E_bound(1);
Nd=max(D);
m_eff=min(m_star);
m_eff_b=max(m_star);
gamma=25e-3*q; % obtained empirically normally 10-20 meV
nr=3.6; % need to be incorporate in the material properties
```

PSI_size=size(PSI);

% derivative of PSI
for n=2:PSI_size(2)-1

```
d_PSI(1,n) = (PSI(1,n+1) - PSI(1,n-1)) / (2*delta_z);
end
d PSI(1,1)=d PSI(1,2); d PSI(1,PSI size(2))=d PSI(1,PSI size(2)-1);
if V_top>E_bound(2)& F==0
    % Bound to bound absorption
    if step==1
        z_os=z-(b_len+s_len+w_len/2)*1e-10; % rescaling the z axis to apply
in the oscillator strength
    else
        z_{os=z-(b_{len+w_{len/2}})*1e-10;
    end
    Efb=E_bound(2);
%
      Avbb=(-m_eff*Ei/(h_bar^2))*sum(PSI(2,:).*z_os.*PSI(1,:)*delta_z);
    Avbb=sum(PSI(2,:).*d_PSI(1,:)*delta_z);
    Cbb1=(Nd*q^2*h_bar^3)./(E_inc*m_eff^2*epson_0*nr*c);
    % Cbb2=((m_eff/h_bar^2).*(Efb-Ei)).^2*(abs(Avbb))^2;
    Cbb2=(abs(Avbb))^2;
    g=(1/(2*pi))*gamma./((Efb-Ei-E_inc).^2+(gamma/2)^2);
    alfa bb=(Cbb1.*Cbb2.*q)*((cos(pi*phi/180)))^2/100; % (cm^-1)
    [Cbb,Ibb]=max(alfa bb);
    csvwrite('nir.dat',[alfa_bb' (wavelength/le-6)']);
    maximum absorption=Cbb
    lambda_peak=wavelength(Ibb)
    figure(4)
    plot((wavelength/1e-6), alfa_bb); %hold on;
    xlabel('Wavelength (um)');
    ylabel('Absorption Coefficient (cm<sup>-1</sup>)');
    title('Bound-to-Bound');
    grid on;
%
      axis([50 200 -0.2 1.2]);
else
    % Bound to continuum
    if step==1
%
          z_os=z-(Pseud_fac+b_len+s_len+w_len/2)*le-10; % rescaling the z
axis to apply in the oscillator strength
        z_os=z-(Pseud_fac+b_len+s_len+w_len/2)*le-10;
    else
        z_os=z-(Pseud_fac+b_len+w_len/2)*le-10;
    end
    Efc=E bound(5:1:length(E bound));
%
      Efc=[E bound(2) Efc];
    PSIbc=PSI(5:1:PSI size(1),:);
%
      PSIbc=[PSI(2,:); PSIbc];
    PSIbc size=size(PSIbc);
    Cbc1=(Nd*q^2*h_bar^2*length(z_os)*le-10)...
       ./(2*m_eff^2*epson_0*nr*c);
```

```
for n=1:PSIbc size(1)
        Avbc(n) = sum(PSIbc(n,:).*d_PSI(1,:)*delta_z);
2
          Dens_stat(n) = sqrt((2*m_eff_b)./((Efc(n))^2.*(Efc(n) - 
E bound(2)+eps)));
        Dens_stat(n) = sqrt((2*m_eff_b)./((Efc(n))^2.*(Efc(n) - 
E_bound(2)+eps)));
         Cbc3(n) = ((m_eff/h_bar^2).*(Efc(n)-Ei)).^2.*(abs(Avbc(n)))^2;
   2
        Cbc3(n) = (abs(Avbc(n)))^2;
        alfa_bc(n)=(Cbc1*Dens_stat(n)*Cbc3(n))/100; % (cm^-1)
    end
   wavelength_bc=h*c./(Efc-Ei);
    % using cubic spline interpolation to smoth the absorption courve
    wavelength_fit=wavelength_bc(length(wavelength_bc)):le-
8:wavelength_bc(1);
%%% alfa_fit=spline(wavelength_bc,alfa_bc,wavelength_fit);
   wavelength_bc=fliplr(wavelength_bc);
   alfa_bc=fliplr(alfa_bc);
    % Taking the envelope of alfa using the fited data
    v=1;
     % Taking the envelope of alfa using the raw data
    for r=2:length(alfa_bc)-1
        if alfa_bc(r)>alfa_bc(r+1)&alfa_bc(r-1)<alfa_bc(r)</pre>
            alfa_max(v)=alfa_bc(r);
            lambida_max(v)=wavelength_bc(r);
            v=v+1; nc=r+1;
        end
    end
    for j=nc:length(alfa_bc)
    alfa_max(v)=alfa_bc(j);
    lambida_max(v)=wavelength_bc(j);
    v=v+1;
    end
alfa_max_fit=interp1(lambida_max,alfa_max,wavelength_fit,'cubic');
    [Cbc, Ibc] = max(alfa_max_fit);
    maximum_absorption=Cbc
    lambda_peak=wavelength_fit(Ibc)
    figure(5)
Ŷ
    plot(wavelength_bc/le-6, alfa_bc/max(alfa_bc)); hold on;
    plot(wavelength bc/le-6, alfa bc, 'ok'); hold on;
%
    plot(lambida_max/le-6, alfa_max,'or');hold on;
      plot(wavelength fit/le-6, alfa fit/max(alfa fit));
%
plot(wavelength_fit/le-6, alfa_max_fit);
%
      plot(1.243./wavelength_fit/1e6, alfa_fit/max(alfa_fit));
    xlabel('Incident Wavelength (um)');
    ylabel('Absorption Coefficient (cm^-1)');
    title('Bound-to-Continuum');
```

```
grid on;
%
      axis([0 14 0 1.5]);
end
% else
%
       if step==1
°
%
           % rescaling the z axis to apply in the oscillator strength
%
           z_os=z-(Pseud_fac+b_len+s_len+w_len/2)*le-10;
%
    else
%
           z_os=z-(Pseud_fac+b_len+w_len/2)*le-10;
%
    end
2
2
      PSI_size=size(PSI);
2
2
      Efc=E_bound(3:1:length(E_bound));
8 8
        Efc=[E_bound(3) Efc];
%
      PSIbc=PSI(3:1:PSI_size(1),:);
8 8
        PSIbc=[PSI(3,:); PSIbc];
%
      PSI_size=size(PSIbc);
%
      Cbc1=(Nd*q^2*h_bar^2*length(z_os)*le-10)...
%
          ./(2*m_eff^2*epson_0*nr*c);
%
°
      for n=1:PSI size(1)
%
          Avbc(n)=sum(PSIbc(n,:).*d PSI(1,:)*delta z);
% %
            Dens_stat(n) = sqrt((2*m_eff_b)./((Efc(n))^2.*(Efc(n) - Cfc(n)))^2
E_bound(2)+eps)));
          Dens_stat(n) = sqrt((2*m_eff_b)./((Efc(n))^2.*(Efc(n)-V_top)));
%
           Cbc3(n) = ((m_eff/h_bar^2).*(Efc(n)-Ei)).^2.*(abs(Avbc(n)))^2;
%
     %
%
          Cbc3(n) = (abs(Avbc(n)))^2;
%
           alfa_bc(n)=(Cbc1*Dens_stat(n)*Cbc3(n))/100; % (cm^-1)
%
      end
%
%
    [Cbc, Ibc] = max(alfa_bc);
°
%
    maximum_absorption=Cbc
%
      wavelength_bc=h*c./(Efc-Ei);
%
    lambda_peak=wavelength_bc(Ibc)
%
%
%
    figure(4)
%
    plot(wavelength_bc, alfa_bc);
    xlabel('Incident Wavelength');
%
%
    ylabel('Absorption Coefficient (cm<sup>-1</sup>)');
      title('Bound-to-Continuum');
%
%
%
      grid on;
% end
```

Q) Idark x vbias - Levine.m

%definição dos paramentros pag r18 clear all;clc; T=51;%temperatura do detector% L=345e-10;%período de repertição dos poços% Nd=1.4e24;%Densidade de portadores no poço em m^-3% Lw=40e-10;%largura do poço quântico em metros% e=1.6e-19;%carga do elétron (coulombs)% I=50*L+305e-10;%comprimento do detector em metros% area=9e-8;%área útil do fotodetector% tirada da apresentação Detection Wavelength Tuning and Dark current modeling h = (6.6260693e-34)/(2*pi);%constante de planck em J.s% kb=1.381e-23;%constante de Boltzman em J/K% Lb=305e-10;%largura da barreira em metros %Artigo Y.Fu x=0.29;%composição do Al mo=9.11e-31;%massa do elétron em Kg% m_GaAs=0.067*mo;%massa efetiva do GaAs m_AIAs=0.15*mo;%massa efetiva do AlAs m_AIGaAs=1/((x/m_GaAs)+((1-x)/m_AIAs));%massa efetiva do ternário. mef=(m_GaAs+6*m_AIGaAs)/7;%massa efetiva do elétron no detector considerando a média ponderada entre a massa efetiva do elétron no poço considerando AsxGa1-xAI, segundo o paper thibeaudeau mef=0.067+0.083x, para x = 0.27

%resolução da eq. 19 do levine %Ef=0.02*e; %mili eV Ef = kb*T*log(exp(((pi*(h^2)*Lw*Nd)/(mef*kb*T))-1));%calculo do nivel de quasi-Fermi a partir das eqs. 22 e 23 do artigo do Levine, pag. R20% E1=0.0986*e; Vo=1.09*0.23*e;%mili eV C1=mef/(pi*(h^2)*L); mi=0.1;%mobilidade do elétron em m^2/Vs - artigo Mendez. vsat=5e4;%velocidade de saturação do elétron em m/s

Np=1000;

```
% % E_step_a=((Vo-e*V)-E1)/Np;
% % Ea=E1:E_step_a:Vo-e*V;
% % E_step_b=(Vo-(Vo-e*V))/Np;
% % Eb=(Vo-e*V):E_step_b:Vo;
% % E_step_c=(10*Vo-Vo)/Np;
% % Ec=Vo:E_step_c:10*Vo;
nv=0;
for V=0.01:0.01:5
nv=nv+1;
```

campo=V/I;%cálculo do campo elétrico em V/m%

```
E_step_a=((Vo-e*V/50)-E1)/Np;
Ea=E1:E_step_a:Vo-e*V/50;
E_step_b=(Vo-(Vo-e*V/50+E_step_a))/Np;
Eb=(Vo-e*V/50+E_step_a):E_step_b:Vo;
E_step_c=(5*Vo-Vo)/Np;
Ec=Vo:E_step_c:5*Vo;
```

```
V_p(nv)=V;
vdrift=(mi*campo)/(sqrt(1+((mi*campo)/vsat)^2));%extraído da tese do Cel Durante, eq. 2.82%
for n=1:Np+1;
```

 $inta(n) = ((1 + exp((Ea(n)-E1-Ef)/(kb*T)))^{-1})*exp((-4*Lb/(3*e*V/50))*sqrt(2*mef/h^2)*((Vo-Ea(n))^{-1}.5));$

intb(n)=((1+exp((Eb(n)-E1-Ef)/(kb*T)))^-1)*exp((-4*Lb/(3*e*V/50))*sqrt(2*mef/h^2)*(Vo-Eb(n))^1.5);

```
% int(n)=((1+exp((E(n)-E1-Ef)/(kb*T)))^-1)*((2*E(n)/(L*Vo))*(2*(Vo-E(n))/mef)^(1/2))*exp((-
4/(3*e*campo*h))*((2*mef)^(1/2))*(Vo-E(n))^(3/2));
% int(n)=((1+exp((E(n)-E1-Ef)/(kb*T)))^-1)*((2*E(n)/(L*Vo))*(2*(Vo-E(n))/mef)^0.5)*exp((-
4/(3*e*h*campo))*sqrt(2*mef)*(Vo-E(n))^1.5);
    intc(n) = ((1 + exp((Ec(n) - E1 - Ef)/(kb^{*}T)))^{-1});
% %
          figure(n);plot(E(n),int(n));hold on;
  end
  n_star=C1*(trapz(Ea,inta)+trapz(Eb,intb)+trapz(Ec,intc));
  Idark(nv)=real(n_star*vdrift*area*e);%extraído da tese do Cel Durante, eq. 2.93. o valor de módulo foi
colocado por não haver sentido fisico em mudança de sentido desta corrente%
end
figure(1);
semilogy(V_p,Idark, '.c');hold on;
whitebg('w');
%grid;
xlabel('Vbias(V)');
ylabel('Corrente de Escuro (A)');
```

```
title('CORRENTE DE ESCURO x Vbias');
```

R) Idark x Vbias.m

```
%Reprodução do paper do Levine
%definição dos paramentros pag r18
clear all;clc;
T=77;%temperatura do detector%
L=352e-10; % período de repertição dos poços %
Nd=0.5e24; % Densidade de portadores no poço em m^-3%
Lw = 52e-10; % largura do poço quântico em metros %
e=1.6e-19;%carga do elétron (coulombs)%
1=20*L+300e-10;%comprimento do detector em metros%
area=4e-8;%área útil do fotodetector% tirada da apresentação Detection
Wavelength Tuning and Dark current modeling
h = (6.6260693e-34)/(2*pi);%constante de planck em J.s%
kb=1.381e-23;%constante de Boltzman em J/K%
Lb=300e-10;%largura da barreira em metros
%Artigo Y.Fu
x=0.26;%composição do Al
mo=9.11e-31;%massa do elétron em Kg%
m_GaAs=0.067*mo;%massa efetiva do GaAs
m_AlAs=0.15*mo;%massa efetiva do AlAs
m_AlGaAs=1/((x/m_GaAs)+((1-x)/m_AlAs));%massa efetiva do ternário.
mef=(m_GaAs+6*m_AlGaAs)/7;%massa efetiva do elétron no detector considerando
a média ponderada entre a massa efetiva do elétron no poço considerando
AsxGal-xAl, segundo o paper thibeaudeau mef=0.067+0.083x, para x = 0.27
%resolução da eq. 19 do levine
%Ef=0.02*e; %mili eV
Ef = kb*T*log(exp(((pi*(h^2)*Lw*Nd)/(mef*kb*T))-1));%calculo do nivel de
quasi-Fermi a partir das eqs. 22 e 23 do artigo do Levine, pag. R20%
E1 = 0.071 * e;
Vo = 0.2088*e;% altura da barreira em J
%Vo=0.65*1.45*x;
C1=mef/(pi*(h^2)*L);
%mi=0.1;%mobilidade do elétron em m^2/Vs - artigo Mendez.
```

```
%vsat=5e4;%velocidade de saturação do elétron em m/s
```

```
mi GaAs=(8500e-4)*(T/300)^(-2.2);
mi AlAs=(250e-4)*(T/300)^(-2.1);
mi_AlGaAs = 1/((((1-x)/(mi_GaAs))+((x)/(mi_AlAs))+((1-x)*(x)/(180e-4)));
mi = (mi_GaAs + 6*mi_AlGaAs)/7;
vsat_GaAs=(0.72e5)/(1-0.56+0.56*(T/300));
vsat_AlAs=(0.85e5)/(1-0.55+0.55*(T/300));
vsat_AlGaAs= (1-x)*vsat_GaAs + x*vsat_AlAs - 0.0512e5*x*(1-x);
vsat = (vsat_GaAs + 6*vsat_AlGaAs)/7;
Np=1000;
% % E_step_a=((Vo-e*V)-E1)/Np;
% % Ea=E1:E_step_a:Vo-e*V;
% % E_step_b=(Vo-(Vo-e*V))/Np;
% % Eb=(Vo-e*V):E_step_b:Vo;
% % E_step_c=(10*Vo-Vo)/Np;
% % Ec=Vo:E_step_c:10*Vo;
nv=0;
for V=0:0.01:4
    nv=nv+1;
    campo=V/l;%cálculo do campo elétrico em V/m%
    E step a=((Vo-e*V/20)-E1)/Np;
    Ea=E1:E step a:Vo-e*V/20;
    E step b=(Vo-(Vo-e*V/20+E step a))/Np;
    Eb=(Vo-e*V/20+E_step_a):E_step_b:Vo;
    E step c=(5*Vo-Vo)/Np;
    Ec=Vo:E_step_c:5*Vo;
    V p(nv) = V;
    vdrift=(mi*campo)/(sqrt(1+((mi*campo)/vsat)^2));%extraído da tese do Cel
Durante, eq. 2.82%
    for n=1:Np+1;
       inta(n) = ((1+exp((Ea(n)-E1-Ef)/(kb*T)))^{-1})*exp((-
4*Lb/(3*e*V/20))*sqrt(2*mef/h^2)*((Vo-Ea(n))^1.5-(Vo-Ea(n)-e*V/20)^1.5));
       intb(n) = ((1+exp((Eb(n)-E1-Ef)/(kb*T)))^{-1})*exp((-
4*Lb/(3*e*V/20))*sqrt(2*mef/h^2)*(Vo-Eb(n))^1.5);
% int(n)=((1+exp((E(n)-E1-Ef)/(kb*T)))^-1)*((2*E(n)/(L*Vo))*(2*(Vo-
E(n))/mef)^{(1/2)}*exp((-4/(3*e*campo*h))*((2*mef)^{(1/2)})*(Vo-E(n))^{(3/2)});
% int(n)=((1+exp((E(n)-E1-Ef)/(kb*T)))^-1)*((2*E(n)/(L*Vo))*(2*(Vo-E(n))/mef
)^0.5)*exp((-4/(3*e*h*campo))*sqrt(2*mef)*(Vo-E(n))^1.5);
       intc(n) = ((1+exp((Ec(n)-E1-Ef)/(kb*T)))^{-1});
% %
            figure(n);plot(E(n),int(n));hold on;
    end
    n star=C1*(trapz(Ea,inta)+trapz(Eb,intb)+trapz(Ec,intc));
    Idark(nv)=real(n star*vdrift*area*e);%extraído da tese do Cel Durante,
eq. 2.93. o valor de módulo foi colocado por não haver sentido fisico em
mudança de sentido desta corrente%
end
figure(1);
semilogy(V_p,Idark, '.c');hold on;
whitebg('w');
```

```
grid;
```

```
xlabel('Vbias(V)');
ylabel('Corrente de Escuro (A)');
title('CORRENTE DE ESCURO x Vbias');
```

S) efqtn x vbias.m

%Eficiencia quantica x Vbias%

clear all,clc

T=77;%temperatura do detector% L=540e-10;%período de repertição dos poços% Nd=1e24;%Densidade de portadores no poço em m^-3% Lw=40e-10;%largura do poço quântico em metros% e=1.6e-19;%carga do elétron (coulombs)% l=50*L+500e-10;%comprimento do detector em metros% area=9e-8;%área útil do fotodetector% tirada da apresentação Detection Wavelength Tuning and Dark current modeling h = (6.6260693e-34)/(2*pi);%constante de planck em J.s% kb=1.381e-23;%constante de Boltzman em J/K% Lb=500e-10;%largura da barreira em metros alfa=41000; lambda=9e-6;

%Artigo Y.Fu x=0.26;%composição do Al mo=9.11e-31;%massa do elétron em Kg% m_GaAs=0.067*mo;%massa efetiva do GaAs m_AlAs=0.15*mo;%massa efetiva do AlAs m_AlGaAs=1/((x/m_GaAs)+((1-x)/m_AlAs));%massa efetiva do ternário. mef=(m_GaAs+6*m_AlGaAs)/7;%massa efetiva do elétron no detector considerando a média ponderada entre a massa efetiva do elétron no poço considerando AsxGa1-xAl, segundo o paper thibeaudeau mef=0.067+0.083x, para x = 0.27

% % mi=0.1;%mobilidade do elétron em m^2/Vs - pag.R19 Levine% % % vsat=5e4;%velocidade de saturação do elétron em m/s- pag.R19 Levine%

$$\label{eq:mi_GaAs} \begin{split} & \text{mi_GaAs} = (8500e-4)^*(\text{T}/300)^{(-2.2)}; \\ & \text{mi_AlAs} = (250e-4)^*(\text{T}/300)^{(-2.1)}; \\ & \text{mi_AlGaAs} = 1/(((1-x)/(\text{mi_GaAs})) + ((x)/(\text{mi_AlAs})) + ((1-x)^*(x)/(180e-4)))); \\ & \text{mi} = (\text{mi_GaAs} + 6^*\text{mi_AlGaAs})/7; \\ & \% & \% \\ & \text{vsat_GaAs} = (0.72e5)/(1-0.56+0.56^*(\text{T}/300)); \\ & \text{vsat_AlAs} = (0.85e5)/(1-0.55+0.55^*(\text{T}/300)); \\ & \text{vsat_AlGaAs} = (1-x)^*\text{vsat_GaAs} + x^*\text{vsat_AlAs} - 0.0512e5^*x^*(1-x); \\ & \text{vsat} = (\text{vsat_GaAs} + 6^*\text{vsat_AlGaAs})/7; \end{split}$$

lo=4.71e-6;%dado empírico

E1=0.071*e; Vo=0.2088*e; Vp=0.013; Vb=Vp*50; rt_o=1.9;

```
v=(2*pi*h)/(Lw*mef);%eq. 14 Levine - R13
n=0;
for V=0:0.01:3
    n=n+1;
    campo(n)=V/l;%cálculo do campo elétrico%
    V_p(n)=V;
    vdrift(n)=(mi*campo(n))/sqrt(1+((mi*campo(n))/vsat)^2);%extraído da tese do Cel Durante, eq. 2.82%
    rt=rt_o*exp(-V/Vb);
    pe(n) =1/((1+ rt));%eq.35 Levine R14
    etcn = 14
    et
```

```
eta_max=(1-exp(-2*alfa*lo))/2;%Eq.13 Levine R12
eta(n)=(eta_max*pe(n));%eq.34 Levine R29
plot(V_p,eta*100,'.r');
%semilogy(V,rt,'.r');
hold on;
```

```
end
```

```
whitebg('w');
xlabel('Vbias (V)');
ylabel('Eficiência quântica \eta');
title('Eficiência quântica x Vbias');
```

T) ganho x vbias.m

% GANHO DE FOTOCONDUTIVIDADE x Vbias %

x=0.26; T=77;

tau = 16e-14;%tempo de meia vida do elétron durante o escape do poço% L=540e-10;%período de repetição dos poços% I=50*L+500e-10;%comprimento do detector em metros%

```
nv=nv+1;
V_p(nv)=V;
campo=V/l;%cálculo do campo elétrico%
```

vdrift=(mi*campo)/sqrt(1+((mi*campo)/vsat)^2);%extraído da tese do Cel Durante, eq. 2.82%

%ganho de fotocondutividade calculado a partir do somatório, extraído da tese do Cel Durante, eq. 2.86%

ganho1(nv)=tau*vdrift/L;

% continuação do loop anterior% plot(V_p,ganho1,'.b'); hold on; end whitebg('w'); grid; xlabel('Vbias (V)'); ylabel('ganho de fotocondutividade'); title('ganho de fotocondutividade x Vbias');

U) resp x vbias

%RESPONSIVIDADE x lambda %

%parâmetros% T=10;%temperatura em Kelvin% L=352e-10;%período de repertição dos poços% c = 3e8;%velocidade da luz (m/s^2)% e = 1.6e-19;%carga do elétron (coulombs)% fluxo = 200 ;%lúmens% h = (6.6260693e-34)/(2*pi);%constante de planck em J.s% Lw = 52e-10;%largura do poço quântico em metros% V=0.5;%Vbias em volts% I=20*L+300e-10;%comprimento do detector em metros% campo=V/I;%cálculo do campo elétrico% x=0.26;

mi=0.1;%mobilidade do elétron em m^2/Vs - pag.R19 Levine% vsat=5e4;%velocidade de saturação do elétron em m/s- pag.R19 Levine%

% mi_GaAs=(8500e-4)*(T/300)^(-2.2); % mi_AlAs=(410e-4)*(T/300)^(-2.1); % mi_AlGaAs = 1/(((1-x)/(mi_GaAs))+((x)/(mi_AlAs))+((1-x)*(x)/180)); % mi = (mi_GaAs + 6*mi_AlGaAs)/7; % % % % vsat_GaAs=(0.72e5)/(1-0.56+0.56*(T/300)); % vsat_AlAs=(0.85e5)/(1-0.55+0.55*(T/300)); % vsat_AlGaAs= (1-x)*vsat_GaAs + x*vsat_AlAs - 0.0512e5*x*(1-x); % vsat = (vsat_GaAs + 6*vsat_AlGaAs)/7;

vdrift=(mi*campo)/sqrt(1+((mi*campo)/vsat)^2);%extraído da tese do Cel Durante, eq. 2.82% tau = 7.2e-12;%tempo de meia vida do elétron durante o escape do poço%

%ganho de fotocondutividade calculado a partir do somatório, extraído da tese do Cel Durante, eq. 2.86% ganho1=tau*vdrift/L; ganho = 0; for n=1:20 X = exp(-(n*L)/((vdrift)*tau));

```
ganho = ganho + X;
end
```

%rotina de variação de lambda,cálculo de R e confecção do gráfico%

```
for n=1:55
    lambda=wavelength_bc(1,n);
    alfa = alfa_bc(1,n);
    I =((2*e*fluxo)*(lambda)/(h*2*pi*c))*alfa*Lw*ganho1;%extraído da tese do Cel Durante, eq. 2.81%
    ldark=1e-07;
    lp=I+ldark;
    R(n)=lp/fluxo;%extraído da tese do Cel Durante, eq. 2.88%
    plot(lambda,R(n),'.r');
    hold on;
end
whitebg('w');
grid;
xlabel('lambda (nm)');
ylabel('Responsividade');
tittle('RESPONSIVIDADE x \lambda');
```

EOLHA DE RECISTRO DE DOCUMENTO			
FOLIA DE REGISTRO DE DOCUMENTO			
1. CLASSIFICAÇÃO/TIPO	2. DATA	3. DOCUMENTO N°	4. N° DE PÁGINAS
TI	29 de maio de 2006		106
5. TÍTULO E SUBTÍTULO			
Estudo, modelamento e simulação das principais figuras de mérito de fotodetectores infravermelhos à poços quânticos			
6. AUTOR(RES):			
Ali Kamel Issmael Junior			
7. INSTITUIÇÃO(ÕES)/ÓRGÃO(S) INTERNO(S)/DIVISÃO(ÕES)			
Instituto Tecnológico de Aeronáutica. Divisão de Engenharia Eletrônica – ITA/IEE			
8. PALAVRAS-CHAVE SUGERIDAS PELO AUTOR			
Detectores infravermelhos, fotodetectores, poços quânticos, caracterização, aplicações militares, aquisição de alvos, mísseis guiados, engenharia eletrônica.			
9. PALAVRAS-CHAVERESULTANTES DA INDEXAÇÃO			
10. APRESENTAÇÃO (X)NACIONAL ()INTERNACIONAL		AL ()INTERNACIONAL	
ITA, S. José dos Campos, 2007, 106 páginas			
11. RESUMO			
Este trabalho apresenta um estudo dos processos de detecção de radiação infravermelha que utilizam a			
tecnologia de poços quânticos. Modelos matemáticos das principais figuras de mérito, tais como coeficiente de			
absorção, corrente de escuro, eficiência quântica, ganho e responsividade, disponíveis na literatura			
especializada, são estudados, comparados e implementados em MatLab. Os resultados das simulações			
numéricas são comparados com dados experimentais publicados nas referências [4], [5] e [8] e mostram que os			
modelos, convenientemente utilizados, apresentam grande potencialidade para serem utilizados em projetos de			
dispositivos reais.			

12. GRAU DE SIGILO

(x) OSTENSIVO () RESERVADO () CONFIDENCIAL () SECRETO