

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA**

**Flávio Augusto de Melo Marques**

**Investigação da Difusão de Portadores em Pontos Quânticos Sob  
Campo Elétrico Externo Por Meio da Varredura da  
Microluminescência**

Uberlândia

2009

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

Flávio Augusto de Melo Marques

**Investigação da Difusão de Portadores em Pontos Quânticos Sob  
Campo Elétrico Externo Por Meio da Varredura da  
Microluminescência**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de mestre em Física.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Orientador:

Prof. Dr. Adamo Ferreira Gomes do Monte

Uberlândia

2009

# *Resumo*

Neste trabalho, apresentamos o estudo dos processos de transferência de energia entre pontos quânticos (QDs) auto-organizados de InAs localizados em várias camadas na região intrínseca de um dispositivo do tipo *p-i-n*. Estas estruturas *p-i-n* possuem contatos elétricos, possibilitando a aplicação de um potencial elétrico. As três amostras utilizadas neste trabalho se diferenciam nos espaçamentos e na altura das barreiras de potencial entre os pontos quânticos. Para concretizar este estudo, foram realizadas várias medidas utilizando a técnica de microluminescência ( $\mu$ PL) resolvida espectralmente e espacialmente, em função do campo elétrico aplicado perpendicularmente aos QDs, da intensidade de excitação e da energia de recombinação. Foi observada através dos espectros de  $\mu$ PL a presença de cinco bandas associadas aos diferentes estados de energia dos QDs. Para cada estado de energia realizamos medidas de varredura da  $\mu$ PL para identificar a transferência de energia referente aos QDs. Evidenciamos claramente que a transferência de energia entre os QDs é maior para os estados de menor energia e que a diminuição do campo elétrico na região intrínseca provoca um aumento desta transferência de energia de um mesmo estado do QD. Este processo de transferência de energia foi associado às correntes de difusão de portadores nas barreiras, juntamente com o processo de ativação térmica. Também foram realizadas medidas de  $\mu$ PL resolvida espacialmente em função do comprimento de onda de emissão. Foi observado que a transferência de energia entre os QDs diminui linearmente com a energia de recombinação dos pares elétrons-buraco. A partir deste resultado concluiu-se que devido à natureza Gaussiana da distribuição de portadores difundidos, a concentração de pares que alcançam distâncias longas é menor, preenchendo desta forma somente os estados dos níveis de menor energia dos QDs. Por fim, foi possível identificar o efeito de preenchimento de estados dos pontos quânticos, a partir das medidas de  $\mu$ PL em função da intensidade de excitação.

**Palavras Chaves:** Transferência de Energia, Pontos Quânticos, Microluminescência, Fotoluminescência, Semicondutores, Campo Elétrico.

# *Abstract*

In this work, we present the study of energy transfer processes between self-assembled quantum dots (QDs) of InAs in GaAs layers within an intrinsic region of a *p-i-n* device. These *p-i-n* structures are assembled with electrical contacts providing the application of an electrical potential. The three samples used have different layer spacing and barrier size between the quantum dots (QDs). The main investigation was performed by means of the spectrally and spatially resolved micro-photoluminescence ( $\mu$ PL) as a function of the perpendicular electrical field, excitation intensity and recombination energy. From the  $\mu$ PL spectra five emission peaks were observed in association with the different energy states of the QDs. For each energy state the  $\mu$ PL scan was used to identify the energy transfer between the QDs. We found evidence that the energy transfer between the QDs is larger at the lower energy states, and that by decreasing the electrical field within the intrinsic region it may induce the increase of the energy transfer for each QD energy state. These energy transfer processes have been associated with the carrier diffusion within the barrier, together with another process such as thermal activation. We have also carried out spatially resolved  $\mu$ PL as a function of the emission wavelengths. The energy transfer between QDs decreases linearly with the electron-hole recombination energy. From this result we conclude that the energy transfer phenomenon occurs onto a Gaussian distribution of diffusing carriers, in which the concentrations of electrons-hole pairs reaching longer distances are smaller, just enough to fill the lower energy states from QDs. Finally, state filling effects of the QDs have been observed from the  $\mu$ PL measurements as function of excitation energy.

**Keywords:** Energy Transfer, Quantum Dots, Microluminescence, Photoluminescence, Semiconductors, Electric Field.

ã

Dedico esta dissertação aos meus pais, que desde que nasci, investiram em mim para minha formação como um ser humano digno.

## AGRADECIMENTOS

Meus agradecimentos especiais vão para meu orientador Adamo Ferreira Gomes do Monte pela oportunidade de ter desenvolvido este trabalho, pelo companheirismo, orientação, apoio, incentivo e motivação dada durante todo este período. Também gostaria de agradecê-lo pelas brilhantes idéias que surgiram e que foram muito importantes para a conclusão deste trabalho.

Ao pessoal do Núcleo de Física Aplicada da Universidade de Brasília pela ajuda que deram durante a visita em que fizemos para realização de algumas medidas.

Aos professores que participaram de alguma forma na minha formação pessoal e profissional.

A todos os funcionários do instituto de física da Universidade Federal de Uberlândia, em especial a secretária da pós-graduação Lúcia pela ajuda que ela sempre nos deu.

Meus sinceros agradecimentos a todos os amigos que saíram ou até hoje estão conosco, pelos momentos de descontração e ajudas durante todo o período acadêmico.

Aos meus pais Manuel e Cristina por todo apoio, incentivo e por me proporcionarem uma vida digna de paz, harmonia e muita saúde. Ao meu irmão Cláudio pelas conversas inteligentes sobre ciência e tecnologia.

A minha esposa Valéria que foi capaz de me ouvir, aconselhar, apoiar e me fazer feliz em todos os momentos da minha vida.

E por fim, agradeço a Capes pela minha bolsa, ao CNPq e a FAPEMIG pelo apoio financeiro ao laboratório.

# *Lista de Figuras*

1	Valores típicos da resistividade elétrica de alguns isolantes, semicondutores e metais. . . . .	p. 15
2	Representação esquemática da estrutura atômica ou molecular de um sólido amorfo (a) e cristalino (b). Uma possível rede de Bravais é mostrada em (b), representada pelos pontos cinza. . . . .	p. 16
3	Representação esquemática de duas possíveis células primitivas em uma rede de Bravais bidimensional na forma de Paralelogramo (a) e Hexagonal (b). . . . .	p. 17
4	(a) Célula primitiva de Wigner-Seitz para uma rede cristalina cúbica de corpo centrada. (b) Primeira zona de Brillouin para a mesma estrutura cristalina bcc. . . . .	p. 18
5	Formação de bandas de energia do sólido cristalino devido a aproximação dos átomos. . . . .	p. 19
6	(a) Perfil do potencial e níveis de energia do elétron ao longo do eixo $x$ da estrutura cristalina mostrado em (b). . . . .	p. 19
7	(a) Representação da energia em função do vetor de onda $\vec{k}$ de uma rede unidimensional, e periodicidade $\vec{R}$ . A linha tracejada representa o resultado para o elétron livre. (b) O mesmo diagrama de (a) no esquema de zona reduzida. . . . .	p. 20
8	(a) Primeira zona de Brillouin para uma rede cristalina cúbica de face centrada, com a representação das principais direções de $\vec{k}$ . (b) Estrutura de bandas do Si com estrutura cristalina diamante [11]. . . . .	p. 21
9	Representação da estrutura de bandas para um semicondutor de <i>gap</i> direto (a) e indireto (b). Aproximação parabólica do fundo da banda de condução e do topo da banda de valência é mostrada em (b) pelas curvas tracejadas. . . . .	p. 22

10	Ocupação das bandas para isolantes (a), condutores (b) e semicondutores (c). . . . .	p. 23
11	Distribuição de Fermi-Dirac para $T = 0K$ (linha tracejada) e para $T > 0K$ (linha contínua). . . . .	p. 26
12	Densidade de estados para semicondutores em 0, 1, 2, e 3 dimensões. . .	p. 29
13	Ilustração gráfica da distribuição de portadores a temperatura $T > 0K$ em semicondutor intrínseco. (a) Esquema simplificado da estrutura de bandas. (b) Densidade de estados. (c) Distribuição de Fermi-Dirac. (d) Distribuição de portadores. . . . .	p. 33
14	Representação esquemática de um cristal de silício dopado com (a) doadores e (b) aceitadores de elétrons. . . . .	p. 34
15	Esquema da energia de bandas para semicondutores extrínsecos dopados com (a) impurezas doadores e (b) impurezas aceitadores de elétrons. . .	p. 35
16	Ilustração gráfica da distribuição de portadores a temperatura $T > 0K$ em semicondutor extrínseco do tipo $n$ . (a) Esquema simplificado da estrutura de bandas. (b) Densidade de estados. (c) Distribuição de Fermi-Dirac. (d) Distribuição de portadores. . . . .	p. 36
17	Absorção de um fóton em um semicondutor de <i>gap</i> direto seguida pela geração de um par elétron-buraco. . . . .	p. 38
18	Geração e recombinação direta de pares elétrons-buraco em equilíbrio térmico (a) e sob excitação luminosa (b). . . . .	p. 39
19	Representação esquemática dos processos de recombinação indireta de pares elétrons-buraco através de um nível intermediário de energia. . .	p. 42
20	Representação da recombinação Auger para um semicondutor de <i>gap</i> direto envolvendo dois elétrons e um buraco (a), e dois buracos e um elétron (b). . . . .	p. 43
21	Representação da recombinação Auger para um semicondutor de <i>gap</i> indireto envolvendo dois elétrons e um buraco (a), e dois buracos e um elétron (b). . . . .	p. 44
22	Ilustração do movimento aleatório de um elétron em um semicondutor na ausência (a), e na presença (b) de um campo elétrico aplicado. . . .	p. 45

23	Esquema unidimensional da corrente de buracos que entra e sai de uma certa região de um semicondutor. . . . .	p. 48
24	Representação gráfica da difusão de elétrons gerados por um pulso em $x = 0$ no instante $t \rightarrow 0$ (linha pontilhada). . . . .	p. 51
25	Representação do fluxo de corrente e processos de geração e recombinação em um pedaço infinitesimal de espessura $dx$ de um semicondutor. . . . .	p. 53
26	(a) Variação da concentração de cargas em uma junção $p-n$ . (b) Corte transversal de uma junção $p-n$ unidimensional. . . . .	p. 54
27	(a) Semicondutores do tipo $p$ e $n$ separados. (b) Representação da carga, campo, potencial elétrico e níveis de energia em uma junção $p-n$ . . . . .	p. 55
28	Efeito de uma tensão externa aplicada a uma junção $p-n$ : (a) situação em equilíbrio, (c) polarização direta, (c) polarização reversa. . . . .	p. 56
29	Diagramas de energia (a) de um semicondutor com sua função trabalho, (b) dos semicondutores $n$ -InAs e $p$ -GaAs separados, (c) de uma heterojunção de $n$ -InAs e $p$ -GaAs em equilíbrio. . . . .	p. 57
30	Ilustração do processo de criação de pares elétrons-buraco na região de depleção para um fotodiodo (a) $p-n$ e (b) $p-i-n$ seguida da separação das cargas que seguem em direção aos contatos elétricos. . . . .	p. 59
31	Ilustração dos três processos básicos de transição em um sistema de dois níveis de energia. O ponto escuro indica o estado em que o átomo está. (a) Absorção, (b) emissão espontânea, e (c) emissão estimulada. . . . .	p. 63
32	(a) Processo de absorção e (b) emissão de fótons em um semicondutor de <i>gap</i> direto. . . . .	p. 65
33	Ilustração esquemática da técnica de varredura superficial da luminescência. . . . .	p. 66
34	Varredura superficial da microluminescência em pontos quânticos de InAs (linha cheia) excitados com um feixe de laser (linha tracejada) de 632 nm. . . . .	p. 66
35	Ilustração do processo de epitaxia de feixe molecular utilizando fontes com elementos para a fabricação dos semicondutores GaAs, $n-Al_xGa_{x-1}As$ e GaAs, que podem ser dopadas com impurezas de Si ou Be. . . . .	p. 67

36	Ilustração das multicamadas do tipo <i>p-i-n</i> utilizadas na produção das amostras (a) 1521, (b) 1522 e (c) 1523. . . . .	p. 69
37	Processo de montagem das amostras em forma de dispositivo diodo do tipo <i>p-i-n</i> . . . . .	p. 70
38	Estruturas de banda para os semicondutores GaAs (a) e InAs (b) [32]. .	p. 72
39	Variação do <i>gap</i> do GaAs (à esquerda) e do InAs (à direita) com a temperatura. . . . .	p. 73
40	Estruturas de banda para o semicondutor $Al_xGa_{1-x}As$ com $x < 0,45$ (a) e $x > 0,45$ (b) [32]. . . . .	p. 73
41	Variação do <i>gap</i> do GaAs (à esquerda) e do InAs (à direita) com a temperatura. . . . .	p. 74
42	Coefficiente de absorção para o GaAs (à esquerda) e para o $Al_{0,6}Ga_{0,4}As$ (à direita) à temperatura de 77 K e para diferentes valores de $\alpha_0$ . . . .	p. 75
43	Espectro de $\mu$ PL obtido com a amostra 1521 para diferentes potenciais aplicados (superior) e intensidade de PL para cada ponto indicado por setas em função do potencial aplicado (inferior). . . . .	p. 77
44	Representação do diagrama de bandas de uma estrutura <i>p-i-n</i> com pontos quânticos na região intrínseca sem nenhum potencial elétrico aplicado (a), submetida a um potencial direto (b) e inverso (c). . . . .	p. 78
45	Espectro de $\mu$ PL obtido com a amostra 1522 para diferentes potenciais aplicados (superior) e intensidade de PL para cada ponto indicado por setas em função do potencial aplicado (inferior). . . . .	p. 80
46	Espectro de $\mu$ PL obtido com a amostra 1523 para diferentes potenciais aplicados (superior) e intensidade de PL para cada ponto indicado por setas em função do potencial aplicado (inferior). . . . .	p. 81
47	Representação do diagrama de bandas bidimensional de um ponto quântico de InAs imerso em uma estrutura de GaAs (a) e da região intrínseca das amostras 1521 (b), 1522 (c) e 1523 (d). Os níveis discretos de energia ( $E_0, E_1, E_2, E_3$ e $E_4$ ) estão representados pelas linhas tracejadas em (a). . . . .	p. 82
48	Curva característica da eficiência quântica do detector Hamamatsu S7031-1006 utilizado na obtenção das medidas de $\mu$ PL [38]. . . . .	p. 83

49	Espectros de $\mu$ PL da amostra 1522 sem nenhum potencial elétrico aplicado obtidos através da CCD (linha vermelha) e do detector de Germânio (linhas preta e azul). . . . .	p. 83
50	Ilustração do processo de difusão de portadores em (a) visão lateral e (b) visão superior na ausência do campo elétrico e (c) visão lateral com a presença do campo elétrico. . . . .	p. 85
51	Varredura superficial de um <i>pinhole</i> de 10 $\mu$ m de diâmetro utilizado para a calibração da técnica. . . . .	p. 86
52	Varredura superficial da $\mu$ PL referente a amostra 1521, para os valores de comprimentos de onda indicados na figura 43, variando o potencial aplicado de 0 a 1,5V. . . . .	p. 88
53	Valores da largura à meia altura obtida pelo ajuste gaussiano das curvas mostradas na figura 52 em função do potencial aplicado. . . . .	p. 89
54	Varredura superficial da $\mu$ PL referente a amostra 1522, para os valores de comprimentos de onda indicados na figura 45, variando o potencial aplicado de 0 a 1,5V. . . . .	p. 90
55	Valores da largura à meia altura (mostradas na figura 54) para duas direções diferentes da varredura (mostradas no desenho interno de cada gráfico) em função do potencial aplicado. . . . .	p. 91
56	Varredura superficial da $\mu$ PL referente a amostra 1523, para os valores de comprimentos de onda indicados na figura 46, variando o potencial aplicado de 0 a 1,5V. . . . .	p. 93
57	Valores da largura à meia altura obtida pelo ajuste gaussiano das curvas mostradas na figura 56 em função do potencial aplicado. . . . .	p. 94
58	Varredura superficial da $\mu$ PL referente a amostra 1523 para diversos valores de comprimentos de onda (à esquerda), e a medida da largura à meia altura $\Delta$ de cada curva em função do comprimento de onda (à direita). . . . .	p. 95
59	Ilustração esquemática do processo de difusão de elétrons gerados por um feixe que incide na região de excitação seguido da captura dos mesmos pelos pontos quânticos de InAs. . . . .	p. 96

60	Varredura superficial do <i>spot</i> do laser (à esquerda) utilizado para excitar a amostra 1523. Espectros de $\mu$ PL referente a cada <i>spot</i> de excitação (à direita). . . . .	p.97
61	Intensidade de PL em cada ponto mostrado por setas na figura 60 em função da largura do <i>spot</i> do laser. . . . .	p.98

# *Lista de Tabelas*

- 1 Elementos e binários semicondutores. Os binários semicondutores mais importantes estão marcados em negrito. . . . . p. 15

# *Sumário*

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	p. 12
<b>2</b>	<b>Fundamentos Teóricos</b>	p. 14
2.1	Semicondutores . . . . .	p. 14
2.1.1	Materiais Semicondutores . . . . .	p. 14
2.1.2	Estrutura Cristalina . . . . .	p. 16
2.1.3	Bandas de Energia em Cristais . . . . .	p. 18
2.1.3.1	Momento e Massa Efetiva . . . . .	p. 23
2.1.4	Distribuição de Portadores . . . . .	p. 25
2.1.4.1	Densidade de Estados . . . . .	p. 25
2.1.5	Concentração Intrínseca de Portadores . . . . .	p. 29
2.1.6	Doadores e Aceitadores de Elétrons . . . . .	p. 34
2.2	Geração e Recombinação de Portadores . . . . .	p. 37
2.2.1	Geração Através da Radiação . . . . .	p. 37
2.2.2	Recombinação Direta . . . . .	p. 38
2.2.3	Recombinação Indireta . . . . .	p. 41
2.2.4	Recombinação Auger . . . . .	p. 42
2.2.4.1	Recombinação Auger em Semicondutores de <i>gap</i> Direto . . . . .	p. 42
2.2.4.2	Recombinação Auger em Semicondutores de <i>gap</i> Indireto . . . . .	p. 43
2.3	Transporte de Portadores . . . . .	p. 44
2.3.1	Corrente de Condução . . . . .	p. 44
2.3.2	Difusão de Portadores . . . . .	p. 47

2.3.3	Equação da Continuidade . . . . .	p. 52
2.4	Dispositivos Semicondutores . . . . .	p. 54
2.4.1	A Junção $p-n$ . . . . .	p. 54
2.4.2	Heterojunções . . . . .	p. 57
2.4.3	Fotodiodos $p-i-n$ . . . . .	p. 58
2.5	Pontos Quânticos . . . . .	p. 59
2.5.1	Pontos Quânticos Auto Organizados . . . . .	p. 60
<b>3</b>	<b>Procedimento Experimental</b>	p. 62
3.1	Propriedades Ópticas dos Semicondutores . . . . .	p. 62
3.1.1	Absorção e Emissão de Fótons em Semicondutores . . . . .	p. 62
3.1.2	Varredura Superficial da Microluminescência . . . . .	p. 65
3.2	Fabricação das Amostras . . . . .	p. 67
3.2.1	Epitaxia de Feixe Molecular . . . . .	p. 67
3.2.2	Crescimento das Amostras . . . . .	p. 68
<b>4</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	p. 71
4.1	Variação do $gap$ com a Temperatura . . . . .	p. 71
4.2	Absorção Óptica . . . . .	p. 74
4.3	Microluminescência . . . . .	p. 75
4.4	Varredura Superficial da Microluminescência . . . . .	p. 84
4.4.1	Varredura Superficial da Microluminescência em Função do Comprimento de Onda . . . . .	p. 95
4.5	Microluminescência em Função da Intensidade de Excitação . . . . .	p. 96
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	p. 100
5.1	Perspectivas e Futuros Trabalhos . . . . .	p. 101
	<b>Referências</b>	p. 102

<b>Apêndice A - Resumos e Artigos</b>	p. 107
---------------------------------------	--------

A.1 Resumos em congressos . . . . .	p. 107
-------------------------------------	--------

A.2 Artigos em Revistas Especializadas . . . . .	p. 107
--------------------------------------------------	--------

# 1 *Introdução*

Os cristais semicondutores possuem uma grande importância no mundo atual, já que são responsáveis pelas mais novas inovações científicas e tecnológicas. Ultimamente, dispositivos semicondutores tais como: diodos, transistores e circuitos integrados podem ser encontrados facilmente ao nosso redor, como por exemplo: nas televisões, nos controles remotos, nas câmeras fotográficas, nos automóveis, nos computadores, nos celulares etc. Devido ao fato de estar presente na maioria das atuais aplicações científicas, os semicondutores vêm sendo amplamente explorados, visando a melhoria na eficiência dos equipamentos já existentes, novas aplicações e a redução no custo de produção.

O intenso estudo dos semicondutores pode ser claramente observado através da análise da capacidade de processamento dos computadores nos últimos anos. É evidente a evolução destes dispositivos tanto no aspecto da minituarização quanto do aumento do desempenho. Para que esta evolução no desenvolvimento de novas aplicações continue crescendo, cientistas têm explorado as particularidades da matéria em escalas de baixas dimensionalidades, que fornece um confinamento artificial de elétrons e buracos em até três direções espaciais. Das estruturas de baixa dimensionalidade mais conhecidas estão os pontos quânticos (**QD's** - *Quantum Dots*), que são pequenas redes cristalinas cuja dimensões variam entre 1 e  $100 \times 10^{-9}m$ . Em um QD o movimento dos portadores está restrito em todas as três direções espaciais, resultando assim em níveis discretos de energia. Devido às propriedades de um sistema zero-dimensional os QDs também são conhecidos como “átomos artificiais” [1]. As propriedades dos QDs têm estimulado um amplo interesse com possibilidade de aplicação nos mais modernos dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos, tais como: lasers, detectores no infravermelho, dispositivos de memória e transistores de um único fóton [2, 3, 4].

Recentemente, novas características sobre o melhoramento da taxa de captura de portadores em pontos quânticos auto organizados (**SAQDs** - *Self Assembled Quantum Dots*), sob influência de um campo elétrico externo, têm sido explicado [5]. Vários estudos com SAQDs reportaram que em multicamadas semicondutoras, os portadores fotoexcitados

são gerados nas barreiras ou na *wetting layer* antes de serem capturados pelos QDs [6, 7]. Evidentemente, durante este processo de captura os portadores estão submetidos a efeitos de mobilidade dentro das barreiras ou *wetting layer*. O estudo do comportamento destes portadores é muito importante devido ao fato de que a maioria dos dispositivos semicondutores operam sob condições de não-equilíbrio, o que quer dizer que a concentração de elétrons e buracos são diferentes das concentrações no equilíbrio térmico. Neste caso, o processo que faz com que o semicondutor retorne ao equilíbrio térmico são as correntes de condução e difusão. Este fato demonstra a importância dos processos de transporte de portadores em semicondutores nanoestruturados, visando o aprimoramento de dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos.

A presente dissertação tem como objetivo principal estudar os efeitos de difusão de pares elétron-buraco em heteroestruturas semicondutoras sob a influência de um campo elétrico externo. Este estudo foi realizado exclusivamente através da técnica de varredura superficial da microluminescência. Também foram exploradas as propriedades ópticas e elétricas destas heteroestruturas através de técnicas complementares, tais como: fotoluminescência (**PL** - *Photoluminescence*) e Fotocorrente (**PC** - *Photocurrent*). A implementação da corrente de difusão nas equações de taxa para o elétron e buraco foram feitas de modo a obter através de simulações computacionais vários resultados consistentes com os resultados experimentais realizados.

## 2 *Fundamentos Teóricos*

Neste capítulo serão apresentados os fundamentos teóricos básicos dos semicondutores. Inicialmente alguns aspectos dos semicondutores serão abordados, retratando sua estrutura cristalina e o conceito de bandas de energia, que está relacionado com a condução em semicondutores. Em seguida, será discutido o processo de dopagem dos semicondutores e o seu efeito na concentração de portadores em equilíbrio térmico. Também iremos considerar os diversos fenômenos de transporte em semicondutores, que surgem com o movimento dos portadores de carga sob influência de um campo elétrico ou devido a um gradiente da concentração de portadores. Retrataremos os tipos de recombinação e geração de portadores para que seja possível descrever as equações de continuidade para elétrons e buracos. Por fim será explicado o princípio de funcionamento dos dispositivos semicondutores mais básicos, como o diodo de junção  $p-n$  e o fotodiodo  $p-i-n$ .

### 2.1 Semicondutores

#### 2.1.1 Materiais Semicondutores

Materiais semicondutores possuem, sem dúvida, uma longa história. Contatos entre semicondutores e metais começaram a ser estudados muito antes de 1874 quando Braun descobriu a natureza assimétrica da condutividade elétrica entre contatos de metais e semicondutores. Em 1907, Pierre publicou um trabalho falando sobre a característica de retificação dos diodos [8]. A partir de então uma variedade de materiais semicondutores começaram a ser explorados, e novas técnicas de obtenção de um material ultra puro foram desenvolvidas. Uma das mais importantes descobertas em semicondutores surgiu em 1947 quando o primeiro transistor foi construído e testado nos laboratórios de telefone da companhia Bell por Willian Shockley, John Bardeen e Walter Brattain [9]. Este primeiro transistor foi fabricado utilizando germânio policristalino, porém este mesmo efeito foi demonstrado pouco mais tarde utilizando o silício. Um melhoramento significativo destes dispositivos ocorreu no final de 1949 quando os cientistas passaram a utilizar materiais

Elementos	Binários IV-IV	Binários III-V	Binários II-VI	Binários IV-VI
Si	SiC	AlAs	CcS	PbS
Ge		AlSb	CdSe	PbTe
		BN	CdTe	
		<b>GaAs</b>	ZnS	
		<b>GaP</b>	ZnSe	
		<b>GaSb</b>	ZnTe	
		<b>InAs</b>		
		<b>InP</b>		
		<b>InSb</b>		

Tabela 1: Elementos e binários semicondutores. Os binários semicondutores mais importantes estão marcados em negrito.

monocristalinos ao invés de policristalinos. Com o decorrer dos anos, novos processos de junção de semicondutores foram desenvolvidos, possibilitando um amplo desenvolvimento dos dispositivos. Estes processos permitiram um melhor controle das características do transistor e possibilitaram o trabalho em frequências maiores.

Os materiais semicondutores mais explorados desde o início do estudo foram o germânio e o silício. Hoje, diversas ligas de semicondutores tem sido exploradas. Elementos químicos das colunas II, III, IV, V e VI são muito utilizados na formação de ligas semicondutoras. A tabela 1 mostra os elementos e os binários semicondutores.

Uma maneira simples de classificar os materiais semicondutores é através das características elétricas do mesmo. Sabe-se que os materiais isolantes possuem uma alta resistividade elétrica, enquanto que os metais possuem uma boa condutividade elétrica. Os semicondutores podem ser agrupados entre os isolantes e os metais de acordo com suas propriedades de condutividade e resistividade elétrica, como está ilustrado na figura 1.

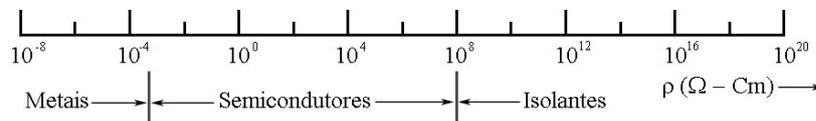


Figura 1: Valores típicos da resistividade elétrica de alguns isolantes, semicondutores e metais.

Analisando o ponto de vista macroscópico, esta definição dos semicondutores não diz muito em relação à importância destes materiais. Por isso é necessário estudar estes materiais de forma mais criteriosa. Portanto, será abordado nas próximas seções o estudo da estrutura atômica, bandas de energia, densidade de estados, efeitos da temperatura e dopagem dos materiais semicondutores. Desta forma será possível entender o porquê da

tamanho importância destes materiais.

### 2.1.2 Estrutura Cristalina

Materiais sólidos podem ser geralmente classificados como cristalinos ou amorfos. A figura 2 nos mostra a representação esquemática da organização atômica ou molecular nos sólidos amorfos e cristalinos. Como se pode perceber, os átomos ou moléculas nos materiais amorfos estão dispostos de uma maneira aleatória, sem ordem de longo alcance, como acontece na água em estado líquido. Um exemplo destes materiais é o vidro. Normalmente os vidros são preparados através de uma transição rápida do estado líquido para o sólido. Desta forma a estrutura atômica se “congela” sem a prévia organização dos átomos. Ao contrário disto os cristais possuem um alto ordenamento de sua estrutura atômica. Naturalmente os cristais são formados devido a altas temperaturas e pressão encontradas na crosta terrestre. A formação dos cristais se dá devido à lenta taxa de resfriamento dos compostos químicos, havendo assim tempo suficiente para a relaxação dos átomos constituintes da rede. Deste modo, cada átomo alcança sua posição de maior estabilidade e menor energia.

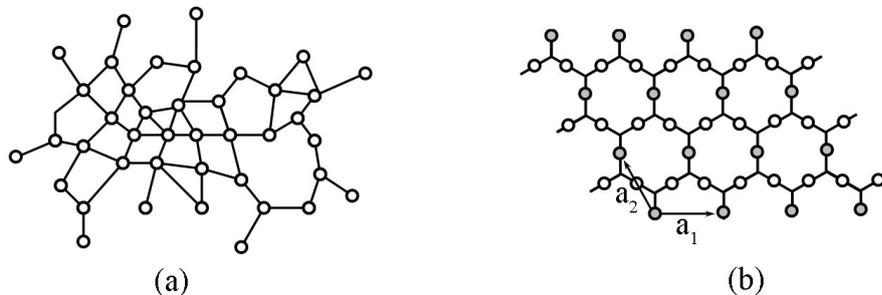


Figura 2: Representação esquemática da estrutura atômica ou molecular de um sólido amorfo (a) e cristalino (b). Uma possível rede de Bravais é mostrada em (b), representada pelos pontos cinza.

Devido a alta organização atômica dos cristais, é possível descrever qualquer sólido cristalino utilizando o conceito de rede de Bravais, que especifica o vetor no qual as unidades repetidas do cristal podem ser organizadas. Estas unidades podem ser um átomo, um grupo de átomos, moléculas, íons, etc, como mostra a figura 2 (b), representada pelos pontos cinza. Portanto, a rede de Bravais (tridimensional) consiste em todos os pontos que podem ser expressos por um vetor da forma

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \quad (2.1)$$

onde  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  e  $\vec{a}_3$  são três vetores arbitrários não necessariamente no mesmo plano, e  $n_1$ ,  $n_2$  e  $n_3$  são todos os valores inteiros. Desta maneira, o vetor  $\vec{R}$  consegue alcançar todos os pontos de uma rede organizada.

A unidade de volume que quando transladado através de todos os vetores da rede de Bravais sem se sobrepor ou deixar algum espaço vazio é chamado de célula primitiva. Pode-se perceber que esta célula primitiva não é única. Dois exemplos de células primitivas estão apresentados na figura 3, representada por um paralelogramo e um hexágono. Desta forma, pode-se escolher uma célula primitiva que possua a simetria completa da rede de Bravais. A escolha mais comum é chamada de célula de Wigner-Seitz. Esta célula é formada de modo que os limites da célula estejam exatamente no meio de dois pontos da rede. Portanto, uma maneira simples de obter a célula de Wigner-Seitz é ligando um ponto da rede aos seus vizinhos mais próximos, traçando em seguida uma reta ou plano perpendicular a ela e que esteja localizada no meio dos pontos. Para melhor visualização, uma célula de Wigner-Seitz obtida como foi descrito anteriormente, está representada na figura 3 (b) por um hexágono. Pode-se perceber então que a célula de Wigner-Seitz será tão simétrica quanto a rede de Bravais associada a ela.

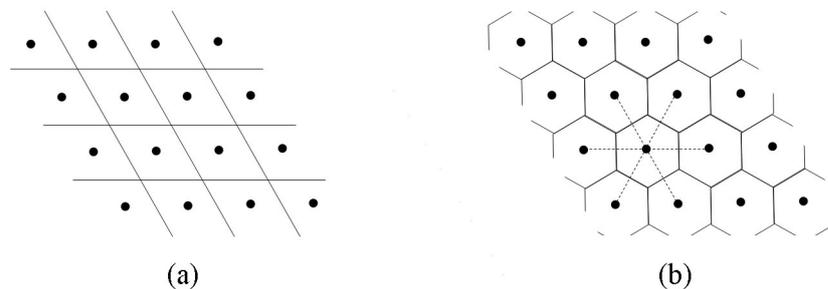


Figura 3: Representação esquemática de duas possíveis células primitivas em uma rede de Bravais bidimensional na forma de Paralelogramo (a) e Hexagonal (b).

A rede de Bravais descrita anteriormente foi representada no espaço direto, o que significa dizer que o vetor  $\vec{R}$  da equação (2.1) é descrita pelos valores das posições em  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  e  $\vec{a}_3$ . Em muitos problemas físicos é conveniente trabalhar no espaço recíproco ao invés do espaço direto. Desta forma, o vetor  $\vec{R}$  pode ser descrito por valores dos vetores de onda que é recíproco das posições. Considerando o conjunto de pontos  $\mathbf{R}$  de uma rede de Bravais, e uma onda plana  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ , é possível que para certos valores de  $\vec{k}$ , esta onda tenha a mesma periodicidade da rede de Bravais. Desta forma, o conjunto de vetores de onda  $\vec{K}$ , que faz com que a onda plana possua a mesma periodicidade da rede de Bravais, é conhecido como rede recíproca. Quando a célula de Wigner-Seitz é obtida na rede recíproca, ela é chamada de primeira zona de Brillouin. Portanto, os termos célula

de Wigner-Seitz e primeira zona de Brillouin possuem a mesma construção geométrica, com a única diferença de que a primeira é aplicada ao espaço das posições e a segunda ao espaço dos vetores de onda [10]. A figura 4 (a) mostra a representação tridimensional de uma célula de Wigner-Seitz para uma estrutura cristalina cúbica de corpo centrada (**bcc** - *body-centred cubic*) no espaço direto, enquanto a figura 4 (b) mostra a primeira zona de Brillouin para a mesma estrutura bcc.

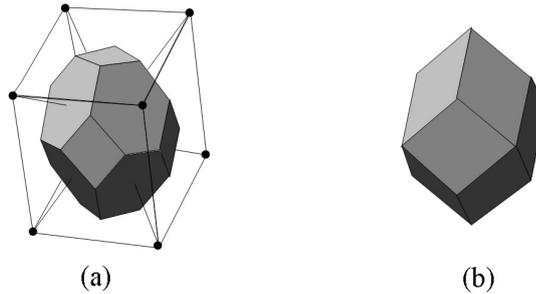


Figura 4: (a) Célula primitiva de Wigner-Seitz para uma rede cristalina cúbica de corpo centrada. (b) Primeira zona de Brillouin para a mesma estrutura cristalina bcc.

### 2.1.3 Bandas de Energia em Cristais

Sabe-se que os elétrons em um átomo isolado possuem somente níveis discretos de energia. Considerando dois átomos relativamente distantes um do outro, pode-se dizer que cada átomo não sente o potencial exercido pelo outro, de modo que os níveis de energia sejam idênticos para ambos. Considerando a energia associada a um determinado número quântico (e.g.,  $n = 1$ ), este sistema será duplamente degenerado, isto significa que cada átomo possui exatamente a mesma energia. A medida que cada átomo se aproxima um do outro, o nível de energia duplamente degenerado irá se quebrar em dois níveis, devido a interação atômica. Desta forma, se aproximando  $N$  átomos de maneira a formar um cristal, a degenerescência de ordem  $N$  será quebrada em  $N$  níveis muito próximos. Este resultado é chamado de banda de energia. A figura 5 mostra a variação dos níveis de energia de  $N$  átomos em relação a distância interatômica.

Tratando um problema de muitas partículas, que é o caso do sólido, o cálculo quântico dos estados eletrônicos e das energias se torna bastante complexo. Desta forma, faz-se necessário utilizar métodos aproximativos para que o problema possa ser resolvido. As aproximações a serem feitas são as de considerarem que os núcleos dos átomos são fixos, e possuem coordenadas conhecidas na rede, e também de que o problema envolve um só elétron. Os outros elétrons são caracterizados por estarem fortemente ligados ao núcleo

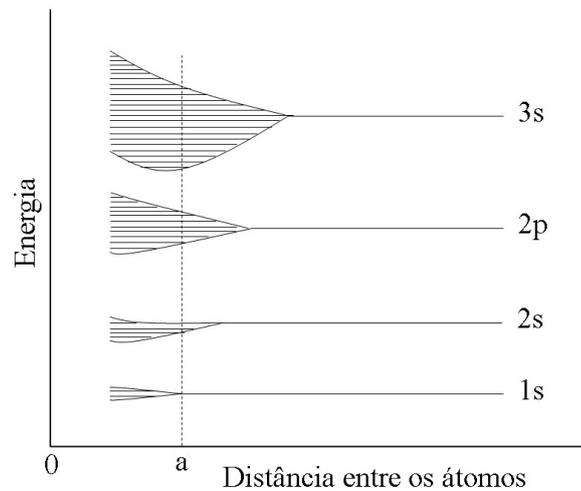


Figura 5: Formação de bandas de energia do sólido cristalino devido a aproximação dos átomos.

atômico de forma que estes são considerados parte integrante dos íons que criam um potencial periódico na rede cristalina. A figura 6 mostra qualitativamente o potencial que um elétron sente ao mover na direção  $x$  de um cristal.

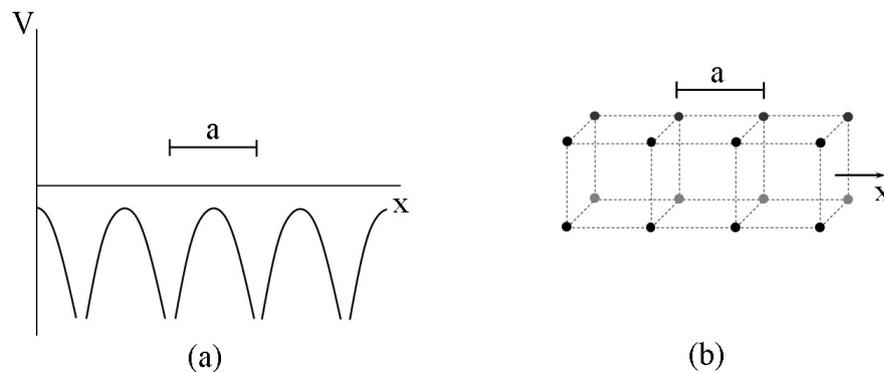


Figura 6: (a) Perfil do potencial e níveis de energia do elétron ao longo do eixo  $x$  da estrutura cristalina mostrado em (b).

Alguns metais alcalinos, como por exemplo o sódio, possuem elétrons da última camada que praticamente não sentem nenhum efeito do potencial do núcleo atômico, devido a blindagem dos elétrons mais internos. Deste modo, estes elementos ganham mais uma aproximação, que é a do elétron livre. Esta aproximação simplifica o problema a um poço de potencial com paredes infinitas, de forma que o elétron é livre para se deslocar dentro do cristal, porém nas superfícies do cristal o potencial é infinito. Desta forma, a solução da equação de Schrödinger para um potencial periódico se torna possível, e como resultado, as funções de onda do elétron possuem a forma de onda plana simples. Ao considerar um cristal mais complexo, os elétrons não possuem a forma de onda plana simples. Entre-

tanto, o teorema de Bloch diz que as funções de onda de um elétron, cuja hamiltoniana é dado por  $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$ , onde  $V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$ , podem ser escolhidos para ter a forma de uma onda plana vezes uma função com a mesma periodicidade da rede de Bravais, ou seja

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u(\vec{r}), \quad (2.2)$$

onde

$$u(\vec{r} + \vec{R}) = u(\vec{r}) \quad (2.3)$$

para todos  $\vec{R}$  pertencentes a rede de Bravais. O efeito do potencial cristalino pode ser evidentemente observado na função de onda representada pela equação (2.2), devido a modulação da amplitude por uma função periódica. Como os elétrons são descritos pela equação (2.2) nos cristais, pode-se dizer que a energia é função de  $\vec{k}$ . A figura 7 (a) mostra a variação da energia que um elétron sente em função do vetor de onda, na direção  $\vec{x}$  de um cristal unidimensional.

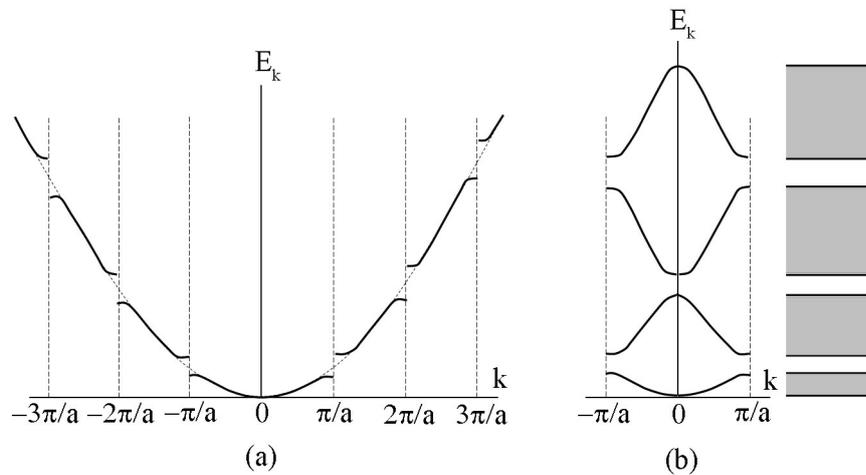


Figura 7: (a) Representação da energia em função do vetor de onda  $\vec{k}$  de uma rede unidimensional, e periodicidade  $\vec{R}$ . A linha tracejada representa o resultado para o elétron livre. (b) O mesmo diagrama de (a) no esquema de zona reduzida.

Uma outra forma de representar o diagrama de  $E(k)$  é no esquema de zona reduzida, como mostrado na figura 7 (b). Este esquema é obtido transladando as bandas adjacentes de um múltiplo de  $2\pi/R$ , de modo a levar todas as bandas para a primeira zona de Brillouin. Este fato só é possível porque o resultado da equação (2.2) é o mesmo para  $k$  e  $k' = k - n2\pi/R$ , onde  $n$  é um número inteiro. No caso de um cristal tridimensional, a

representação da energia em função do vetor de onda é mais complicada, já que  $\vec{k}$  pode ter qualquer direção. Neste caso, não é possível representar a variação da energia em todas as direções de  $\vec{k}$ . Portanto, é necessário escolher as principais direções de  $\vec{k}$  na primeira zona de Brillouin, para que seja possível a representação da energia no esquema de zona reduzida, como mostra a figura 8 (a).

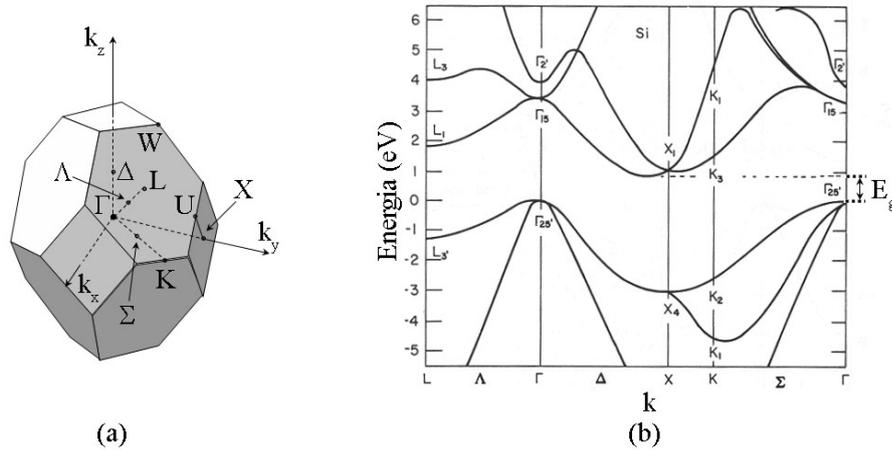


Figura 8: (a) Primeira zona de Brillouin para uma rede cristalina cúbica de face centrada, com a representação das principais direções de  $\vec{k}$ . (b) Estrutura de bandas do Si com estrutura cristalina diamante [11].

As estruturas de bandas podem ser calculadas numericamente através de modelos teóricos que utilizam diferentes tipos de aproximações. O exemplo mais conhecido é a teoria do funcional da densidade que é utilizado para investigar a estrutura eletrônica de sistemas de muitos corpos [12]. A figura 8 (b) mostra a estrutura de bandas de energia do silício para diversas direções de  $\vec{k}$ . Para isolantes e semicondutores, chama-se de *gap* a diferença de energia entre o fundo da banda superior (banda de condução) e o topo da banda inferior (banda de valência). Quando o fundo da banda de condução, e o topo da banda de valência estiverem posicionados para o mesmo valor de  $\vec{k}$ , o semiconductor possui *gap* direto, e se estiverem posicionados de forma a terem valores distintos de  $\vec{k}$ , então o semiconductor possui *gap* indireto, como mostra a figura 9. Esta diferença entre o *gap* direto e indireto é muito importante ao lidar com aplicações dos semicondutores em dispositivos emissores de luz, já que a probabilidade de recombinação radiativa do par elétron-buraco é muito maior nos semicondutores de *gap* direto.

A relação entre a energia e o vetor de onda para valores próximos ao fundo da banda de condução e topo da banda de valência é frequentemente aproximada a uma parábola [13]. A figura 9 (a), mostra a aproximação parabólica (descrito pelas curvas tracejadas), para as bandas de condução e de valência. Estas aproximações podem ser descritas como

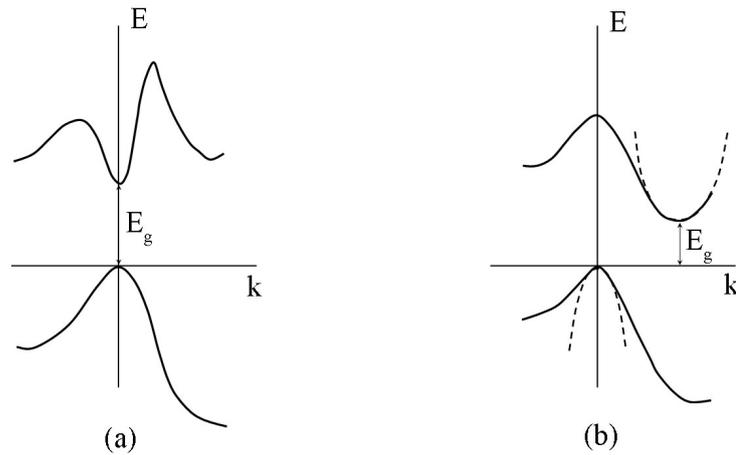


Figura 9: Representação da estrutura de bandas para um semiconductor de *gap* direto (a) e indireto (b). Aproximação parabólica do fundo da banda de condução e do topo da banda de valência é mostrada em (b) pelas curvas tracejadas.

$$E(k) - E_c = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \quad (2.4)$$

$$E_v - E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}, \quad (2.5)$$

onde  $E_c$  e  $E_v$  correspondem aos valores das energias no fundo da banda de condução e no topo da banda de valência respectivamente,  $m_v$  e  $m_c$  são as massas efetivas do elétron na banda de valência e condução respectivamente e  $\vec{k}$  é o vetor de onda. A concepção de massa efetiva é explicada em maiores detalhes na próxima seção.

As estruturas de bandas são frequentemente simplificadas para analisar dispositivos semicondutores. Como as propriedades dos semicondutores são governadas pelo fundo da banda de condução, e pelo topo da banda de valência, é suficiente considerar somente estas bandas. Desta forma, é conveniente que a representação da estrutura de bandas seja simplificada, como mostra a figura 10. Uma vez conhecendo a estrutura de bandas de um determinado material, ainda será necessário avaliar quais níveis de energia estão completamente, parcialmente ocupados ou vazios, já que as propriedades de condutividade no cristal estão diretamente relacionadas com a forma de preenchimento destes níveis. Se uma banda estiver vazia, não possuirá elétrons, e portanto não haverá condutividade elétrica. Bandas parcialmente ocupadas contêm elétrons, assim como níveis de energia desocupados. Estes níveis de energia desocupados, possibilitam com que os elétrons ganhem energia quando movendo sob influência de um campo elétrico. Desta forma, elétrons em uma banda parcialmente ocupada contribuem para a condutividade do material.

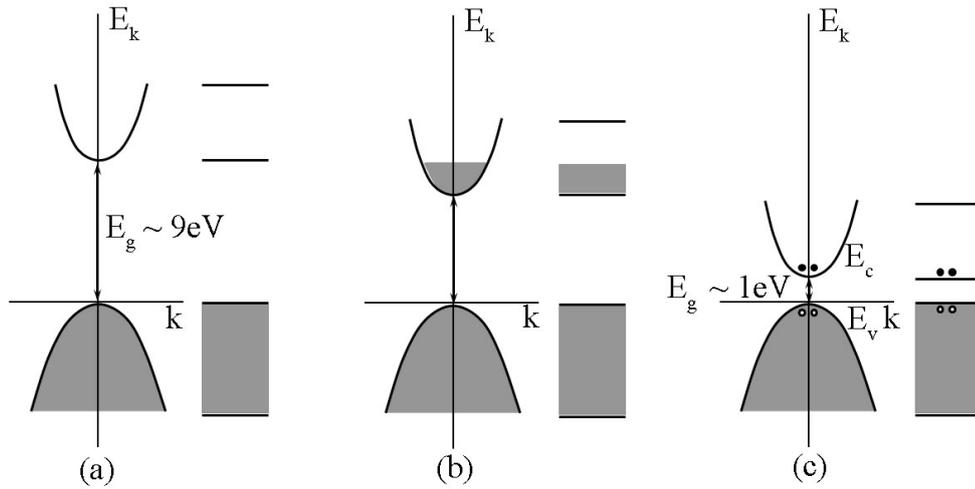


Figura 10: Ocupação das bandas para isolantes (a), condutores (b) e semicondutores (c).

Bandas completamente ocupadas no entanto contém muitos elétrons, porém não contribuem para a condutividade do material. Isto acontece porque os elétrons não podem ganhar mais energia, uma vez que todos os níveis de energia já estão ocupados. Em um cristal isolante, a banda de valência está completamente ocupada a temperatura de  $T = 0K$ , porém quando se cede energia para o cristal na forma de calor, é possível que alguns elétrons ganhem energia suficiente para atingirem a banda de condução. Quando um elétron passa para a banda de condução, pode-se dizer que este deixa na banda de valência estados que se comportam como portadores de carga positiva. Estes estados são chamados de buracos. Ambos, elétrons e buracos participam da condutividade elétrica do material, já que estes se deslocam em sentido opostos, sob a ação de um campo elétrico externo. A condutividade do material dependerá da quantidade de elétrons que atingirem a banda de condução. Esta, por sua vez, depende diretamente da temperatura e inversamente do *gap* do material. Portanto, materiais que possuem baixos valores do *gap* de energia  $E_g$ , da ordem de  $1eV$  ou menos, serão isolantes a temperatura  $T = 0K$  e possuirão uma condutividade significativa a temperatura ambiente. Estes materiais são chamados de semicondutores. A figura 10 mostra o esquema da ocupação das bandas de energia para um isolante (a), um condutor (b) e um semicondutor (c). A energia de Fermi  $E_F$  mostrada na figura 10 corresponde a energia do nível acima do qual não há estados ocupados a temperatura  $T = 0K$ .

### 2.1.3.1 Momento e Massa Efetiva

Para poder estudar as propriedades elétricas dos semicondutores, é necessário saber como um elétron se comporta no cristal sobre influência de um campo elétrico externo. A

função de Bloch descrita pela equação (2.2), representa ondas no qual o elétron se move livremente através do cristal com velocidade  $v = d\omega/dk$ . Para tratar o movimento do elétron, é conveniente introduzir a quantidade  $P = \hbar k$ , chamado de momento do elétron. Sabendo que a energia do elétron é dada por  $E = \hbar\omega$ , pode-se descrever o movimento do elétron em termos do momento  $P$ , já que a variação temporal do momento é igual a força externa aplicada. Desta forma tem-se

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{dE}{dp}, \quad (2.6)$$

Sabe-se que um campo elétrico  $\mathcal{E}_0$  produz uma força  $F = -q\mathcal{E}_0$  no elétron. Desta forma, a taxa de variação temporal da energia que o elétron sofrerá sob a ação deste campo elétrico será

$$\frac{dE}{dt} = -q\mathcal{E}_0 \cdot v = F \frac{d\omega}{dk} = \frac{F}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad (2.7)$$

Utilizando a regra da cadeia, pode-se escrever

$$\frac{dE}{dt} = \frac{dE}{dk} \cdot \frac{dk}{dt}. \quad (2.8)$$

Desta forma, a partir das equações (2.7) e (2.8) obtêm-se

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} = \frac{dP}{dt}, \quad (2.9)$$

que é exatamente a segunda lei de Newton. Portanto, elétrons em um sólido cristalino se aceleram sob a ação de um campo elétrico externo da mesma forma que um elétron livre no vácuo. Entretanto, observa-se que a rede cristalina não afeta o movimento do elétron. Na realidade o que ela afeta é a dependência da energia com o momento, é o que corresponde a mudança de massa do elétron [14]. Para demonstrar esta mudança da massa do elétron, obtêm-se a aceleração do elétron em função de  $E$  e  $k$ . A partir da equação (2.6) pode-se escrever

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k \partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \frac{dk}{dt}. \quad (2.10)$$

Isolando  $dk/dt$  da equação acima, e substituindo em (2.9), obtêm-se

$$F = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2} a. \quad (2.11)$$

Lembrando da segunda lei de Newton  $F = ma$ , conclui-se que a massa efetiva do elétron em um cristal é dada por

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2}. \quad (2.12)$$

## 2.1.4 Distribuição de Portadores

A distribuição de Fermi-Dirac informa a probabilidade em que os níveis de energia sejam ocupados por partículas Fermiônicas. Férmions são partículas que possuem spin semi-inteiro e que obedecem o princípio de exclusão de Pauli. O princípio de exclusão de Pauli diz que um único estado quântico pode ser ocupado por apenas um Férmion [15]. Desta forma, ao preencher uma banda de energia para  $T = 0K$  as partículas Fermiônicas começam a ocupar os estados de menor energia permitidos do cristal, de modo a preencher todos os estados até um certo nível  $E_F$ , chamado nível de Fermi. Entretanto, para temperaturas  $T > 0K$ , começa-se a observar estados ocupados logo acima do nível de Fermi. Como os elétrons são partículas Fermiônicas, a distribuição de Fermi-Dirac fornece a probabilidade que os estados com energia entre  $E$  e  $E + dE$  sejam ocupados com elétrons a uma temperatura absoluta  $T$ . A distribuição de Fermi-Dirac é dada por

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/k_B T}}, \quad (2.13)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann, e  $E_F$  é a energia de Fermi. Esta distribuição indica a probabilidade em que um estado de energia  $E$ , seja ocupado por uma partícula Fermiônica. Desta forma, a função  $f(E)$  fornece um valor unitário para energias abaixo da energia de Fermi, é igual a 1/2 para ( $E = E_F$ ) e decresce exponencialmente para energias maiores que a energia de Fermi, como mostra a figura 11. É importante ressaltar que a energia de Fermi  $E_F$  varia de acordo com o material, dependendo da forma das bandas e do número de elétrons.

### 2.1.4.1 Densidade de Estados

A função que informa o número de estados possíveis por unidade de volume em um intervalo de energia entre  $E$  e  $E + dE$  é designado por  $D(E)dE$ , onde  $D(E)$  significa

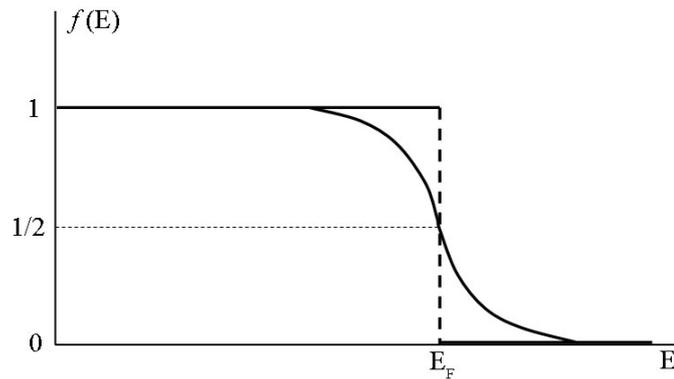


Figura 11: Distribuição de Fermi-Dirac para  $T = 0K$  (linha tracejada) e para  $T > 0K$  (linha contínua).

a densidade de estados acessíveis com energia  $E$ . Para estimar a densidade de elétrons em um semicondutor, é necessário saber a densidade de estados acessíveis  $D(E)$  e a probabilidade com que cada um esteja ocupado. Para calcular a densidade de estados, é necessário considerar um cristal de volume finito, que possua elétrons com massa efetiva  $m^*$  e que são livres para se mover. Assume-se que o semicondutor seja um cubo de lado  $L$ . Esta suposição não afeta o resultado, uma vez que a densidade de estados não depende do tamanho ou formato do semicondutor em questão. A solução da equação de Schrödinger para o elétron livre são funções senos e cossenos da forma

$$\Psi(x) = A \sin(k_x x) + B \cos(k_x x), \quad (2.14)$$

onde  $A$  e  $B$  são constantes a serem determinadas. Ao considerar o cristal finito, o elétron é livre para mover-se no interior do cristal, possuindo uma barreira de potencial infinita nas superfícies do mesmo. Desta forma, as funções de onda devem ser zero quando  $x = 0$ , para que isto seja verdade  $B$  tem que ser nulo. Para valores de  $x = L$ , a função de onda também deve ser zero, e estas condições estarão satisfeitas somente quando

$$k_x = \frac{\pi}{L} n_x. \quad (2.15)$$

Pode-se fazer a analogia desta análise para as direções  $y$  e  $z$ . Cada solução possível corresponde a um cubo de lado  $\pi/L$  no espaço do vetor de onda  $k$ . Considerando um cristal como sendo uma esfera de raio  $k$ , o número total de estados  $N(k)$  disponíveis será igual ao volume total da esfera  $4/3\pi k^3$  dividido pelo volume unitário  $(\pi/L)^3$ , ou seja

$$N(k) = \frac{1}{8} 2 \frac{4}{3} \pi k^3 \left( \frac{L}{\pi} \right)^3, \quad (2.16)$$

onde  $1/8$  surge ao considerar apenas o octeto referente aos valores positivos de  $k$ , e  $2$  é acrescentado devido a possibilite dual do *spin* do elétron em cada estado. Utilizando a regra da cadeia, pode-se escrever o número de estados por unidade de energia da forma

$$\frac{dN(k)}{dE} = \frac{dN(k)}{dk} \frac{dk}{dE} = \left( \frac{L}{\pi} \right)^3 \pi k^2 \frac{dk}{dE}. \quad (2.17)$$

Sabe-se qual é a forma da energia cinética  $E$  de uma partícula de massa  $m^*$ . Portanto, pode-se isolar  $k$  para calcular o valor da derivada  $dk/dE$

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \implies k = \frac{(2m^* E)^{\frac{1}{2}}}{\hbar} \implies \frac{dk}{dE} = \frac{1}{2\hbar} \left( \frac{2m^*}{E} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.18)$$

Substituindo  $dk/dE$  e  $k$  na equação (2.17) para obter  $dN/dE$  dependendo somente de  $E$ , obtêm-se

$$\frac{dN(k)}{dE} = \left( \frac{L}{\pi} \right)^3 \pi \left( \frac{2m^* E}{\hbar^2} \right) \frac{1}{2\hbar} \left( \frac{2m^*}{E} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{L^3}{2\pi^2} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}. \quad (2.19)$$

Na equação anterior foi obtido o número de estados  $dN/dE$  em função da energia  $E$ . Desta forma, para obter a densidade de estados  $D(E)$ , deve-se dividir o número de estados pelo volume total  $V = L^3$ , ou seja

$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}. \quad (2.20)$$

A equação (2.20) fornece a densidade de estados para um cristal *bulk* (tri-dimensional). Deste modo, para calcular a densidade de estados para estruturas cristalinas de baixa dimensionalidade, tais como: um poço de potencial (cristal bi-dimensional), um fio quântico (cristal uni-dimensional) ou um ponto quântico (cristal uni-dimensional), pode-se fazer uma analogia ao caso tri-dimensional. Considerando um cristal bi-dimensional, o número de estados  $N_{2D}$  será dado pela área total  $\pi k^2$  dividido pela área unitária  $(\pi/L)^2$ , já no caso uni-dimensional, o número de estados  $N_{1D}$  será igual ao comprimento do fio  $k$  dividido pelo comprimento unitário  $(\pi/L)$ , desta forma temos

$$N_{2D} = \frac{1}{4} 2\pi k^2 \left( \frac{L}{\pi} \right)^2 = \frac{1}{2} \frac{k^2 L^2}{\pi} \quad (2.21)$$

$$N_{1D} = \frac{1}{2} 2k \left( \frac{L}{\pi} \right) = \frac{kL}{\pi}. \quad (2.22)$$

Calculando a derivada do número de estados  $N_{2D}$  e  $N_{1D}$  pelo vetor de onda  $k$ , obtêm-se

$$\frac{dN_{2D}}{dk} = \frac{kL^2}{\pi} \quad (2.23)$$

$$\frac{dN_{1D}}{dk} = \frac{L}{\pi}. \quad (2.24)$$

Analogamente ao caso  $3D$ , substituindo  $dk/dE$  e  $k$  da equação (2.18) em  $dN_{2D}/dE$  e  $dN_{1D}/dE$ , obtêm-se

$$\frac{dN_{2D}}{dE} = \frac{dN_{2D}}{dk} \frac{dk}{dE} = \frac{(2m^*E)^{\frac{1}{2}}}{\hbar} \frac{L^2}{\pi} \frac{1}{2\hbar} \left( \frac{2m^*}{E} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{L^2 m^*}{\pi \hbar^2} \quad (2.25)$$

$$\frac{dN_{1D}}{dE} = \frac{dN_{1D}}{dk} \frac{dk}{dE} = \frac{L}{\pi} \frac{1}{2\hbar} \left( \frac{2m^*}{E} \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{L}{2\pi \hbar} \left( \frac{2m^*}{E} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.26)$$

Desta forma, a densidade de estados para os casos  $2D$  e  $1D$  correspondem aos números de estados (2.25) e (2.26) dividido pela área  $A = L^2$  e pelo comprimento  $L$  respectivamente, ou seja

$$D_{2D}(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \quad (2.27)$$

$$D_{1D}(E) = \frac{1}{2\pi \hbar} \left( \frac{2m^*}{E} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.28)$$

Finalmente, considera-se a densidade de estados para um cristal zero-dimensional. Nenhum movimento é possível dentro de uma estrutura destas, uma vez que o elétron está confinado em todas as três direções. Teoricamente, não existe nenhum espaço acessível para que os elétrons sejam preenchidos. Entretanto, suponha-se que cada estrutura zero-dimensional possa ser interpretada como um estado quântico, que pode ser ocupado por somente dois elétrons. Por isso, a densidade de estados pode ser descrita por uma função

delta [16], da forma

$$D_{0D}(E) = 2\delta(E). \quad (2.29)$$

Para mais de um estado quântico, a densidade de estados pode ser escrita como

$$D_{0D}(E) = \sum_n 2\delta(E). \quad (2.30)$$

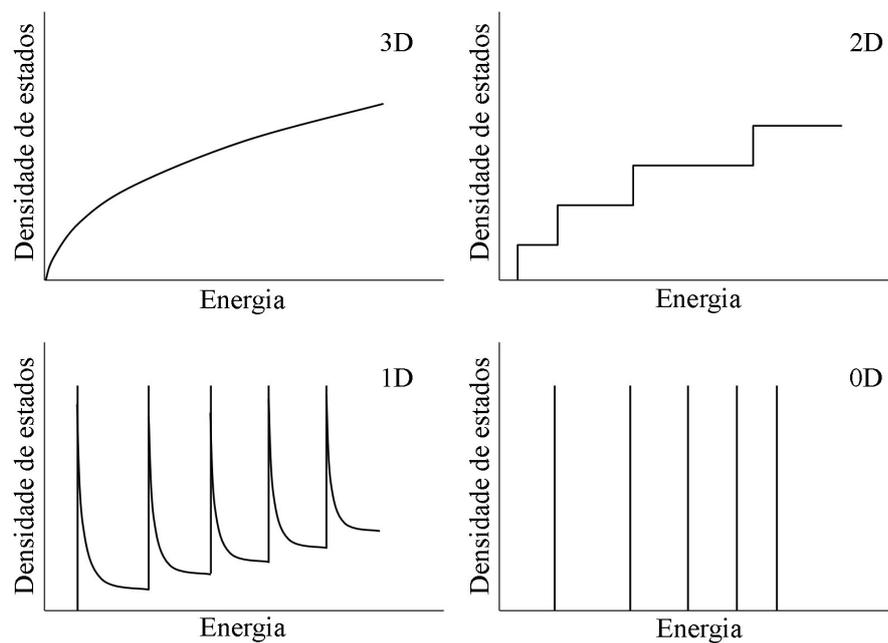


Figura 12: Densidade de estados para semicondutores em 0, 1, 2, e 3 dimensões.

A figura 12, mostra a densidade de estados para estruturas cristalinas sob confinamento em 0, 1, 2 e 3 dimensões. Embora que a densidade de estados para um cristal bi-dimensional seja constante, ela possui vários valores, de modo a formar uma função degrau, com cada degrau ocorrendo para a energia de cada nível quantizado.

### 2.1.5 Concentração Intrínseca de Portadores

De acordo com que foi visto na seção anterior, a distribuição de elétrons em um material pode ser dada pela equação (2.13). A figura 10 (c) mostra que os semicondutores possuem o nível de Fermi  $E_F$ , localizado aproximadamente no centro do *gap* deste material. Desta forma, a temperatura  $T = 0K$ , pode-se concluir que um semiconductor possui a banda de valência completamente preenchida com elétrons e a banda de condução completamente vazia. Existem vários processos que levam elétrons da banda de valência para

a banda de condução. Quando isto acontece, surge uma lacuna na banda de valência de onde o elétron saiu, esta lacuna é chamada de buraco. Este processo de criação de elétrons na banda de condução e buracos na banda de valência é chamado de geração de pares. O processo inverso ao de geração, onde um elétron da camada de condução retorna a uma lacuna da banda de valência é chamado de recombinação de pares. A temperatura  $T > 0K$ , a energia térmica desempenha o papel da geração de pares. Desta forma, um número apreciável de elétrons surgem na banda de valência, de forma a criarem uma pequena condutividade elétrica.

Semicondutores intrínsecos são semicondutores puros, ou seja, não possui impurezas. Isto significa que à temperatura ambiente, estes semicondutores possuem a concentração de elétrons  $n$  igual a concentração de buracos  $p$ . Desta forma, no equilíbrio térmico, pode-se dizer que

$$n = p = n_i, \quad (2.31)$$

onde  $n_i$  é a concentração de portadores no semicondutor intrínseco. O processo de geração e recombinação de pares é um processo dinâmico, isto significa que a todo instante existe pares sendo gerados e recombinados. Portanto, no regime estacionário, é de se esperar que a taxa de geração seja igual a de recombinação, ou seja

$$G = R. \quad (2.32)$$

A taxa de geração depende da quantidade de energia térmica fornecida ao sistema, enquanto que a taxa de recombinação depende do número de elétrons na banda de condução e do número de buracos (estados desocupados) na banda de valência. Desta forma, pode-se dizer que quanto maior o número de pares elétrons-buraco, maior será a taxa de recombinação.

Para calcular as concentrações de elétrons e buracos de um semicondutor intrínseco, considera-se a representação das bandas de energia parabólicas dada pela figura 10 (c). O *gap* de energia deste semicondutor é dado pela diferença entre a energia correspondente ao fundo da banda de condução  $E_c$  e topo da banda de valência  $E_v$ , ou seja,  $E_c - E_v = E_g$ . Sabe-se que em um semicondutor intrínseco a temperatura  $T = 0K$ , a energia de Fermi  $E_F$  fica localizada entre as bandas de valência e condução. Porém, para se conhecer a posição exata de  $E_F$ , é necessário saber a forma das bandas de condução e de valência, já que para  $T > 0K$ , o número de elétrons é igual ao número de buracos devido a simetria

de  $f(E)$ . Portanto, se as bandas de condução e de valência forem simétricas, o número de estados acessíveis em ambos serão iguais, desta forma a energia de Fermi estará situada exatamente no meio do *gap*. Por outro lado, se as bandas forem assimétricas,  $E_F$  estará levemente deslocada do meio do *gap*. Na realidade, o valor exato da energia de Fermi é calculado através do cálculo das concentrações de portadores.

Foi visto que a densidade de estados para um condutor intrínseco é dada pela equação (2.20). Para determinar a densidade de estados somente para a banda de condução, basta substituir  $E$  e  $m^*$  da equação (2.20) por  $E - E_c$  e  $m_c$  da aproximação parabólica da banda de condução (2.4). Desta forma obtêm-se

$$D_c(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.33)$$

De maneira análoga, a densidade de estados para a banda de valência é dada por

$$D_v(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_v}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_v - E)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.34)$$

onde  $m_c$  e  $m_v$  são as massas efetivas do elétron na banda de condução e do buraco na banda de valência respectivamente. Sabe-se que a concentração de elétron (buracos) na banda de condução (valência)  $n(E)$  ( $p(E)$ ) é dada pelo produto da densidade de estados permitidos  $D_c(E)$  ( $D_v(E)$ ) pela probabilidade de ocupação de cada um destes estados  $f(E)$  ( $1 - f(E)$ ). Desta forma, a concentração de elétrons (buracos) na banda de condução (valência) pode ser calculada integrando  $D_c f(E)$  ( $D_v(1 - f(E))$ ) em toda a banda de condução (valência), ou seja

$$n(E) = \int_{E_c}^{\infty} D_c f(E) dE \quad (2.35)$$

$$p(E) = \int_{-\infty}^{E_v} D_v(1 - f(E)) dE. \quad (2.36)$$

Para que a integral destas equações sejam simplificadas, pode-se utilizar uma forma aproximada da função de Fermi-Dirac. Para temperaturas próximas a temperatura ambiente  $T \simeq 290K$ , o fator de Boltzmann vale  $k_B T \simeq 0,025eV$ . Como  $E_F$  está próximo do meio do *gap*, que vale  $E_g \simeq 1eV$ , a diferença  $E - E_F$  será muito maior que  $k_B T$ , já que  $E$  está variando entre  $E_c$  e  $\infty$ . Desta forma, a equação (2.13) pode aproximada da forma

$$f(E) \simeq e^{-(E-E_F)/k_B T}. \quad (2.37)$$

De maneira análoga para a banda de valência, pode-se dizer que a diferença  $E_F - E$  será muito maior que  $k_B T$ , uma vez que  $E$  está agora variando entre  $-\infty$  e  $E_v$ , portanto a função de Fermi-Dirac pode ser aproximada da forma

$$(1 - f(E)) \simeq e^{(E-E_F)/k_B T}. \quad (2.38)$$

Substituindo as densidades de estados para as bandas de valência e condução (2.33 e 2.34) e as funções aproximadas de Fermi-Dirac (2.37) e (2.38) nas equações (2.35) e (2.36), obtêm-se

$$n(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{E_c}^{\infty} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} e^{-(E-E_F)/k_B T} dE \quad (2.39)$$

$$p(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_v}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^{E_v} (E_v - E)^{\frac{1}{2}} e^{(E-E_F)/k_B T} dE. \quad (2.40)$$

Fazendo algumas mudanças, as equações anteriores podem ser reescritas da forma

$$n(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-(E_c-E_F)/k_B T} \int_0^{\infty} x^{\frac{1}{2}} e^{-x/k_B T} dx \quad (2.41)$$

$$p(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_v}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{(E_v-E_F)/k_B T} \int_{-\infty}^0 y^{\frac{1}{2}} e^{-y/k_B T} dy, \quad (2.42)$$

onde  $x = (E - E_c)$  e  $y = (E_v - E)$ . As integrais definidas possuem soluções analíticas, que valem  $(k_B T)^{3/2} \pi^{1/2} / 2$  para ambos os limites de integração. Portanto, as concentrações de elétrons e buracos nas bandas de condução e valência são respectivamente

$$n(E) = 2 \left( \frac{m_c k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-(E_c-E_F)/k_B T} \quad (2.43)$$

$$p(E) = 2 \left( \frac{m_v k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{(E_v-E_F)/k_B T}. \quad (2.44)$$

A figura 13 mostra, da esquerda para a direita, o esquema simplificado da estrutura de

bandas, a densidade de estados, a distribuição de Fermi-Dirac e a distribuição de elétrons e buracos a temperatura  $T > 0K$  para um semiconductor intrínseco.

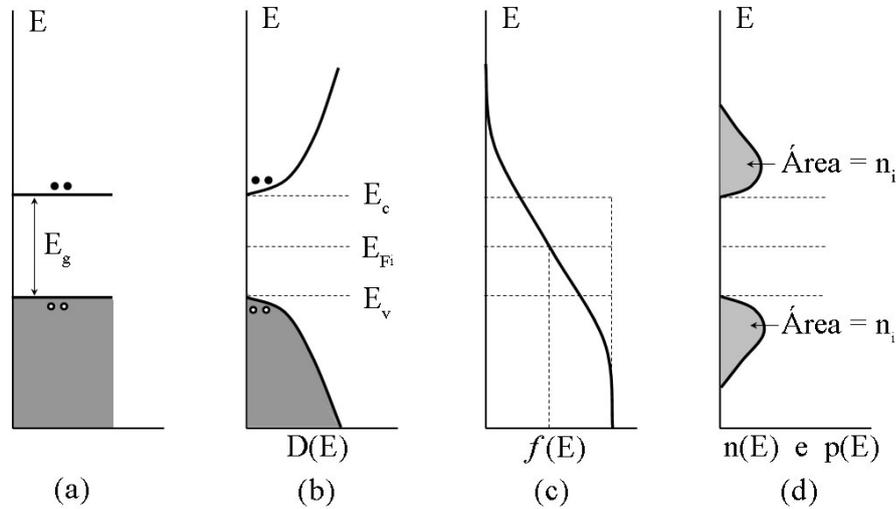


Figura 13: Ilustração gráfica da distribuição de portadores a temperatura  $T > 0K$  em semiconductor intrínseco. (a) Esquema simplificado da estrutura de bandas. (b) Densidade de estados. (c) Distribuição de Fermi-Dirac. (d) Distribuição de portadores.

Para poder determinar o nível de Fermi  $E_F$  em um semiconductor intrínseco, basta utilizar a condição dada pela equação (2.31), de que o número de elétrons na banda de condução seja igual ao número de buracos na banda de valência. Desta forma, igualando as equações (2.43) e (2.44), obtêm-se a energia de Fermi para um semiconductor intrínseco

$$E_{Fi} = \frac{1}{2}(E_v + E_C) + \frac{3}{4}k_B T \ln \frac{m_v}{m_c} \quad (2.45)$$

Esta equação mostra que a energia de Fermi só estará exatamente no meio da banda de condução e de valência se  $T = 0K$ , ou se as massas efetivas dos elétrons e buracos forem iguais. Portanto, nos casos reais onde as bandas não são simétricas, i.e.  $m_c \neq m_v$ , o nível de Fermi fica ligeiramente deslocado do meio das bandas, e sua posição depende da temperatura. Como à temperatura ambiente  $k_B T \ll E_g$ , esta correção é muito pequena para o Si, Ge e GaAs.

Uma vez calculado a energia de Fermi, é possível substituí-la nas equações (2.43) e (2.44) para calcular as concentrações de elétrons e buracos, da forma

$$n(E) = 2 \left( \frac{m_c k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-(E_c - E_{Fi})/k_B T} \quad (2.46)$$

$$p(E) = 2 \left( \frac{m_v k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{(E_v - E_{Fi})/k_B T}. \quad (2.47)$$

Utilizando o fato de que em um semicondutor intrínseco  $n(E) = p(E) = n_i$ , obtêm-se

$$n_i = \sqrt{n(E)p(E)} = \left( \frac{1}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{k_B T}{\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (m_v m_c)^{\frac{3}{4}} e^{-E_g/2k_B T}. \quad (2.48)$$

Este resultado mostra que em um semicondutor intrínseco, a concentração de portadores possui uma dependência com a temperatura nos dois termos  $\exp(-E_g/2k_B T)$  e  $(k_B T)^3/2$ .

### 2.1.6 Doadores e Aceitadores de Elétons

Foi visto na seção anterior que a concentração de portadores de carga nos semicondutores intrínsecos varia exponencialmente com a temperatura. Isto faz com que as propriedades elétricas destes materiais possuam uma forte influência com a temperatura. Este fato, faz com que os semicondutores intrínsecos não sejam amplamente utilizados em aplicações tecnológicas. Por isso são utilizados semicondutores extrínsecos, que são dopados com algumas impurezas determinadas. O processo de dopagem permite o controle da quantidade de elétrons e buracos, e conseqüentemente das propriedades elétricas do semicondutor. O controle da quantidade de portadores não requer somente a presença de impurezas, mas que estas liberem elétrons para a banda de condução, neste caso, as impurezas são chamadas de doadoras de elétrons. Se a impureza liberar buracos na banda de valência, estas são chamadas de aceitadores de elétrons. Quando um semicondutor possui predominância de elétrons, pode-se dizer que este é do tipo  $n$ , e quando possui predominância de buracos, do tipo  $p$ .

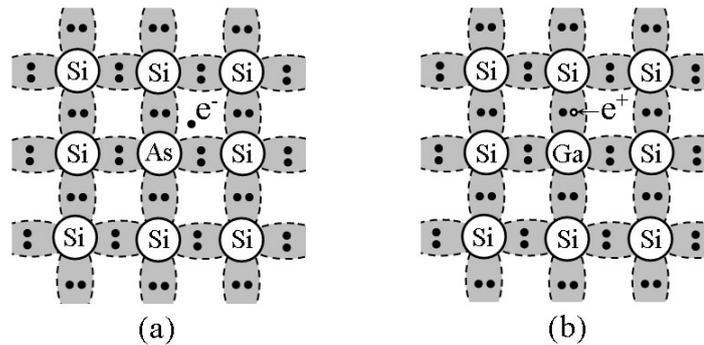


Figura 14: Representação esquemática de um cristal de silício dopado com (a) doadores e (b) aceitadores de elétrons.

A figura 14 mostra a representação esquemática da dopagem de um cristal de silício. Para que seja obtido um semiconductor do tipo  $n$ , um átomo de silício é substituído por um átomo do grupo V da tabela periódica, este elemento possui cinco elétrons de valência ao invés de quatro como o silício. Desta forma, quatro elétrons participam da ligação covalente com os átomos vizinhos de Si. O elétron remanescente fica fracamente ligado ao átomo, podendo ser facilmente ionizado a temperaturas acima de  $50K$ . Uma vez ionizado, o elétron fica livre para se movimentar no cristal, isto significa dizer que este elétron livre passa para a banda de condução. Portanto, pode-se dizer que o nível de energia destas impurezas está muito próximo da banda de condução como mostrado na figura 15 (a).

Para que seja obtido um semiconductor do tipo  $p$ , um átomo de silício é substituído por um átomo do grupo III, que possui três elétrons de valência. Neste caso há uma carência de elétrons, e para que as quatro ligações covalentes da estrutura cristalina fiquem completas é necessário a captura de elétrons da banda de valência. Quando elétrons saem da banda de valência para a banda de condução, estes deixam lacunas ou buracos na banda de valência. Desta maneira, pode-se dizer que estas impurezas criam um nível de energia muito próximo a banda de valência, como mostra a figura 15 (b).

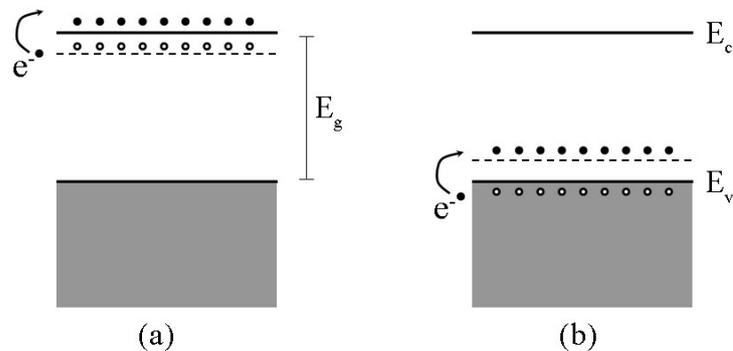


Figura 15: Esquema da energia de bandas para semicondutores extrínsecos dopados com (a) impurezas doadoras e (b) impurezas aceitadoras de elétrons.

Para calcular as concentrações de elétrons e de buracos em um semiconductor extrínseco utilizam-se as equações (2.35) e (2.36) mostradas anteriormente para os semicondutores intrínsecos. Estas equações também são válidas para semicondutores extrínsecos, assim como os resultados mostrados pelas equações (2.43) e (2.44), desde que a aproximação (2.37) seja válida. Representando as concentrações de elétrons e buracos por  $n_0(E)$  e  $p_0(E)$  respectivamente, pode-se escrever que

$$n_0(E) = 2 \left( \frac{m_c k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-(E_c - E_F)/k_B T} \quad (2.49)$$

$$p_0(E) = 2 \left( \frac{m_v k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{(E_v - E_F)/k_B T}. \quad (2.50)$$

A figura 16 mostra as concentrações de elétrons e buracos em um semiconductor extrínseco do tipo  $n$ . Como se pode perceber, o que diferencia a concentração de portadores de semicondutores intrínsecos e extrínsecos é a posição do nível de Fermi. Neste caso, o nível de Fermi está mais próximo da banda de condução, desta forma, pode-se observar que a exponencial da equação (2.49) é muito maior do que a (2.50). Isto significa dizer que no semiconductor do tipo  $n$  a concentração de elétrons aumenta em relação a  $n_i$  devido a ionização das impurezas doadoras. Por outro lado o número de buracos é reduzido, devido ao fato de que a quantidade de elétrons para recombinar é maior.

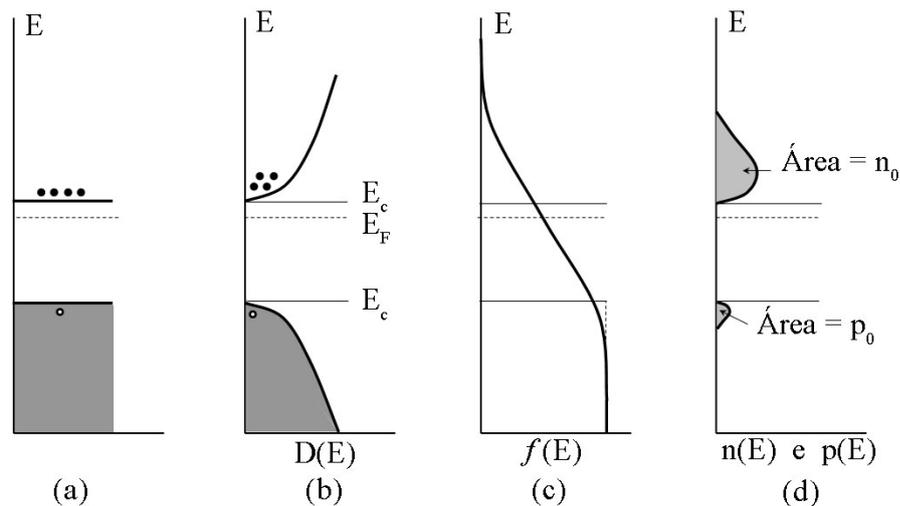


Figura 16: Ilustração gráfica da distribuição de portadores a temperatura  $T > 0K$  em semiconductor extrínseco do tipo  $n$ . (a) Esquema simplificado da estrutura de bandas. (b) Densidade de estados. (c) Distribuição de Fermi-Dirac. (d) Distribuição de portadores.

O produto das concentrações de elétrons e buracos em um semiconductor extrínseco pode ser escrito como

$$n_0 p_0 = \frac{1}{2} \left( \frac{k_B T}{\pi \hbar^2} \right)^3 (m_v m_c)^{\frac{3}{2}} e^{-E_g/k_B T}. \quad (2.51)$$

Comparando este resultado com a equação (2.48) dos semicondutores intrínsecos, pode-se perceber que

$$n_0 p_0 = n_i^2. \quad (2.52)$$

Portanto, o produto  $n_0 p_0$  é o mesmo que nos semicondutores intrínsecos, não dependendo do tipo nem da concentração de impurezas. Este resultado é conhecido como a lei de ação das massas. Utilizando as equações (2.46) e (2.47), podem-se reescrever as concentrações de elétrons e buracos para um semiconductor extrínseco da forma

$$n_0(E) = n_i e^{(E_F - E_{Fi})/k_B T} \quad (2.53)$$

$$p_0(E) = n_i e^{(E_{Fi} - E_F)/k_B T}. \quad (2.54)$$

Esta relação mostra que  $n_0 = p_0 = n_i$  se  $E_F = E_{Fi}$ , e que  $n_0$  e  $p_0$  variam exponencialmente quando  $E_F$  se afasta de  $E_{Fi}$ , sendo  $E_{Fi}$  a energia de Fermi no semiconductor intrínseco. No caso mostrado na figura 16, um semiconductor do tipo  $n$ , percebe-se que o nível de Fermi está bem próximo da banda de condução. Deste modo,  $(E_F - E_{Fi})/k_B T \gg 1$  e  $(E_{Fi} - E_F)/k_B T \ll 0$ , e isto significa que  $n_0 \gg n_i$  e  $p_0 \ll n_i$ . Neste caso os elétrons são chamados de portadores majoritários e os buracos de portadores minoritários.

## 2.2 Geração e Recombinação de Portadores

### 2.2.1 Geração Através da Radiação

Nos semicondutores, elétrons e buracos são sempre criados aos pares durante o processo de absorção óptica. Quando um fóton de energia  $\hbar\omega$  é absorvido, um elétron passa da banda de valência para a de condução. A condição necessária para que isto ocorra é de que a energia do fóton  $E_f$  seja maior que a energia de gap  $E_g$ . Como o vetor de onda do fóton é desprezível, o elétron que é gerado na banda de condução possui o mesmo  $\vec{k}_e$  do elétron removido da banda de valência. Isto corresponde à criação de um buraco, cujo vetor de onda seja  $\vec{k}_b = -\vec{k}_e$ . Ou seja, a absorção de um fóton corresponde a criação de duas quase-partículas: um elétron e um buraco, como mostra a figura 17. Como estas possuem momento de mesmo módulo porém com sentidos opostos, pode-se dizer que o momento total antes e depois da absorção é nulo, ou seja, ele é conservado.

Independente de qual seja o mecanismo de geração de pares elétrons-buraco, o processo sempre é dinâmico. Isto quer dizer que elétrons vão para a banda de condução deixando

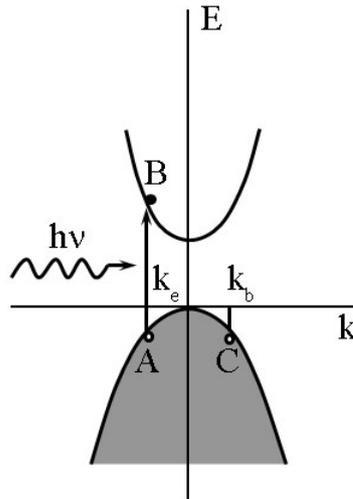


Figura 17: Absorção de um fóton em um semicondutor de *gap* direto seguida pela geração de um par elétron-buraco.

buracos na banda de valência, com uma taxa  $G$ , que significa o número de pares gerados por unidade de volume por unidade de tempo. Ao mesmo tempo, elétrons se recombinam com buracos a uma taxa de recombinação  $R$ .

Considerando um semicondutor de *gap* direto em equilíbrio térmico, a vibração térmica contínua presente na rede faz com que algumas ligações entre átomos se rompam [13]. Quando isto acontece, um par elétron-buraco é gerado. Este processo é chamado de geração térmica de portadores, e é representado pela taxa de geração  $G_t$ . O processo inverso, que ocorre para que o semicondutor retorne ao equilíbrio térmico será representado pela taxa de recombinação  $R_t$ . Uma vez atingido o equilíbrio térmico, a taxa de geração  $G_t$  deve ser igual a taxa de recombinação  $R_t$ , desta forma a concentração de portadores permanece constante, e a condição  $pn = n_i^2$ , continua sendo válida.

## 2.2.2 Recombinação Direta

No caso da recombinação direta ou banda a banda, um elétron retorna diretamente da banda de condução para um estado desocupado na banda de valência, aniquilando um par elétron-buraco. Este processo é ilustrado esquematicamente na figura 18. Neste caso, o elétron perde energia equivalente ao *gap* do semicondutor. Em um semicondutor de *gap* direto, este processo de recombinação resulta na emissão de um fóton, e a recombinação é dita como radiativa.

Quando excesso de portadores são introduzidos em um semicondutor de *gap* direto, a probabilidade com que os elétrons e buracos se recombinem diretamente aumenta. Isto

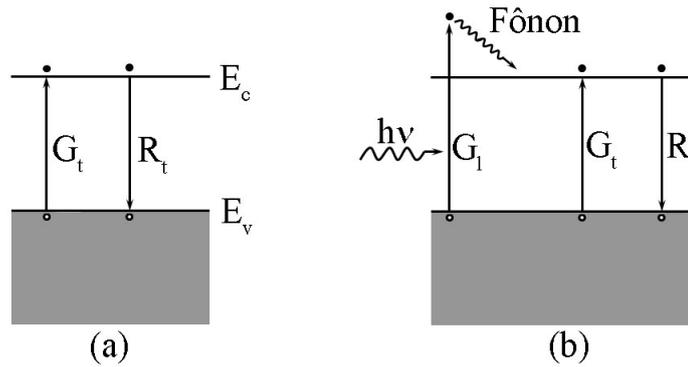


Figura 18: Geração e recombinação direta de pares elétrons-buraco em equilíbrio térmico (a) e sob excitação luminosa (b).

acontece porque a taxa de recombinação direta  $R$  é diretamente proporcional a concentração de elétrons disponíveis na banda de condução  $n$  e a concentração de buracos disponíveis na banda de valência  $p$ , ou seja

$$R = \beta np, \quad (2.55)$$

onde  $\beta$  é a constante de proporcionalidade. Como dito anteriormente, no equilíbrio térmico a taxa de recombinação é igual a taxa de geração. Portanto, para um semicondutor do tipo  $n$ , temos

$$G_t = R_t = \beta n_{n0} p_{n0}, \quad (2.56)$$

onde  $n_{n0}$  e  $p_{n0}$  representam as concentrações de elétrons e buracos em um semicondutor do tipo  $n$  em equilíbrio térmico. Incidindo um feixe de luz sobre o semicondutor para se produzir pares elétrons-buraco com uma taxa  $G_l$ , a concentração de portadores ficará acima do valor de equilíbrio térmico. Portanto, as taxas de geração e recombinação ficam

$$G = G_l + G_t \quad (2.57)$$

$$R = \beta n_{n0} p_{n0} = \beta (n_{n0} + \Delta n)(p_{n0} + \Delta p), \quad (2.58)$$

onde  $\Delta n$  e  $\Delta p$  são os excessos de elétrons e buracos gerados pela incidência da luz, dados por  $\Delta n = n_n - n_{n0}$  e  $\Delta p = p_n - p_{n0}$ . Neste caso  $\Delta n = \Delta p$ , para que seja mantida a neutralidade total de cargas.

A taxa líquida de mudança na concentração de buracos pode ser escrita como

$$\frac{dp_n}{dt} = G - R = G_l + G_t - R. \quad (2.59)$$

No regime estacionário,  $dp_n/dt = 0$ . Desta forma, a equação anterior pode ser reescrita como

$$G_l = R - G_t \equiv U, \quad (2.60)$$

onde  $U$  é a taxa líquida de recombinação. Substituindo as equações (2.56) e (2.58) na equação (2.62), e considerando  $\Delta n = \Delta p$ , obtêm-se

$$U = \beta(n_{n0} + p_{n0} + \Delta n)\Delta p. \quad (2.61)$$

Sabe-se que existe a predominância de elétrons em um semiconductor do tipo  $n$ , i.e.  $n_n > p_n$ . Desta forma, considerando uma baixa geração de portadores comparada a concentração majoritária de portadores  $n_n$ , tem-se que  $p_{n0} \ll n_{n0}$ . Assim, a equação (2.62) pode ser simplificada por

$$U \simeq \beta n_{n0} \Delta p = \frac{p_n - p_{n0}}{1/\beta n_{n0}} \quad (2.62)$$

Portanto, a taxa líquida de recombinação é proporcional a concentração minoritária de portadores  $p_n$ . A constante de proporcionalidade  $1/\beta n_{n0}$  é chamada de tempo de vida  $\tau_p$  dos portadores minoritários. Reescrevendo

$$U \simeq \beta n_{n0} \Delta p = \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p}, \quad (2.63)$$

onde

$$\tau_p = \frac{1}{\beta n_{n0}}. \quad (2.64)$$

A explicação física para o parâmetro tempo de vida pode ser mais bem entendida pela resposta transiente do semiconductor após a remoção súbita da fonte de luz.

### 2.2.3 Recombinação Indireta

Para semicondutores de *gap* indireto, como o silício, o processo de recombinação direta é muito improvável. Isto acontece porque os elétrons no fundo da banda de condução possuem momento cristalino diferente de zero quando comparado aos buracos no topo da banda de valência. Portanto, uma transição direta que conserva o momento e energia ao mesmo tempo não é possível sem a interação simultânea com a rede cristalina. Desta forma, o processo de recombinação predominante nestes semicondutores se dá por transições indiretas através de níveis de energia localizados no meio da faixa de energia proibida (*gap*). Estes níveis de energia são criados nos semicondutores através de impurezas ou por alguns tipos de defeitos na rede cristalina. Estes níveis intermediários agem como degraus entre a banda de valência e de condução, causando uma ampla intensificação no processo de recombinação em semicondutores de *gap* indireto. Dependendo de sua localização dentro do *gap* do material, o nível de energia pode agir como uma armadilha para elétrons e buracos, ou como um centro de recombinação dos mesmos. O nível intermediário de energia agindo como armadilha para elétrons ou buracos possui uma alta probabilidade de capturar um elétron ou um buraco das bandas de condução e valência respectivamente, liberando-os de volta após um determinado período. Nos centros de recombinação, a probabilidade que um elétron e um buraco sejam capturados é praticamente a mesma. Desta forma, quando um elétron capturado é seguido por a captura de um buraco, isto resulta na aniquilação de um par elétron-buraco. A energia potencial do par é dissipada em dois estágios. Parte desta energia é liberada quando o elétron faz a transição da banda de condução para o nível intermediário, e o resto da energia é liberado quando o elétron aprisionado no nível intermediário recombina com um buraco. Em geral, em todos os dois estágios a energia é dissipada na forma de fônons, por isso este processo de recombinação é chamado de não radiativo. A maioria dos centros de recombinação possui mais de um nível de energia, porém na maioria dos casos somente um nível predomina os processos de recombinação.

A figura 19 mostra várias transições que ocorrem no processo de recombinação indireta através dos estados intermediários de energia.

As setas da figura 19, indicam as transições do elétron no processo. A figura (a) mostra o processo de captura de um elétron da banda de condução pelo nível intermediário que possui energia  $E_t$ . O processo inverso de emissão do elétron do nível intermediário para a banda de condução está descrita em (b). A figura (c) representa a captura de um buraco da banda de valência pelo nível intermediário. Neste caso o nível intermediário emite o

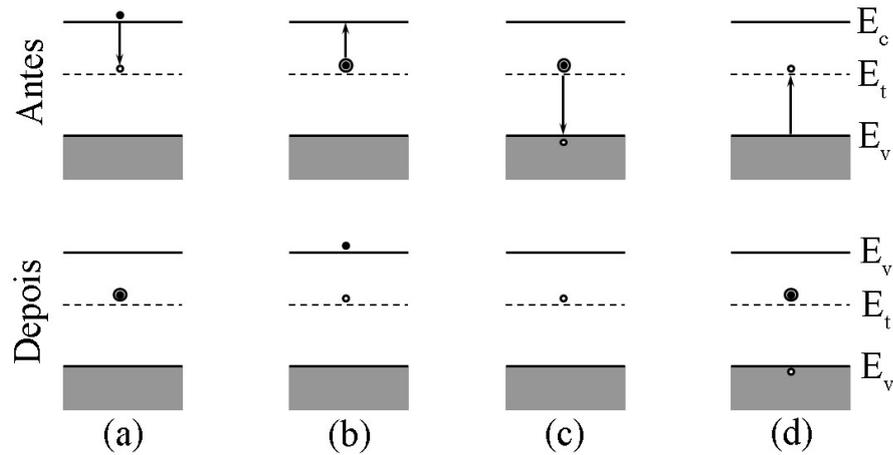


Figura 19: Representação esquemática dos processos de recombinação indireta de pares elétrons-buraco através de um nível intermediário de energia.

elétron capturado para a banda de valência, o que é equivalente a transferência de um buraco da banda de valência para o nível intermediário. Finalmente, no processo (d), o nível intermediário captura um elétron da banda de valência que deixa pra trás um buraco. O que é equivalente a emissão de um buraco na banda de valência. No caso de quando o nível intermediário age como centro de recombinação, o processo de captura do elétron (a) deve ser seguido pelo processo de captura de buraco (c), e ambos estes processos devem ter aproximadamente a mesma probabilidade. Se o processo (a) é seguido pelo processo de emissão do elétron (b), então o nível intermediário estará agindo como uma armadilha para o elétron. Similarmente, quando o processo (c) é seguido imediatamente pelo processo (d), então o nível estará agindo como uma armadilha para o buraco.

## 2.2.4 Recombinação Auger

A recombinação Auger é um processo que envolve três partículas, no qual dois elétrons e um buraco ou dois buracos e um elétron são envolvidos. Este tipo de recombinação é possível envolvendo tanto a recombinação direta quanto indireta.

### 2.2.4.1 Recombinação Auger em Semicondutores de *gap* Direto

A figura 20 ilustra os processos de recombinação Auger para um semiconductor de *gap* direto com bandas de valência e de condução parabólicas. O processo de recombinação que envolve dois elétrons e um buraco é mostrado na figura 20 (a). Neste caso, o elétron 1 da banda de condução faz uma transição para um estado desocupado 1' na banda de valência. A energia do par elétron buraco é transferida para um elétron vizinho 2, que sobe

para um estado de energia mais alto  $2'$  na banda de valência. O elétron excitado perde sua energia cinética sob forma de fônons, e retorna ao fundo da banda de condução como mostra a figura 18. Pode-se observar nas transições da figura 20 (a) que a transferência de energia se dá obedecendo a conservação de energia e momento do sistema. A condição para a conservação do momento requer uma energia de ativação da ordem da energia do *gap* do semiconductor  $E_g$ . O processo de recombinação Auger envolvendo dois buracos e um elétron é mostrado na figura 20 (b). Neste caso, a energia de recombinação do elétron 1 é transferida para o buraco  $2'$  que se desloca para o estado 2 no fundo da banda de valência.

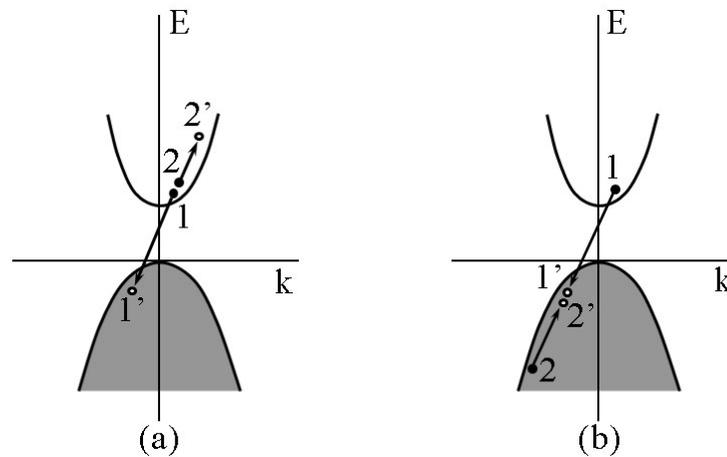


Figura 20: Representação da recombinação Auger para um semiconductor de *gap* direto envolvendo dois elétrons e um buraco (a), e dois buracos e um elétron (b).

#### 2.2.4.2 Recombinação Auger em Semicondutores de *gap* Indireto

O processo de recombinação Auger em semicondutores de *gap* indireto passa a se tornar significativa para altas concentrações de portadores, e é menos entendida comparada a recombinação Auger nos semicondutores de *gap* direto. Os dois efeitos de armadilhamento que ocorrem nestes semicondutores são mostrados na figura 21. No processo (a) o elétron aprisionado faz uma transição para a banda de valência passando sua energia para um elétron na banda de condução. Este processo passa a ser significativa somente se o semiconductor for do tipo *n* com alta concentração de dopantes e possuir um nível intermediário abaixo do nível de Fermi. O processo (b) mostra a recombinação envolvendo dois buracos e um elétron. Neste caso o elétron faz uma transição para um estado desocupado no nível intermediário e transfere sua energia para um buraco na banda de valência. Esse processo passa a ser importante em semicondutores do tipo *p* com alta concentração de dopantes e com um nível intermediário acima do nível de Fermi.

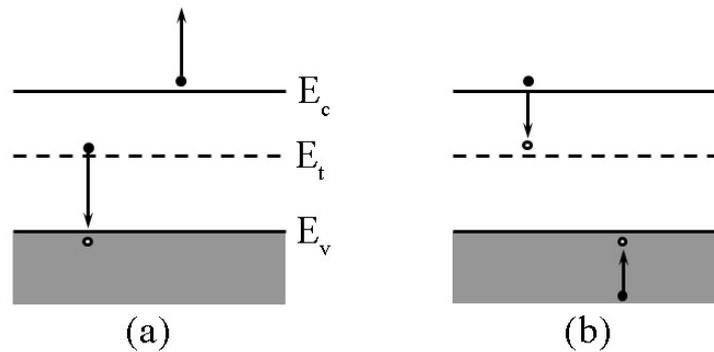


Figura 21: Representação da recombinação Auger para um semicondutor de *gap* indireto envolvendo dois elétrons e um buraco (a), e dois buracos e um elétron (b).

## 2.3 Transporte de Portadores

### 2.3.1 Corrente de Condução

Qualquer movimento de portadores em um semicondutor leva a corrente elétrica. Este movimento pode ser causado por um campo elétrico aplicado, uma vez que os portadores são partículas carregadas eletricamente. Este mecanismo de transporte de portadores sobre presença de campo elétrico é chamado de corrente de condução. Para explicar o mecanismo de corrente de condução em semicondutores é necessário utilizar a teoria clássica combinada com conceitos quânticos. Quando um campo elétrico é aplicado ao semicondutor, os portadores sofrem o efeito deste campo sobreposto ao potencial cristalino. Este efeito resulta na massa efetiva do elétron  $m^*$  já descrita anteriormente pela equação (2.12). Portanto, se existir um campo elétrico externo  $\mathcal{E}$  aplicado em um semicondutor, a aceleração dos portadores será dada por

$$a = \frac{dv}{dt} = \pm \frac{e}{m_b^*} \mathcal{E}, \quad (2.65)$$

onde o símbolo positivo está relacionado com o buraco de massa efetiva  $m_b^*$  e o negativo relacionado ao elétron de massa efetiva  $m_e^*$ .

Quando um campo elétrico é aplicado no semicondutor, elétrons e buracos possuem movimentos de deriva em sentidos opostos. Desta forma, por possuírem cargas elétricas contrárias, as intensidades das correntes de ambos se somam. Este fato é o que diferencia a teoria de transporte de semicondutores e metais. Assumindo que todos os portadores de mesma espécie possuam a mesma velocidade, a corrente elétrica em um dispositivo pode ser expressa como a carga total de portadores em um semicondutor dividida pelo tempo

gasto para que eles percorram o percurso de um eletrodo até o outro, ou seja

$$I = \frac{Q}{t_L} = \frac{Q}{L/v}, \quad (2.66)$$

onde  $t_L$  é o tempo gasto por uma partícula, para percorrer o trajeto  $L$  com uma velocidade  $v$ . Desta forma, pode-se escrever a densidade de corrente  $J$  em função da densidade de cargas  $\rho$ , da forma

$$J = \frac{Q}{AL} = \rho v = qnv. \quad (2.67)$$

Portanto, se os portadores foram carregados negativamente como os elétrons, tem-se

$$J_n = -en_0v, \quad (2.68)$$

e se forem carregados positivamente como os buracos, tem-se

$$J_p = +ep_0v. \quad (2.69)$$

Deve-se levar em consideração que elétrons e buracos não percorrem uma trajetória retilínea na direção do campo elétrico aplicado. Ao invés disso, eles estão submetidos a movimentos aleatórios. Isto ocorre devido ao espalhamento ou colisões que o elétron sofre com os íons ou átomos da rede cristalina. Este efeito é causado devido as vibrações dos íons ou átomos devido à agitação térmica em  $T \neq 0$ . Este comportamento ocorre mesmo quando nenhum campo elétrico é aplicado. Neste caso, a velocidade média do elétron é nula devido a esta natureza do movimento aleatório dos elétrons. Por outro lado, na presença de um campo elétrico, os elétrons possuem uma velocidade média resultante na direção do campo elétrico. O movimento de um elétron em um semicondutor na presença e na ausência do campo elétrico pode ser visualizado na figura 22.

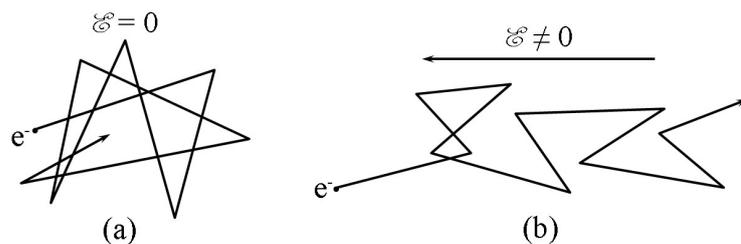


Figura 22: Ilustração do movimento aleatório de um elétron em um semicondutor na ausência (a), e na presença (b) de um campo elétrico aplicado.

A partir de agora, o movimento dos portadores será analisado considerando somente a velocidade média das partículas  $\langle v \rangle$ . Desta forma, a segunda lei de Newton pode ser escrita da forma

$$F = ma = m \frac{d \langle v \rangle}{dt}. \quad (2.70)$$

Esta força consiste na diferença entre a força eletrostática e a força de colisão que a partícula sente devido aos átomos da rede cristalina. Esta força de colisão é devido a variação de momento da partícula no tempo de colisão da mesma, e ela pode ser escrita como o momento dividido pelo tempo médio  $\tau_c$  entre colisões, portanto

$$F = \mp e\mathcal{E} \pm \frac{m \langle v \rangle}{\tau_c}, \quad (2.71)$$

onde o sinal superior se refere ao elétron e o inferior ao buraco. Combinando as equações (2.70) e (2.71) obtêm-se uma expressão para a velocidade média da partícula

$$\pm e\mathcal{E} = m \frac{d \langle v \rangle}{dt} \pm \frac{m \langle v \rangle}{\tau_c}. \quad (2.72)$$

Considera-se agora que a partícula já tenha atingido sua velocidade constante. Portanto, pode-se dizer que a velocidade é proporcional ao campo elétrico aplicado, desta forma a mobilidade dos portadores pode ser definida pela razão entre a velocidade de deriva e o campo elétrico, ou seja

$$\mu = \frac{v}{\mathcal{E}} = \frac{e\tau_c}{m}. \quad (2.73)$$

Portanto, a mobilidade de uma partícula no semiconductor vai ser maior quanto menor for a sua massa e quanto maior for o tempo de colisão sofrido por ela. Desta forma, a corrente de condução descrita pelas equações (2.68) e (2.69), podem ser reescritas em função de suas mobilidades, como

$$J_n = en_0\mu_n\mathcal{E} \quad (2.74)$$

para elétrons, e

$$J_p = ep_0\mu_p\mathcal{E} \quad (2.75)$$

para buracos. No decorrer desta demonstração, utiliza-se a massa da partícula livre  $m$ . Entretanto como já foi dito anteriormente, deve-se levar em consideração os efeitos incorporados devido ao potencial periódico dos átomos da rede cristalina. Desta forma é necessário utilizar o conceito de massa efetiva  $m^*$ . Portanto, a equação da mobilidade (2.73) pode ser reescrita da forma

$$\mu_{p,n} = \frac{e\tau_c}{m_{p,n}^*} \quad (2.76)$$

onde os subscritos  $p$  e  $n$  referem-se aos buracos e elétrons respectivamente.

### 2.3.2 Difusão de Portadores

Os processos de difusão são muito comuns na natureza. É através deste processo que um pequeno grão de sal, quando imerso em um recipiente com água, se dissocia e espalha deixando a água com uma concentração uniforme de íons após um certo período de tempo. A difusão dos íons do sal resulta do seu movimento aleatório de agitação térmica. Neste movimento, cada molécula de água e íons do sal movimentam-se aleatoriamente como na figura 22 (a), se chocando arbitrariamente umas com as outras. Após o choque as partículas se movem em outra direção, resultando numa série de movimentos aleatórios. Desta forma, após um certo tempo, os íons de sal que antes estavam concentrados numa certa região, se encontram completamente espalhado na água. Esta idéia é análoga para os portadores de cargas nos semicondutores, devido a natureza dos movimentos aleatórios. Se for utilizada uma fonte bem localizada de geração de portadores, estes irão se difundir nas três dimensões da rede cristalina, partindo da região de maior concentração para regiões de menores concentrações de portadores.

Para se obter a equação que descreve o processo de difusão de portadores nos semicondutores, considera-se um modelo onde buracos só se movimentam em uma direção. Descreve-se a concentração de buracos por  $p(x)$ , a distância média percorrida pelo buraco entre duas colisões de  $\bar{l}$ , e o tempo médio percorrido pelo buraco entre duas colisões de  $\tau_c$ . Para melhor compreensão, consideram-se dois planos paralelos e perpendiculares ao eixo  $x$ , com coordenadas  $x$  e  $x + \Delta x$ , onde  $\Delta x = \bar{l}$ , como mostra a figura 23.

Como o movimento dos portadores é completamente aleatório, pode-se dizer que os buracos que estão entre os planos  $x$  e  $x + \Delta x$ , possuem a mesma probabilidade de irem para a direção  $x$  ou  $-x$ . Portanto, se a concentração de buracos for a mesma ao longo do eixo  $x$ , o número médio de buracos que atravessam os planos serão iguais em ambos

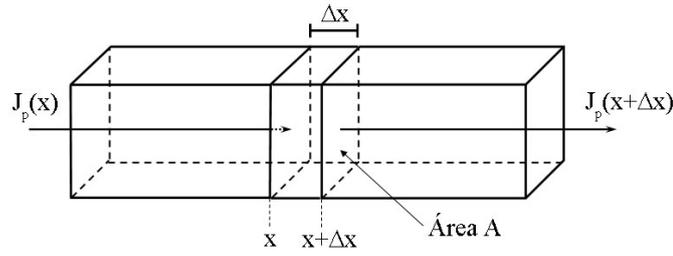


Figura 23: Esquema unidimensional da corrente de buracos que entra e sai de uma certa região de um semicondutor.

os sentidos, não havendo desta forma corrente líquida. Por outro lado, se houver um gradiente de concentração de buracos ao longo do eixo  $x$ , a corrente líquida no eixo  $x$  não será nula. Neste caso, a corrente será proporcional a concentração de buracos à esquerda e à direita de  $x$ . Como metade dos buracos que estão entre os planos  $x - \Delta x$  e  $x$ , cruzam o plano  $x$  no sentido positivo, durante um intervalo de tempo  $\tau_c$ , a corrente gerada por estes buracos numa seção reta de área  $A$  é aproximadamente

$$\frac{1}{2}ep\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right)\bar{l}A\frac{1}{\tau_c}, \quad (2.77)$$

onde a carga total corresponde a carga do buraco  $e$ , vezes o número de buracos na região  $p\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right)$ . Desta forma, para se obter a densidade de corrente devido aos buracos no plano  $x$ , é necessário subtrair da equação (2.77) a contribuição dos buracos que estão entre  $x$  e  $x + \Delta x$  e que cruzam o plano  $x$  no sentido negativo, e dividir pela área  $A$ . Deste modo obtêm-se

$$\frac{1}{2\tau_c}\bar{l}e \left[ p\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right) - p\left(x + \frac{\Delta x}{2}\right) \right]. \quad (2.78)$$

Suponha que a variação da concentração de buracos  $p(x)$  ao longo do eixo  $x$ , ocorra em distâncias muito maiores que  $\Delta x = \bar{l}$ . Desta forma, pode-se considerar que  $\Delta x$  é muito pequeno, de forma que a expressão entre colchetes pode ser comparada com a equação que define a derivada (2.79)

$$\frac{df(x)}{dx} = \lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a}. \quad (2.79)$$

Deste modo, a equação (2.78) pode ser reescrita como

$$J_p^{dif} = -eD_p \frac{dp(x)}{dx}, \quad (2.80)$$

onde  $D_p = \bar{l}^2/2\tau$  é o coeficiente de difusão dos buracos. De maneira análoga, a corrente de difusão para os elétrons pode ser escrita como

$$J_n^{dif} = +eD_n \frac{dn(x)}{dx}, \quad (2.81)$$

sendo  $D_n$  o coeficiente de difusão e  $n(x)$  a concentração de elétrons. Estas equações de densidade de corrente de difusão de elétrons e buracos mostram que a corrente de difusão será nula se não houver uma variação espacial da concentração de portadores. Estas equações até então foram deduzidas através de uma simplificação da difusão de portadores em uma dimensão. Porém, sabe-se que este processo ocorre nas três dimensões  $x$ ,  $y$  e  $z$ . Portanto, pode-se reescrever as equações (2.80) e (2.81), envolvendo o operador gradiente, da forma

$$\vec{J}_p^{dif} = -eD_p \nabla_p \quad (2.82)$$

$$\vec{J}_n^{dif} = +eD_n \nabla_n. \quad (2.83)$$

As equações (2.82) e (2.83) permitem calcular a densidade de corrente para elétrons e buracos uma vez conhecendo a variação de suas concentrações. Entretanto, na maioria dos casos, a variação da concentração dos portadores não é conhecida, precisando ser calculadas. Desta forma, é necessário obter uma outra relação para o cálculo da densidade de corrente de difusão que seja independente da concentração. Para isso, considera-se o caso unidimensional mostrado na figura 23. Neste caso, suponha-se que os processos de geração e recombinação de pares elétrons-buraco não sejam considerados. Desta forma, pode-se escrever que a corrente elétrica total  $I$  que entra no volume mostrado na figura 23, dividida pelo volume, é igual a diferença entre as densidades de corrente em  $x$  e  $x + \Delta x$ , dividida por  $\Delta x$ , ou seja

$$\frac{I}{A\Delta x} = \frac{J(x) - J(x + \Delta x)}{\Delta x}. \quad (2.84)$$

Ao considerar o limite de  $\Delta x \rightarrow 0$ , pode-se utilizar a equação (2.79). Levando em consideração que  $I = dq/dt$ , a equação (2.84) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial J(x)}{\partial x}, \quad (2.85)$$

onde  $\rho = q/(A\Delta x)$  é a densidade volumétrica de carga. Pode-se também fazer a generalização da equação (2.85) para três dimensões

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left( \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} \right),$$

ou reescreve-la da forma

$$\nabla \cdot \vec{J} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (2.86)$$

Esta é a equação da continuidade de carga em três dimensões, que se baseia no fato de que a carga total é conservada. Sabe-se que a densidade de cargas  $\rho$ , está relacionada com as concentrações de elétrons e buracos da forma

$$\rho = e(p - n). \quad (2.87)$$

Considera-se, para efeito de simplificação, as cargas de elétrons e buracos separadamente. Desta forma, das equações (2.86) e (2.87) obtêm-se

$$\nabla \cdot \vec{J}_n = e \frac{\partial n}{\partial t} \quad (2.88)$$

para elétrons, e

$$\nabla \cdot \vec{J}_p = -e \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2.89)$$

para buracos. Agora, substituindo a equação (2.88) em (2.83), obtêm-se

$$D_n \nabla^2 n - \frac{\partial n}{\partial t} = 0. \quad (2.90)$$

Esta é a equação da difusão que permite calcular a evolução espacial e temporal da concentração de elétrons em excesso. De maneira análoga, substituindo a equação (2.89) em (2.82) obtêm-se a equação de difusão para os buracos. A equação (2.90) é geral e válida para todos os tipos de processos difusivos existentes na natureza, como por exemplo a difusão de um grão de sal em um recipiente com água. Ela diz que enquanto houver variação espacial da concentração, também haverá variação temporal. A solução da equação (2.90) pode ser escrita da forma [17]

$$n(x, t) = \frac{\Delta N_0}{2\sqrt{\pi D_n t}} e^{-x^2/4D_n t}. \quad (2.91)$$

Esta solução é uma função gaussiana, que se alarga gradualmente com o tempo, como mostra a figura 24.

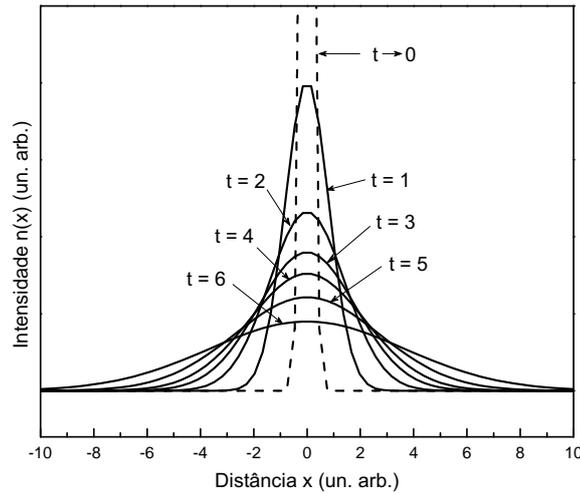


Figura 24: Representação gráfica da difusão de elétrons gerados por um pulso em  $x = 0$  no instante  $t \rightarrow 0$  (linha pontilhada).

Se um campo elétrico  $\vec{\mathcal{E}}$  for aplicado ao semiconductor que possui um gradiente de concentração de portadores, as densidades de correntes de elétrons e de buracos terão componentes de condução e de difusão, da forma

$$\vec{J}_n = en\mu_n\vec{\mathcal{E}} + eD_n\nabla n \quad (2.92)$$

$$\vec{J}_p = ep\mu_p\vec{\mathcal{E}} - eD_p\nabla p. \quad (2.93)$$

Desta forma, a corrente total será

$$\vec{J} = \vec{J}_n + \vec{J}_p. \quad (2.94)$$

Quando o semiconductor está em equilíbrio térmico e em condições onde não haja um gradiente de portadores e campo elétrico, a corrente de elétrons e de buracos deve ser nula,  $\vec{J}_n = \vec{J}_p = 0$ . Desta forma, como o campo elétrico é o gradiente do potencial  $\vec{\mathcal{E}} = -\nabla\phi$ ,

substituindo esta equação em (2.93) e fazendo  $\vec{J}_p = 0$ , obtêm-se

$$\frac{\mu_p}{D_p} \nabla \phi = -\frac{1}{p_0} \nabla p_0, \quad (2.95)$$

onde  $p_0$  é a concentração de equilíbrio de buracos. Fazendo a substituição de  $p_0$  dada por (2.54) em (2.95) obtêm-se

$$\frac{\mu_p}{D_p} \nabla \phi = -\frac{1}{k_B T} \nabla (E_i - E_F). \quad (2.96)$$

Ao considerar um caso onde o sistema se encontra em equilíbrio, o nível de Fermi não pode variar com a posição, portanto  $\nabla E_F = 0$ . Por outro lado, pode-se dizer que a energia de um elétron num potencial elétrico  $\phi$  é dado por  $E = -e\phi$ . Desta maneira, se o potencial elétrico variar no espaço, os níveis e as bandas de energia do elétron também irão variar, i.e.  $\nabla E_i = -e\nabla\phi$ . Aplicando esta relação na equação (2.96), obtêm-se

$$\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{k_B T}{e}. \quad (2.97)$$

Observa-se que ao aplicar esta mesma analogia para achar esta relação para os elétrons, obtêm-se o mesmo resultado, portanto pode-se escrever

$$\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{D_n}{\mu_n} = \frac{k_B T}{e} \quad (2.98)$$

Este resultado é conhecido como relação de Einstein. Ela relaciona as constantes de difusividade e mobilidade que caracteriza o transporte de portadores por difusão e por condução nos semicondutores.

### 2.3.3 Equação da Continuidade

A equação da continuidade descreve o comportamento temporal dos portadores nos semicondutores. Portanto, ela diz que a mudança temporal na densidade de portadores em um semiconductor ocorre devido a diferença entre o fluxo que entra e sai, mais a taxa de geração e menos a taxa de recombinação de portadores em uma determinada região. O fluxo de portadores e as taxas de geração e recombinação estão ilustrados na figura 25. Podem-se considerar agora todos os efeitos de mobilidade dos portadores já estudados, são eles: corrente de condução, difusão, geração e recombinação.

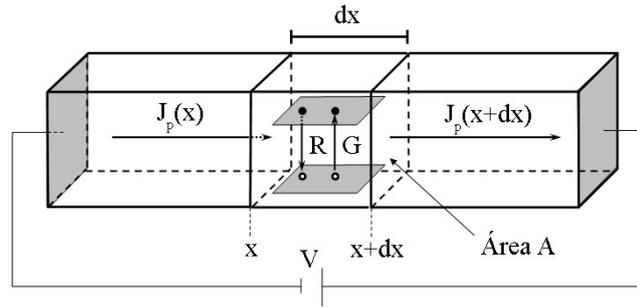


Figura 25: Representação do fluxo de corrente e processos de geração e recombinação em um pedaço infinitesimal de espessura  $dx$  de um semicondutor.

Foi visto na seção 2.3.2 a dedução da equação da continuidade (2.86), que é válida para elétrons e buracos. Também foi obtida a expressão final da equação da continuidade para elétrons (2.88) e buracos (2.89). Estas equações portanto não levam em consideração os processos de geração e recombinação de portadores. Portanto, pode-se acrescentar às equações (2.88) e (2.89), as taxas de recombinação e geração térmica e luminosa correspondentes aos elétrons e buracos para se obter

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{J}_n + G_t + G_l - R \quad (2.99)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \nabla \cdot \vec{J}_p + G_t + G_l - R_p. \quad (2.100)$$

É possível agora substituir as expressões das densidades de corrente totais para elétrons (2.92) e buracos (2.93) e a expressão do processo de recombinação (2.63) nas equações (2.99) e (2.100). Para o caso tridimensional, e sob a condição de que a taxa de geração de portadores seja menor que a concentração majoritária de portadores, as equações da continuidade para os portadores minoritários (i.e.,  $n_p$  para os semicondutores do tipo  $p$  ou  $p_n$  para semicondutores do tipo  $n$ ) são

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = \mu_n n_p \nabla \cdot \vec{\mathcal{E}} + \mu_n \vec{\mathcal{E}} \cdot \nabla n_p + G_l - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} \quad (2.101)$$

$$\frac{\partial p_n}{\partial t} = -\mu_p p_n \nabla \cdot \vec{\mathcal{E}} - \mu_p \vec{\mathcal{E}} \cdot \nabla p_n + G_l - \frac{p_n - p_{n0}}{\tau_p}. \quad (2.102)$$

Neste caso o campo elétrico  $\vec{\mathcal{E}}$  consiste na soma do campo elétrico externo aplicado e do campo elétrico interno gerado pela diferença de concentração entre elétrons e buracos.

## 2.4 Dispositivos Semicondutores

Dispositivos semicondutores são componentes eletrônicos ou optoeletrônicos que exploram as propriedades dos semicondutores. Um dos mais importantes e conhecidos dispositivos semicondutores são os diodos, que são fabricados pela junção de semicondutores do tipo  $n$  e do tipo  $p$ . A característica mais importante de uma junção  $p-n$  é da retenção da corrente elétrica em uma determinada direção do dispositivo. Além disso, a junção  $p-n$  é a estrutura básica para a formação das células solares, fotodiodos, diodos emissores de luz e também laser de diodo. Eles também constituem uma parte fundamental dos circuitos integrados (CIs) e dos transistores.

### 2.4.1 A Junção $p-n$

O diodo  $p-n$  corresponde a junção de dois semicondutores de dopagens opostas como mostrado na figura 26 (b). A região da esquerda é do tipo  $p$  e possui uma concentração  $N_a$  de dopantes aceitadores, enquanto que a região da direita é do tipo  $n$  e possui uma concentração  $N_d$  de doadores. Em uma junção real, as concentrações  $N_a$  e  $N_d$  variam gradualmente na região de fronteira, como mostrado pela linha tracejada na figura 26 (a). Entretanto, para efeito de simplificação suponha-se que a transição entre as duas regiões seja abrupta.

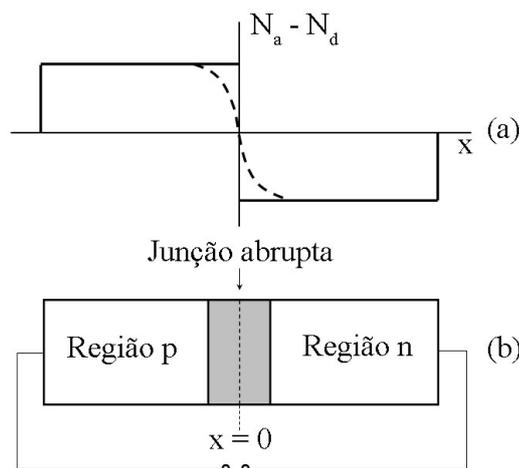


Figura 26: (a) Variação da concentração de cargas em uma junção  $p-n$ . (b) Corte transversal de uma junção  $p-n$  unidimensional.

Para melhor compreensão dos processos físicos que ocorrem em uma junção em equilíbrio, suponha-se a princípio que os semicondutores do tipo  $p$  e  $n$  estão separados. Deste modo o nível de Fermi de ambos os lados estão deslocados, como ilustrado na figura 27

(a). Suponha-se que os dois lados sejam agora unidos para que a junção se forme. Como existe uma diferença de concentração de cargas na junção, haverá então uma difusão de elétrons do semiconductor do tipo  $n$  para o do tipo  $p$ . Do mesmo modo, haverá difusão de buracos do semiconductor do tipo  $p$  para o do tipo  $n$ . Esta difusão de portados faz com que surja duas regiões de cargas opostas na fronteira, como é ilustrado no topo da figura 27 (b). Estas regiões criam um campo elétrico  $\vec{\mathcal{E}}$  orientado do lado  $n$  para o lado  $p$ , que se opõem a continuação do movimento de cargas causado pela difusão. O campo elétrico gerado  $\vec{\mathcal{E}}$  manda os buracos de volta ao lado  $p$  e os elétrons de volta ao lado  $n$ , através da corrente de condução que é contrária a corrente de difusão. Em um dado instante as correntes de condução e difusão passam a ser iguais. Desta forma a junção atinge o regime de equilíbrio, fazendo com que a distribuição de cargas e o campo elétrico adquirem uma configuração de equilíbrio.

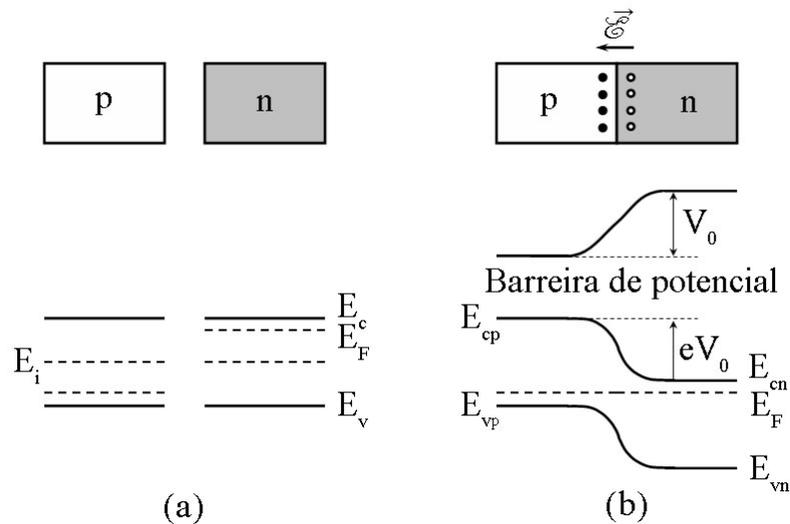


Figura 27: (a) Semicondutores do tipo  $p$  e  $n$  separados. (b) Representação da carga, campo, potencial elétrico e níveis de energia em uma junção  $p$ - $n$ .

A região onde foi formado o campo elétrico  $\vec{\mathcal{E}}$  da junção é chamada de região de depleção. Este campo elétrico corresponde a uma diferença de potencial  $V_0$  entre o lado  $n$  e o lado  $p$ . Esta diferença de potencial na junção possui uma característica de barreira, e por isso ela é chamada de barreira de potencial. A formação da barreira de potencial implica num comportamento importante dos níveis de energia da junção. Sabe-se que a energia do elétron está relacionada com o potencial eletrostático  $\phi$  por  $E = -e\phi$ . Desta forma, a diferença entre as energias das bandas de condução do lado  $p$  e do lado  $n$  é

$$E_{cp} - E_{cn} = -e(\phi_p - \phi_n) = eV_0 \quad (2.103)$$

Portanto, a diferença das energias em unidades de  $eVolt$ , corresponde ao valor do potencial da barreira. Isto implica que quando a junção  $p-n$  é formada, a diferença de energia das bandas de condução e valência entre semicondutores do tipo  $p$  e  $n$  será igual à diferença de potencial produzida na junção. Esta alteração dos níveis de energia deve-se ao fato de que o nível de Fermi  $E_F$  deve ser o mesmo para ambos os lados da junção, como mostra a figura 27 (b). Também é possível observar pela figura que como o menor valor possível de  $E_F$  no lado  $p$  é  $E_{vp}$ , e o maior valor no lado  $n$  é  $E_{cn}$ , o valor limite da barreira de potencial será  $V_0 = E_g/e$ . O potencial se aproxima deste valor para semicondutores altamente dopados.

Considera-se agora uma junção  $p-n$  submetida a uma diferença de potencial  $V_a$  de um circuito externo. A aplicação de uma voltagem positiva no lado  $n$  e uma voltagem negativa no lado  $p$  de uma junção, é chamado de tensão direta. Neste caso, a tensão direta diminui a barreira de potencial que passa a ter um valor  $V_0 - V_a$ , como mostrado na figura 28 (b). Por outro lado, a aplicação de uma voltagem negativa no lado  $n$  e uma voltagem positiva no lado  $p$  de uma junção, é chamado de tensão reversa. Deste modo, a tensão reversa aumenta a barreira de potencial que passa a ter um valor de  $V_0 + V_a$ , como mostra a figura 28 (c). O resultado mostra que a corrente que atravessa a junção é maior quando a tensão é aplicada no sentido direto do que no sentido reverso. É esta propriedade que faz com que as junções  $p-n$  sejam amplamente utilizadas como base de operação dos diodos e dos transistores de junção.

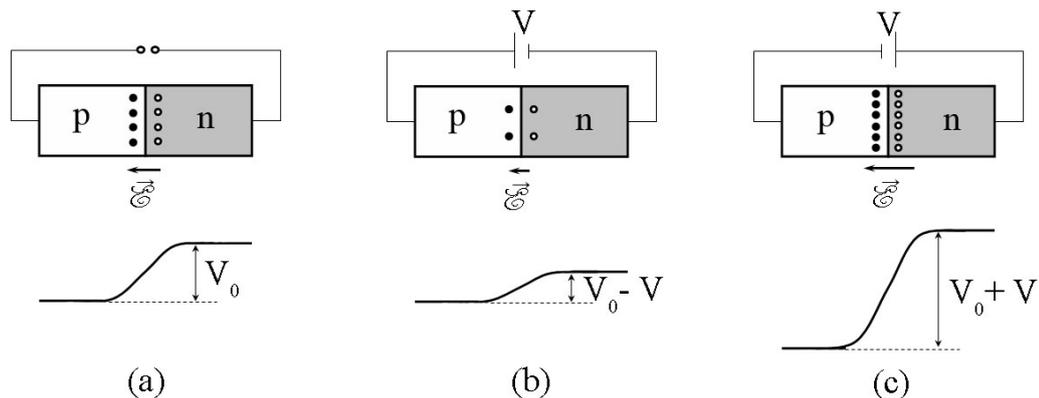


Figura 28: Efeito de uma tensão externa aplicada a uma junção  $p-n$ : (a) situação em equilíbrio, (b) polarização direta, (c) polarização reversa.

## 2.4.2 Heterojunções

Uma junção formada por dois materiais diferentes é chamada de heterojunção. Quando dois semicondutores diferentes são colocados lado a lado para se formar uma junção, observa-se uma descontinuidade nas energias, como mostra a figura 29 (b). Desta forma, para conseguir descrever o comportamento dos diferentes materiais em uma junção é necessário levar em consideração a função trabalho  $W_0$  de cada um. A função trabalho é definida como a energia necessária para “arrancar” um elétron de um material, ou  $W_0 = E_0 - E_F$ , onde  $E_0$  é a energia do elétron no vácuo, i.e. longe do material, como mostra a figura 29 (a). Entretanto, como nos semicondutores existem elétrons na banda de condução que está acima do nível de Fermi, a energia mínima necessária para remover um elétron não é  $W_0 = E_0 - E_F = e\phi_s$  e sim  $W_0 = E_0 - E_c = e\chi$ , onde  $e\chi$  é chamado de afinidade eletrônica.

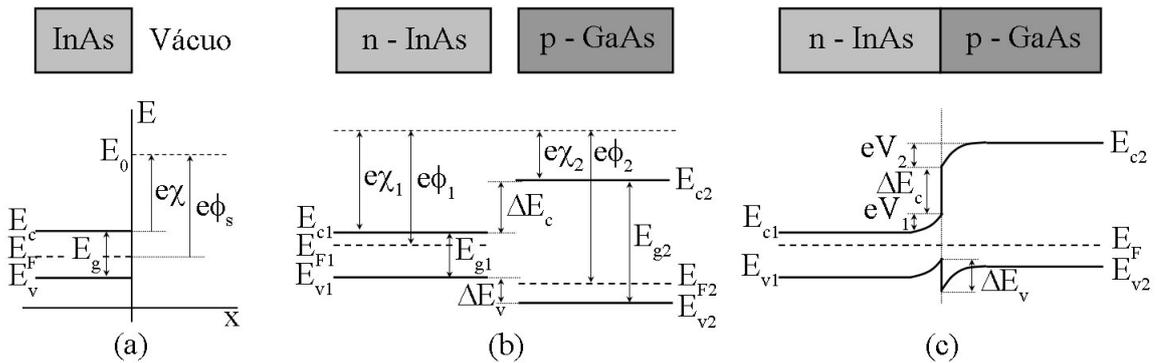


Figura 29: Diagramas de energia (a) de um semiconductor com sua função trabalho, (b) dos semicondutores n-InAs e p-GaAs separados, (c) de uma heterojunção de n-InAs e p-GaAs em equilíbrio.

Numa heterojunção de semicondutores, uma descontinuidade da energia é resultante dos diferentes *gaps* de energia nos dois lados. Uma heterojunção com grande aplicação tecnológica é a formada pelos semicondutores GaAs e InAs, devido a ampla diferença nos seus *gaps* de energia.

A figura 29 (b) mostra os diagramas de energia do InAs do tipo *n* ao lado do GaAs do tipo *p* antes da junção ser estabelecida. Neste caso, cada material é caracterizado por uma função trabalho e uma afinidade eletrônica diferente, referidas ao nível do vácuo. Quando os dois semicondutores são colocados em contato para formar a junção, ocorre uma transferência de cargas de um lado para o outro de modo a igualar os dois níveis de Fermi, do mesmo modo que ocorre numa junção *p-n*. O sentido da transferência de cargas depende então dos valores relativos das funções trabalho. Entretanto, como os valores de

$E_g$  são diferentes, surgem descontinuidades  $\Delta E_c$  na banda de condução e  $\Delta E_v$  na banda de valência, como ilustrado na figura 29 (c). Analisando o diagrama de energia, verifica-se que

$$\Delta E_c = e(\chi_1 - \chi_2) \quad (2.104)$$

$$\Delta E_v = E_{g2} - E_{g1} - \Delta E_c. \quad (2.105)$$

É importante observar que as descontinuidades são as mesmas para os semicondutores separados e em contato, uma vez que elas só dependem das afinidades eletrônicas e dos *gaps* dos semicondutores. Entretanto, é necessário levar em consideração a formação das camadas de cargas na fronteira da junção, que criam uma barreira de potencial  $V_0$ . Desta maneira, a diferença entre os níveis  $E_{c1}$  e  $E_{c2}$  menos a descontinuidade  $\Delta E_c$  equivale a barreira de potencial  $V_0$  criada, ou

$$V_0 = V_1 + V_2, \quad (2.106)$$

onde  $V_1$  e  $V_2$ , estão mostrados na figura 29 (c).

A diferença dos *gaps* de energia dos semicondutores em uma heterojunção possibilita a criação de uma infinidade de formas para os potenciais. Este fato possibilita o desenvolvimento do estudo das propriedades quânticas de partículas confinadas nestes potenciais permitindo utilização destes conhecimentos para aplicações em dispositivos ópticos e eletrônicos.

### 2.4.3 Fotodiodos *p-i-n*

Fotodiodos são dispositivos que funcionam como detectores de radiação. O fotodiodo mais comum é basicamente uma junção *p-n* operando sob tensão reversa. Quando a radiação incide sobre o fotodiodo, pares elétrons-buraco são gerados na região de depleção que age de forma a separar os elétrons e buracos. Deste modo os elétrons e buracos são capturados nos contatos elétricos originando assim uma corrente elétrica no circuito externo, como mostra a figura 30 (a).

O fotodiodo *p-i-n* é conhecido por ter uma camada de semiconductor intrínseco entre as regiões *p* e *n* da junção *p-n*, como ilustrado na figura 30 (b). Esta camada de

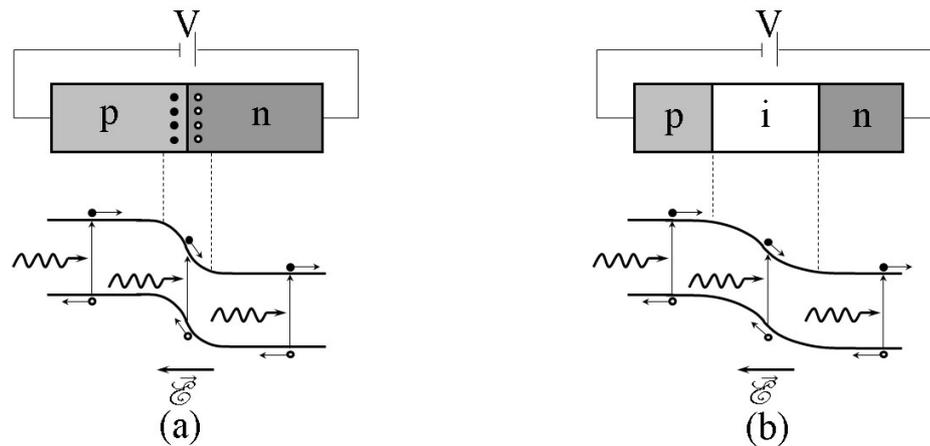


Figura 30: Ilustração do processo de criação de pares elétrons-buraco na região de depleção para um fotodiodo (a)  $p-n$  e (b)  $p-i-n$  seguida da separação das cargas que seguem em direção aos contatos elétricos.

semicondutor intrínseca faz com que a região de depleção se estenda por toda a região intrínseca. Em outras palavras, a região em que os pares elétrons-buraco são separados de forma a se transformarem em corrente aumenta. Portanto, os fotodiodos  $p-i-n$  são muito mais eficientes do que os mais comuns  $p-n$ , e por isso eles são amplamente utilizados em aplicações tecnológicas.

## 2.5 Pontos Quânticos

Um dos maiores avanços nas mais diferentes áreas da tecnologia resulta da revolução da física dos semicondutores, que ocorreu nos últimos trinta anos. O desenvolvimento das heteroestruturas de baixa dimensionalidade, que proporcionam um confinamento artificial dos elétrons e buracos em até três dimensões espaciais, contribuiu efetivamente neste processo de desenvolvimento tecnológico [18, 19]. As heteroestruturas mais simples conhecidas são os poços quânticos, formados pelo crescimento de uma fina camada (10-100 Å) de um determinado semicondutor entre duas outras camadas de semicondutores de *gap* maior. Devido ao perfil do potencial resultante nesta heteroestrutura, o movimento dos portadores nesta fina camada semicondutora possui uma restrição na direção de crescimento (perpendicular ao plano do poço quântico). Este confinamento gerado pelo poço quântico proporciona uma discretização dos níveis de energia na direção de confinamento. Entretanto, os portadores possuem movimento essencialmente livre nas duas direções que compõem o plano do poço quântico e, portanto, este sistema é denominado bi-dimensional.

O confinamento quântico dos portadores proporciona propriedades ópticas e elétricas muito interessantes para os sistemas de baixa dimensionalidade. A figura 12 ilustra a densidade de estados para os sistemas de diferentes dimensionalidades. Em um poço quântico, a energia e o momento dos portadores são quantizados na direção de crescimento, resultando degraus bem definidos na densidade de estados. Um fio quântico proporciona confinamento em duas dimensões, deixando os portadores se locomoverem em apenas na dimensão ao longo do fio. Este confinamento em duas dimensões resulta em uma densidade de estados proporcional a  $E^{-1/2}$ . Por último, temos os pontos quânticos, que proporcionam aos portadores uma restrição no movimento em todas as três dimensões espaciais. Isto resulta na completa discretização dos estados de energia. Esta discretização completa é caracterizada pelo fato de que a densidade de estados deste sistema é descrito por uma série de funções delta de Dirac (equação 2.30), semelhante à densidade de estados de um átomo. Estas propriedades básicas dos pontos quânticos têm estimulado um grande interesse devido à possibilidade de aplicação nos mais modernos dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos, tais como: lasers, detectores no infravermelho, dispositivos de memória e transistores de um único fóton [2, 3, 4].

### 2.5.1 Pontos Quânticos Auto Organizados

A maneira mais simples de fabricar pontos quânticos é através de cortes laterais de uma estrutura bi-dimensional, tal como o poço quântico. Este processo pode ser realizado através da técnica de litografia seguida por um banho químico [20]. Este método permite a obtenção de pequenas estruturas, resultando na formação de pontos quânticos. Entretanto, a menor dimensão lateral alcançada por este tipo de estrutura é da ordem de 100 nm, o que é bem maior em comparação com as dimensões da altura do poço quântico ( $< 10$  nm). Estes grandes valores do tamanho da estrutura proporcionam um pequeno confinamento quântico lateral dos elétrons e buracos. E além do mais, o banho químico realizado durante o processo do recorte por litografia corrói de maneira não homogênea as laterais dos pontos quânticos, produzindo desta forma níveis de energia devido aos defeitos da estrutura. Estes níveis agem como centros de recombinação não-radioativo, causando assim uma redução muito grande na eficiência quântica destas heteroestruturas.

Devido às inconveniências descritas para os pontos quânticos obtidos através da técnica de litografia, outros tipos de métodos alternativos na fabricação dos pontos quânticos vêm sido exploradas. Uma forma atrativa de fabricação de pontos quânticos é através do crescimento espontâneo de estruturas nanométricas formadas durante o crescimento

de uma determinada heteroestrutura. Este crescimento espontâneo das nanoestruturas ocorre devido à diferença dos parâmetros de rede dos materiais utilizados durante o processo de crescimento das camadas. Estas pequenas estruturas que surgem são chamadas de pontos quânticos auto-organizados, e podem ser crescidas através de diferentes tipos de técnicas, tais como: epitaxia por feixe molecular (**MBE** - *Molecular Beam Epitaxy*) e deposição química de vapor (**CVD** - *Chemical Vapour Deposition*). Este método que prevê o crescimento auto-organizado de pontos quânticos devido à diferença dos parâmetros de rede dos materiais é conhecido como Stranski-Krastanow e será melhor explicado no capítulo 3 na seção 3.2.

A forma e a densidade dos pontos quânticos auto-organizados dependem das condições de crescimento empregadas, tais como: a temperatura, a taxa de deposição, a composição e a orientação do substrato. Normalmente, os pontos quânticos crescidos através desta técnica possuem dimensões laterais da ordem de 10-25 nm e alturas de 3-10 nm e podem possuir formatos do tipo lente, piramidal ou lente e piramidal misturados.

Os materiais mais comuns utilizados no crescimento de pontos quânticos auto-organizados através do método de Stranski-Krastanow são o InAs e o GaAs. Estes binários semicondutores possuem parâmetros de rede iguais a 6,0583 e 5,65325 Å respectivamente, resultando em uma diferença de  $\sim 7\%$ . Os primeiros pontos quânticos auto-organizados crescidos com sucesso foram demonstrados por Goldstein e co-autores em 1985 utilizando esta combinação de binários semicondutores [21]. Devido a uma banda de fotoluminescência extremamente larga ( $\sim 100$  meV) comparada a ( $\sim 10$  meV) dos poços quânticos, este trabalho não conseguiu um reconhecimento que merecia durante muitos anos. Entretanto, no início dos anos 1990 o interesse com os pontos quânticos auto-organizados voltou a crescer incrivelmente, sendo ainda hoje um dos campos de maior tópicos de pesquisa na área de física dos semicondutores. Hoje em dia é possível obter pontos quânticos através deste método com bandas de fotoluminescência bem estreitas ( $\sim 20$  meV), e isto só foi possível através da melhoria no controle das condições de crescimento, um dos parâmetros críticos na morfologia e homogeneidade dos pontos quânticos [22]. Além do mais, o método de crescimento Stranski-Krastanow vem demonstrando ser útil para o crescimento de pontos quânticos auto-organizados em inúmeros binários e ligas semicondutoras, tais como: InP sobre GaInP/GaAs [23, 24], GaSb/InSb/AlSb sobre GaAs/InP [25, 26], GaN sobre AlGaN [27], ZnCdSe/CdSe sobre ZnSe [28, 29] e até mesmo InAs sobre Si [30].

## 3 *Procedimento Experimental*

Neste capítulo serão apresentadas as propriedades mais básicas de interação da radiação eletromagnética com a matéria, que são a absorção e fotoluminescência. Também serão explicados, sucintamente, todos os processos presentes na técnica de varredura superficial da microluminescência, que é a técnica necessária para obter as informações de difusão e transferência de energia em diversos materiais. Por fim, serão abordados os processos de fabricação das amostras utilizadas neste trabalho.

### 3.1 Propriedades Ópticas dos Semicondutores

#### 3.1.1 Absorção e Emissão de Fótons em Semicondutores

Absorção, emissão espontânea e emissão estimulada são basicamente os três tipos de interação existentes entre um fóton e um elétron num sólido. Considera-se um sistema simples de dois níveis  $E_1$  e  $E_2$  para demonstrar estes processos. A figura 31 mostra que a energia  $E_1$  corresponde ao estado fundamental e  $E_2$  ao estado excitado. Qualquer transição entre estes dois estados envolve a emissão ou absorção de um fóton de frequência  $\nu_{12}$  dada por  $h\nu = E_2 - E_1$ . À temperatura ambiente, a maioria dos átomos de um sólido estão no nível fundamental. Esta situação é perturbada quando um fóton de energia  $h\nu_{12}$  incide sobre o sólido. Quando isto acontece um átomo no estado fundamental  $E_1$  absorve o fóton e passa para o estado excitado  $E_2$ . Esta mudança nos estados de energia é conhecida como processo de absorção, ilustrado na figura 31 (a).

Após o processo de absorção o estado excitado em que o átomo permanece é instável, e após um período curto de tempo, na ausência de estímulo externo, o átomo retorna ao estado de energia fundamental liberando um fóton de energia  $h\nu_{12}$ . Este processo é chamado de emissão espontânea e é ilustrado na figura 31 (b). Quando um fóton de energia  $h\nu_{12}$  incide sobre um átomo que já esteja no estado excitado  $E_2$ , este pode ser estimulado a fazer uma transição para o estado fundamental, e liberar um fóton de energia

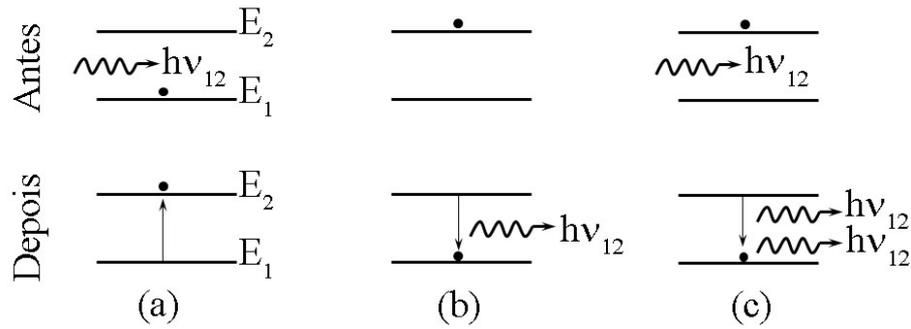


Figura 31: Ilustração dos três processos básicos de transição em um sistema de dois níveis de energia. O ponto escuro indica o estado em que o átomo está. (a) Absorção, (b) emissão espontânea, e (c) emissão estimulada.

$h\nu_{12}$ , que esteja em fase com a radiação incidente [13]. Este processo é chamado de emissão estimulada e está presente nos lasers. A radiação proveniente de uma emissão estimulada é monocromática porque todos os fótons possuem energia  $h\nu_{12}$ , e é coerente pois todos os fótons emitidos estão em fase.

Suponha-se agora que a população instantânea dos estados  $E_1$  e  $E_2$  são  $n_1$  e  $n_2$  respectivamente. Sob a condição de equilíbrio térmico e para  $(E_2 - E_1 > 3k_B T)$ , as populações obedecem a distribuição de Boltzmann

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{e^{-E_2/k_B T}}{e^{-E_1/k_B T}} = e^{-(E_2 - E_1)/k_B T} = e^{-h\nu_{12}/k_B T} \quad (3.1)$$

A equação (3.1) mostra que a população do estado excitado  $n_2$  diminui exponencialmente com o aumento da energia  $E_2$  ou com a diminuição da temperatura.

No estado de equilíbrio, a taxa de emissão estimulada (i.e. o número de transições por emissão estimulada por unidade de tempo) e a taxa de emissão espontânea têm que estar equilibrada com a taxa de absorção para que as populações  $n_1$  e  $n_2$  sejam mantidas constantes. A taxa de emissão estimulada é proporcional a densidade de energia dos fótons  $\rho(h\nu_{12})$ , que é a energia total da fonte de radiação por unidade de volume por unidade de frequência. Desta forma, a taxa de emissão estimulada pode ser escrita como  $B_{21}n_2\rho(h\nu_{12})$ , onde  $n_2$  é o número de elétrons no estado excitado e  $B_{21}$  é uma constante de proporcionalidade. A taxa de emissão espontânea é proporcional somente a população de elétrons no estado excitado  $n_2$ , e pode ser escrita como  $A_{21}n_2$ , onde  $A_{21}$  é uma constante. A taxa de absorção é proporcional a população de elétrons no estado fundamental  $n_1$  e a densidade de energia dos fótons  $\rho(h\nu_{12})$ , ela pode ser escrita como  $B_{12}n_1\rho(h\nu_{12})$ , onde  $B_{12}$  é uma constante. Desta forma, pode-se dizer que no estado de equilíbrio a taxa de

emissão estimulada mais a taxa de emissão espontânea deve ser igual a taxa de absorção, ou seja

$$B_{21}n_2\rho(h\nu_{12}) + A_{21}n_2 = B_{12}n_1\rho(h\nu_{12}). \quad (3.2)$$

Das relações escritas na equação 3.2 pode-se obter

$$\frac{\text{Taxa de emissão estimulada}}{\text{Taxa de emissão espontânea}} = \frac{B_{21}}{A_{21}}\rho(h\nu_{12}). \quad (3.3)$$

Observa-se a partir da equação (3.3) que para que a taxa de emissão estimulada seja privilegiada em relação à taxa de emissão espontânea é necessário haver uma alta densidade de energia radiativa  $\rho(h\nu_{12})$ . Para que esta alta densidade seja atingida, como no caso dos lasers, uma cavidade óptica ressonante é utilizada. Pode-se obter, também, das relações da equação (3.2) que

$$\frac{\text{Taxa de emissão estimulada}}{\text{Taxa de absorção}} = \frac{B_{21} n_2}{B_{12} n_1}. \quad (3.4)$$

Percebe-se que para que a taxa de emissão estimulada domine a relação, a população de elétrons no nível excitado deve ser muito maior que a do estado fundamental. Esta condição é conhecida como inversão de população.

Em um semicondutor de *gap* direto a energia mínima para que o processo de absorção ocorra é igual ao *gap* do semicondutor  $h\nu = E_g$  que ocorre em  $\vec{k}_f = \vec{k}_i = 0$ , como mostra a figura 32 (a). Por outro lado, fótons com energia menor que  $E_g$  atravessam o semicondutor sem que haja transição entre as bandas, a menos que exista estados de energia no meio do *gap* do material causado por impurezas ou defeitos na rede. Entretanto, fótons com energia maiores que a energia do *gap*  $h\nu > E_g$  são facilmente absorvidos porque existe um grande número de estados eletrônicos com  $k_f = k_i \neq 0$ . Neste caso um par elétron-buraco é gerado, e a energia excedente  $h\nu - E_g$  é dissipada em forma de calor, como mostra a figura 32 (a). O processo inverso ao de absorção óptica ocorre quando um elétron do fundo da banda de condução recombina com um buraco do topo da banda de valência, originando assim um fóton de energia igual ao *gap* do semicondutor  $h\nu = E_g$ .

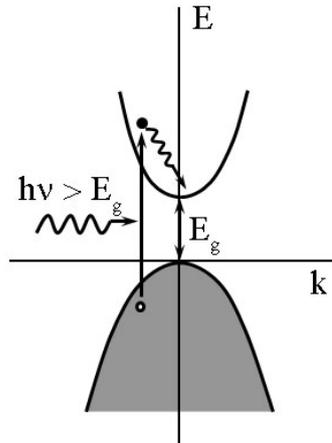


Figura 32: (a) Processo de absorção e (b) emissão de fótons em um semicondutor de *gap* direto.

### 3.1.2 Varredura Superficial da Microluminescência

A técnica de varredura superficial da microluminescência (**MSST** - *Microluminescence Surface Scan Technique*) foi desenvolvida por Monte e co-autores com o intuito de investigar as propriedades de difusão de fótons, elétrons e buracos em materiais [31]. Esta técnica é de grande importância já que os processos de difusão estão diretamente relacionados com a transferência de energia de fótons, elétrons e buracos.

A figura 33 esboça o esquema da MSST. Um laser de hélio-neônio é utilizado como fonte de excitação, de modo que seu feixe de luz passa através de duas lentes que são utilizadas para focalizar o feixe sobre um divisor de feixe. O feixe de luz passa através do divisor de feixe e segue para a objetiva que é capaz de focalizar o feixe em uma área de poucos  $\mu m^2$  a uma distância suficiente para trabalhar com a amostra dentro de uma câmara criogênica. No momento em que a radiação é focalizada na superfície do semicondutor observa-se uma luminescência naquela região, como é mostrado no detalhe da figura 33. Parte da luz incidente é refletida de volta a objetiva, junto com esta reflexão existe uma porção da luminescência do semicondutor. Juntas, a reflexão e a luminescência partem em direção ao divisor de feixes que redireciona uma parte até o mecanismo de varredura.

Este mecanismo constitui de uma fibra óptica com o núcleo de  $50\mu m$  e um motor de passo acoplado a um micro-transladador que proporciona a varredura em uma direção. Entre o divisor de feixe e a fibra óptica existe um *flip-mirror* acoplado a uma câmera CCD que permite verificar se o feixe de luz está bem focalizado na superfície da amostra. Antes de ser coletado pela fibra, a luz proveniente da amostra passa por um filtro óptico

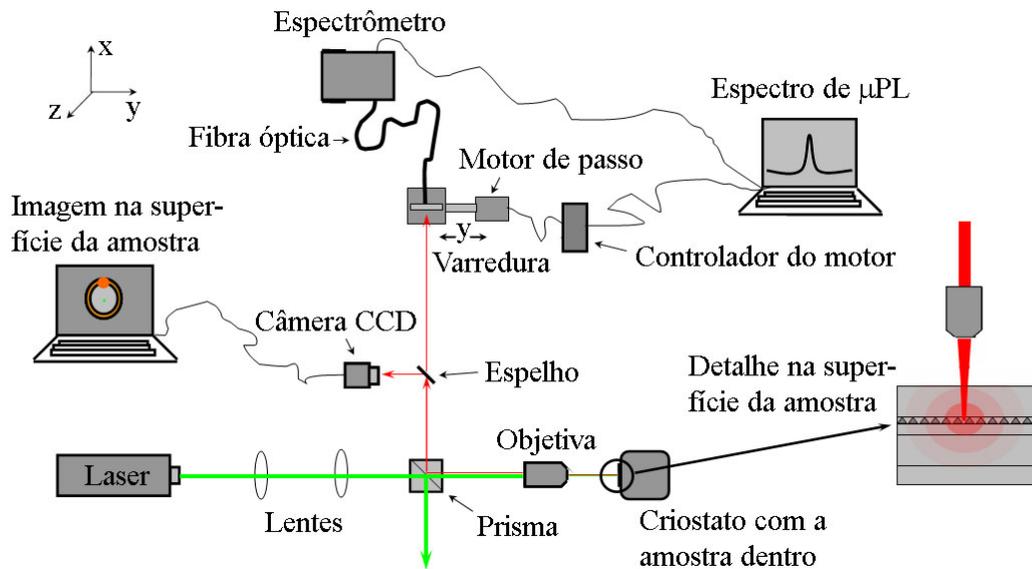


Figura 33: Ilustração esquemática da técnica de varredura superficial da luminescência.

que bloqueia somente os comprimentos de onda relacionados a fonte de excitação. Desta forma, a fibra óptica encaminha a radiação remanescente até um espectrômetro QE65000 da Ocean Optics, que é conectado a um computador. Um software específico para a aquisição de dados foi desenvolvido utilizando o programa LabView.

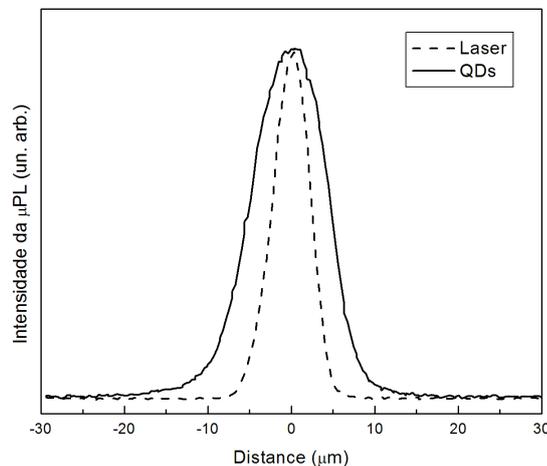


Figura 34: Varredura superficial da microluminescência em pontos quânticos de InAs (linha cheia) excitados com um feixe de laser (linha tracejada) de  $632 \text{ nm}$ .

Um exemplo típico da varredura superficial da microluminescência é mostrado na figura 34. Pode-se perceber que a região de excitação no qual o laser incide é muito mais estreita do que a luminescência do material, o que caracteriza o efeito de difusividade. Este resultado foi obtido a partir da varredura da luminescência de uma amostra de pontos quânticos de InAs sobre GaAs, sendo uma das amostras utilizadas neste trabalho cujos

resultados mais aprofundados serão descritos na próxima seção.

## 3.2 Fabricação das Amostras

### 3.2.1 Epitaxia de Feixe Molecular

O termo epitaxia é utilizado para designar os processos de crescimento de camadas semicondutoras sobre substratos cristalinos de modo que a camada a ser crescida tenha a mesma estrutura e parâmetro de rede que o substrato. Dentre os vários processos de crescimento epitaxial existentes, a epitaxia por feixe molecular é a mais sofisticada por permitir um controle de alta precisão na concentração de dopantes. Este processo utiliza o método de evaporação como fonte de íons ou moléculas para o crescimento epitaxial da camada desejada. Um equipamento de MBE consta de uma câmara de alto vácuo onde está inserido uma plataforma para a fixação do substrato e as fontes individuais que irão aquecer os elementos e impurezas que formam os cristais a serem crescidos, como ilustrado na figura 35. Cada fonte pode ser entendida como um pequeno forno elétrico com um pequeno furo na extremidade que aquece o elemento inserido até ele se fundir. Quando ele se funde, um vapor é gerado e exerce uma pressão no interior da fonte. Deste modo, um feixe atômico ou molecular é expelido para dentro da câmara em direção ao substrato. Através do controle das taxas de evaporação e do controle das obturadoras, é possível crescer camadas cristalinas com dimensões de ordem atômica [13].

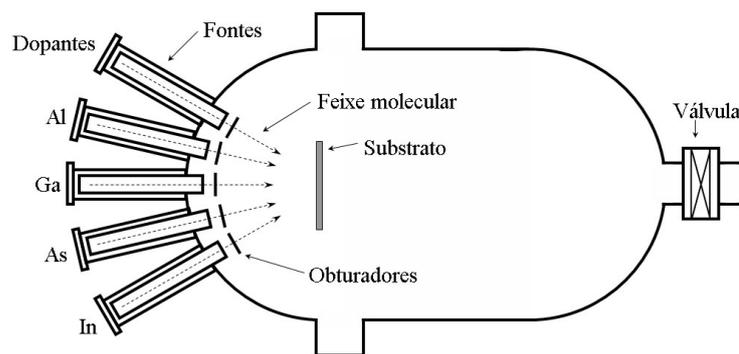


Figura 35: Ilustração do processo de epitaxia de feixe molecular utilizando fontes com elementos para a fabricação dos semicondutores GaAs,  $n - Al_xGa_{x-1}As$  e GaAs, que podem ser dopadas com impurezas de Si ou Be.

### 3.2.2 Crescimento das Amostras

Neste trabalho foram estudados três tipos diferentes de amostras, todos crescidos pela técnica de MBE pelo departamento de eletrônica e engenharia elétrica da universidade de Sheffield. Um substrato de GaAs(100) com alta concentração de impurezas do tipo-p foi utilizado para sustentar as multicamadas das amostras. Acima do substrato uma série de camadas de GaAs,  $n - Al_xGa_{x-1}As$  e InAs com ou sem dopantes foram crescidas de modo a formar uma estrutura do tipo  $p - i - n$ . Foram utilizados dopantes de Si e Be como do tipo  $n$  e  $p$  respectivamente.

Para que um cristal possa crescer adequadamente sobre outro é necessário que a estrutura e o parâmetro de rede sejam os mesmos. Portanto, é interessante observar que os parâmetros de rede do GaAs e do  $Al_xGa_{x-1}As$  são respectivamente 5,65325 e  $5,6533 + 0,0078x$  Å, e que ambos possuem a mesma estrutura de rede [32]. Um outro fator importante relacionado as ligas de  $Al_xGa_{x-1}As$ , é que a presença do  $Al$  faz aumentar significativamente a energia do *gap*. Estes fatos fazem com que a liga  $Al_xGa_{x-1}As$  possua um grande interesse tecnológico, já que podem ser facilmente crescidas sobre o GaAs para criar diferentes tipos de poços quânticos. O InAs possui uma propriedade interessante em relação ao GaAs, já que ambos possuem a mesma estrutura cristalina porém parâmetros de rede levemente diferentes, que são 6,0583 e 5,65325 Å para o InAs e GaAs respectivamente. A diferença nos parâmetros de rede causa uma tensão na ligação dos átomos depositados. Em consequência disto, pequenas porções do cristal tendem a se organizarem, de forma a minimizar a energia total do sistema [16]. Com dimensões que variam de 1 a 100 nm e geometria piramidal, estas pequenas ilhas são chamadas de pontos quânticos auto organizados. Por possuir energia de *gap* menor que o GaAs, os pontos quânticos auto organizados possuem a propriedade de confinamento tridimensional de elétrons e buracos. Este método de fabricação de pontos quânticos foi proposta por Stranski e Krastanow em 1937 e é até hoje um dos métodos mais utilizados [33].

Os pontos quânticos foram crescidos através da deposição de 2,4 monocamadas (**ML** - *Monolayers*) de InAs à uma temperatura de  $\sim 500^\circ C$ , usando uma taxa de crescimento de 0,01 ML/s. Em seguida os QDs foram cobertos por uma camada de GaAs. Através da medida de microscopia de transmissão eletrônica (**TEM** - *Transmission Electron Microscopy*), a densidade de pontos quânticos foi estimada em  $\sim 3,5 \times 10^{10} cm^{-2}$ , com uma média dos tamanhos das bases de 18 nm e altura 8,5 nm [34]. As disposições das camadas utilizadas na produção das amostras estão ilustradas na figura 36. Para facilitar o entendimento, as amostras serão chamadas de 1521, 1522 e 1523. Como se pode perce-

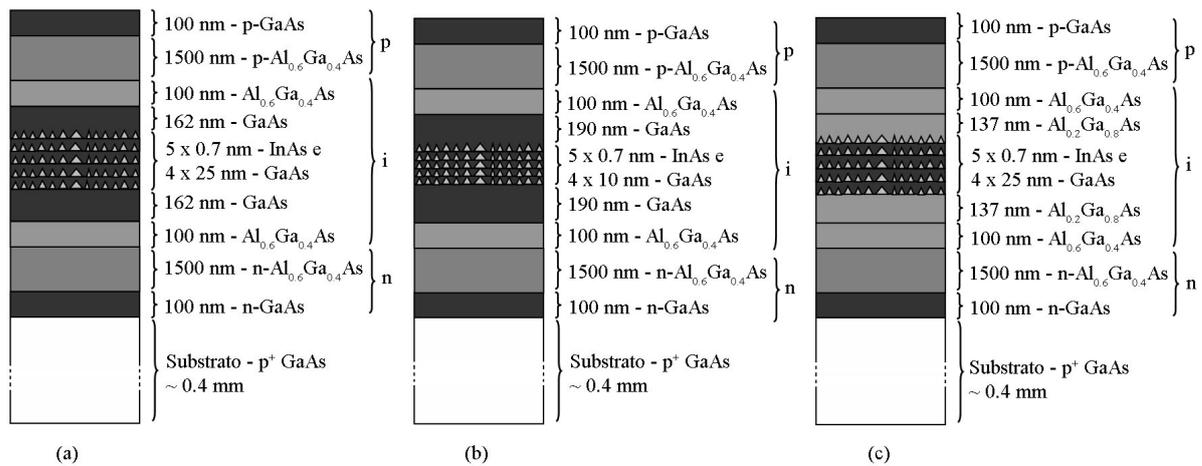


Figura 36: Ilustração das multicamadas do tipo  $p-i-n$  utilizadas na produção das amostras (a) 1521, (b) 1522 e (c) 1523.

ber através desta figura, todas as amostras possuem a mesma quantidade de camadas de pontos quânticos, havendo uma diferenciação apenas na espessura ou na disposição de alguma outra camada. Após o crescimento das multicamadas, pequenos círculos (*mesas*) de raios de  $200\mu\text{m}$  foram recortados pela técnica de litografia e montadas sobre uma cápsula metálica através de uma resina condutora de ouro-epoxy. No topo de cada mesa, um anel de ouro-germânio previamente fixado foi soldado a fios de ouro-germânio que são ligados aos fios isolados da cápsula. Finalmente a amostra adquire a forma de um dispositivo diodo do tipo  $p-i-n$ , que estão ilustradas na figura 37.

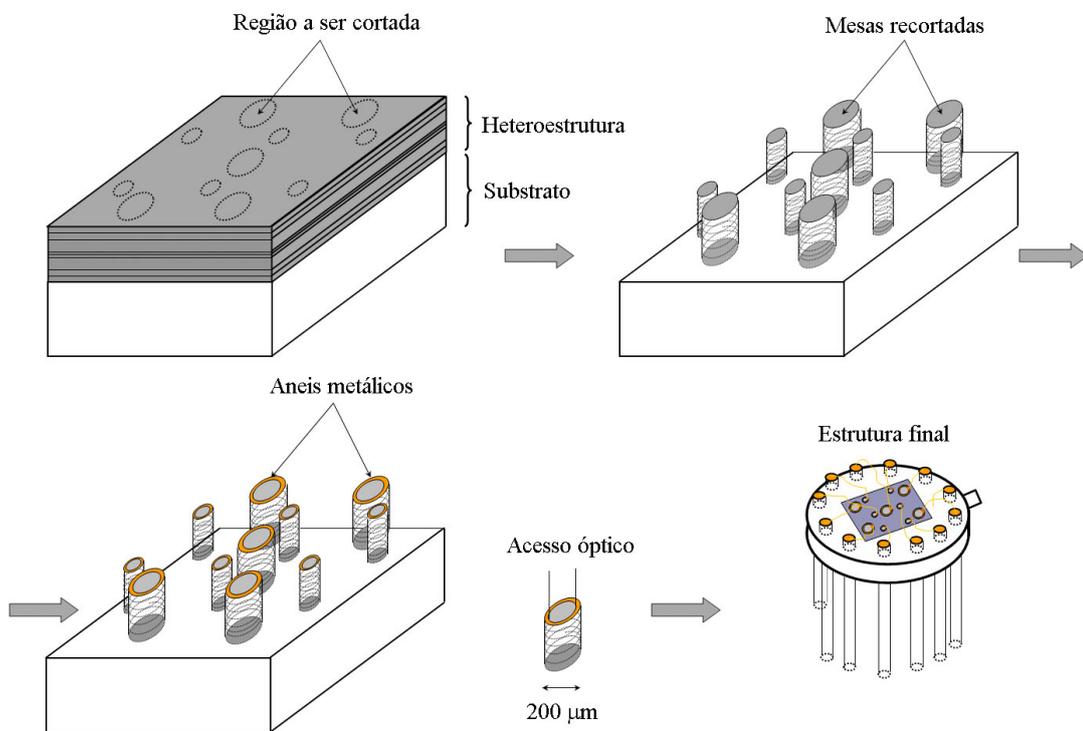


Figura 37: Processo de montagem das amostras em forma de dispositivo diodo do tipo *p-i-n*.

## 4 *Resultados e Discussões*

Neste capítulo serão apresentados os resultados das caracterizações ópticas e elétricas dos dispositivos descritos no capítulo 3. As técnicas utilizadas para a obtenção destes resultados foram: microluminescência, varredura superficial da microluminescência em função do campo elétrico aplicado no dispositivo e a microluminescência em função da intensidade do laser.

Inicialmente apresentaremos a energia do *gap* dos semicondutores utilizados assim como sua variação com a temperatura. Também iremos mostrar as curvas de absorção características dos semicondutores utilizados na fabricação das barreiras de potencial. Em seguida apresentaremos os espectros da microluminescência de todas as amostras em função do campo elétrico aplicado. Por fim, as medidas da varredura superficial da microluminescência serão analisadas para melhor entender os processos de transferência de energia ocorrentes nos semicondutores assim como sua influência com o campo elétrico.

### 4.1 *Variação do gap com a Temperatura*

O conhecimento do *gap* de energia, assim como sua variação com a temperatura, é de fundamental importância para o estudo dos semicondutores, já que esta energia é utilizada na maioria dos cálculos e análises realizadas. Ultimamente, devido ao amplo estudo dos materiais semicondutores, as energias dos *gaps* para diferentes temperaturas e concentrações de dopantes são bem conhecidas. As estruturas de bandas para os semicondutores GaAs e InAs estão mostradas na figura 38.

Pode-se verificar através das bandas de energia que tanto o GaAs quanto o InAs possuem *gap* direto. Isto significa que ambos possuem uma grande probabilidade de absorção e emissão de fótons, uma vez que não precisam ganhar ou perder momento por meio de fônons. Como os estudos realizados neste trabalho estão ligados diretamente com os processos de absorção e emissão de fótons, os valores de  $E_{\Gamma}$  que representa a energia

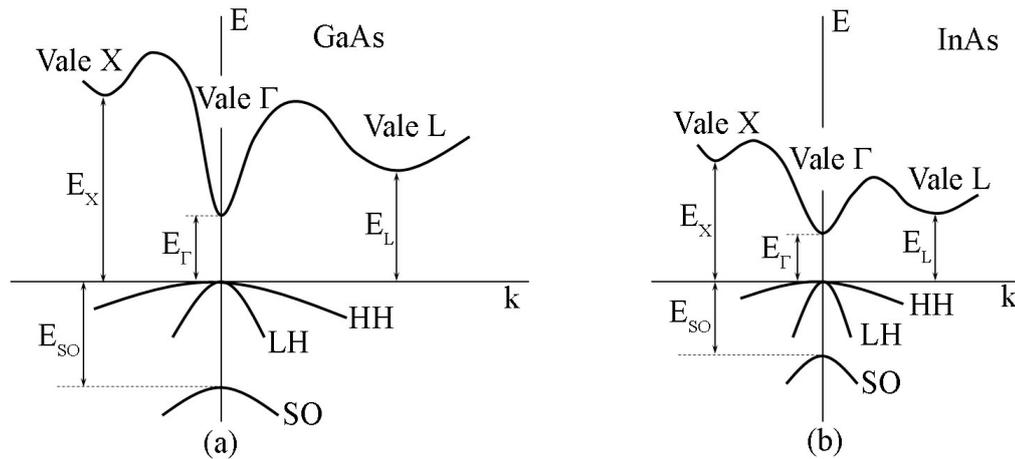


Figura 38: Estruturas de banda para os semicondutores GaAs (a) e InAs (b) [32].

do *gap* direto para o InAs e o GaAs serão as únicas a serem exploradas.

Os valores dos *gaps* para os semicondutores que não possuem nenhum confinamento quântico (denominados Bulk) em função da temperatura já foram extensivamente explorados. Uma relação bastante conhecida do *gap* com a temperatura pode ser descrita pela expressão empírica de Varshni, que é dada por

$$E_g = A - \frac{BT^2}{T + C}, \quad (4.1)$$

onde  $A$ ,  $B$  e  $C$  são parâmetros conhecidos específicos de cada semicondutor. É importante salientar que este valor do *gap* corresponde a menor distância entre o topo da banda de valência e o fundo da banda de condução. No caso do GaAs e InAs, o valor de  $E_g$  corresponde a distância entre o fundo da banda de condução (vale  $\Gamma$ ) e o topo da banda de valência. O plote da equação 4.1 para os semicondutores GaAs e InAs com valores da temperatura entre 0 e 300 K está mostrado na figura 39.

Através da figura 39, é possível verificar que o valor do *gap* decresce com o aumento da temperatura. Em alguns semicondutores o valor do *gap* também varia com a concentração de dopantes. Estes dopantes, como é o caso do  $Al$  na liga  $Al_xGa_{1-x}As$ , substituem o Ga sem causar uma modificação significativa no parâmetro de rede da estrutura cristalina. Isto implica que independente da concentração de  $Al$  o  $Al_xGa_{1-x}As$  poderá ser crescido sobre um substrato de GaAs com facilidade. Estes fatos fazem com que este semicondutor seja muito útil na fabricação de dispositivos, sendo amplamente utilizados na óptico-eletrônica. A figura 40 mostra as estruturas de bandas para o semicondutor  $Al_xGa_{1-x}As$  nos casos onde possui *gap* direto (para  $x < 0,45$ ) e indireto (para  $x > 0,45$ ).

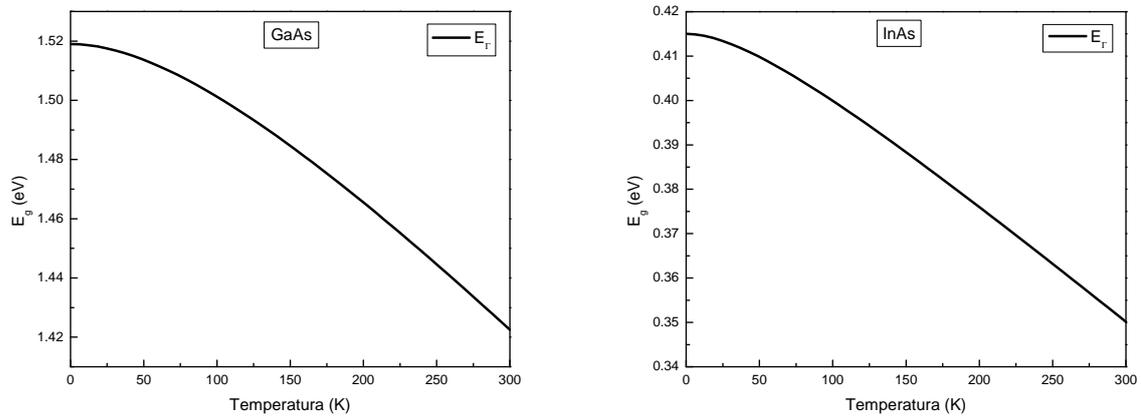


Figura 39: Variação do *gap* do GaAs (à esquerda) e do InAs (à direita) com a temperatura.

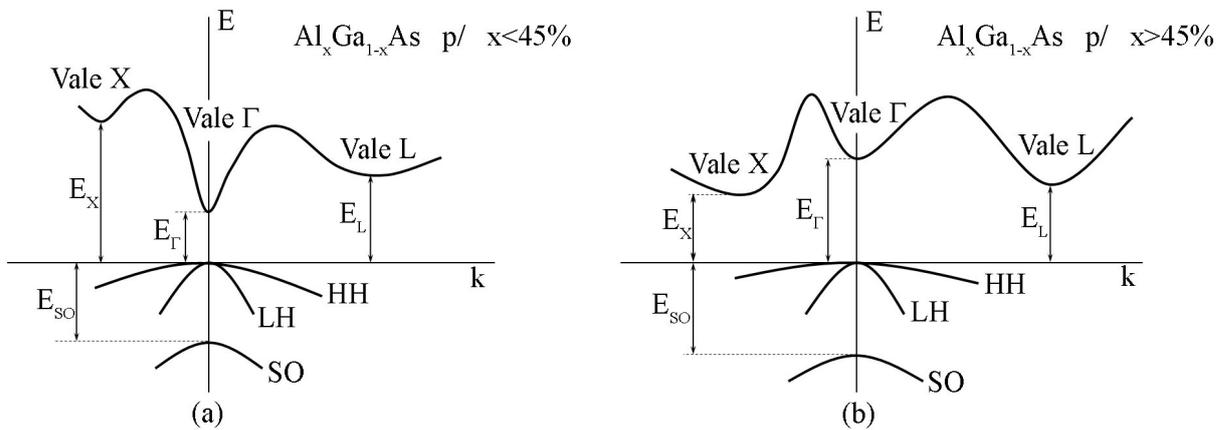


Figura 40: Estruturas de banda para o semiconductor  $Al_xGa_{1-x}As$  com  $x < 0,45$  (a) e  $x > 0,45$  (b) [32].

Como foram utilizadas concentrações de  $x = 0,2$  e  $x = 0,6$  de  $Al$  na fabricação das amostras, é interessante analisar ambos os casos, onde o  $Al_xGa_{1-x}As$  possui *gap* direto e indireto. Desta forma, as distâncias entre o fundo dos vales  $\Gamma$ ,  $X$  e  $L$  da banda de condução e o topo da banda de valência serão consideradas.

A relação do valor do *gap* com a temperatura mostrado pela equação 4.1 também é válida no cálculo dos valores de  $E_\Gamma$ ,  $E_X$  e  $E_L$  de um semiconductor de *gap* indireto. A figura 41 mostra a variação das energias  $E_\Gamma$ ,  $E_X$  e  $E_L$  (indicadas em 40) em função da temperatura para os casos onde  $x < 0,45$  (à esquerda) e  $x > 0,45$  (à direita).

Os valores dos *gaps* obtidos nesta seção serão empregados no cálculo do coeficiente de absorção óptica, que é de extrema importância para a compreensão de onde os pares elétrons-buraco estão sendo gerados.

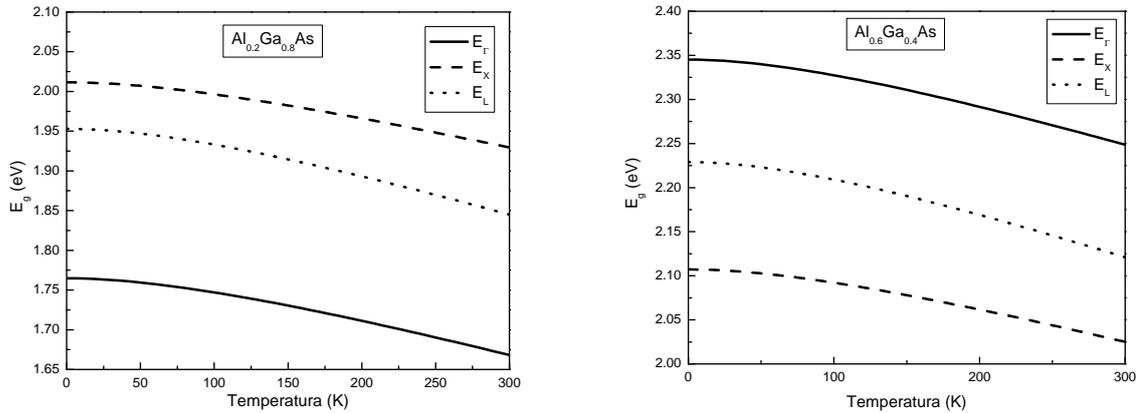


Figura 41: Variação do *gap* do GaAs (à esquerda) e do InAs (à direita) com a temperatura.

## 4.2 Absorção Óptica

Conhecer a absorção da luz nos semicondutores é muito importante para o estudo de espectroscopia óptica. O coeficiente de absorção óptica  $\alpha$  define a quantidade de luz que foi absorvida pelo material. Elétrons da banda de valência podem absorver um fóton cuja energia seja maior que o *gap* do semicondutor e passar para a banda de condução. Desta maneira, em uma primeira aproximação, pode-se dizer que os semicondutores *Bulk* irão absorver fótons com energias maiores que  $E_g$  deixando passar aqueles que tiverem energia menor que  $E_g$ . Na realidade, o coeficiente de absorção  $\alpha$  para semicondutores de *gap* direto é maior para menores comprimentos de onda, e pode ser escrito como [35]

$$\alpha_d(E) \propto \sqrt{E - E_g}, \quad (4.2)$$

e no caso dos semicondutores de *gap* indireto, pode-se escrever [35]

$$\alpha_i(E) \propto (E - E_g)^2. \quad (4.3)$$

onde  $E$  é a energia do fóton, que é dada por  $\hbar\omega = h\nu = hc/\lambda$ , e  $\lambda$  é o comprimento de onda da luz. É importante ressaltar que como o *gap* dos semicondutores depende da temperatura, o coeficiente de absorção também dependerá.

Utilizando uma constante de proporcionalidade  $\alpha_0$  nas equações 4.2 e 4.3, e conhecendo os *gaps* dos semicondutores, é possível representar o coeficiente de absorção óptica de cada material. No caso do GaAs e do  $Al_{0.6}Ga_{0.4}As$  que foram utilizados como

barreiras na fabricação das amostras, o coeficiente de absorção à temperatura de 77 K para diferentes valores de  $\alpha_0$  é mostrado na figura 42.

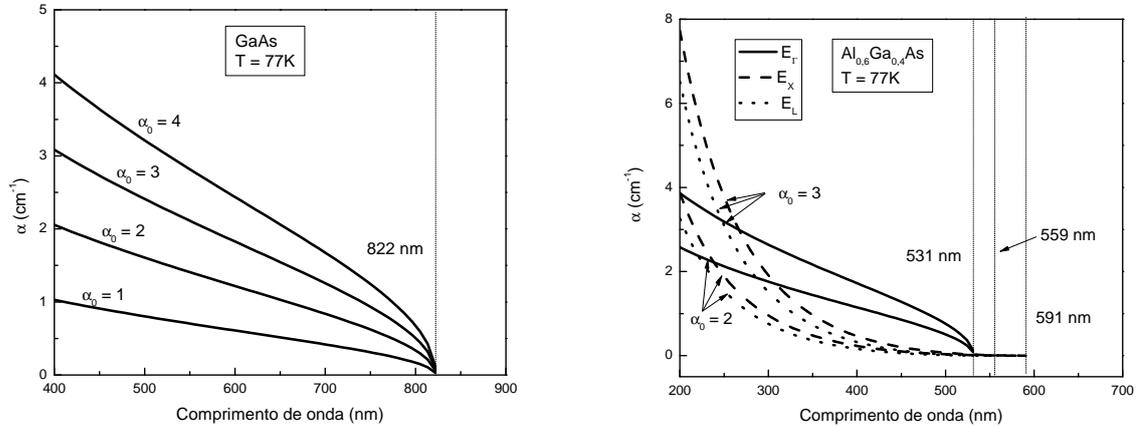


Figura 42: Coeficiente de absorção para o GaAs (à esquerda) e para o  $Al_{0,6}Ga_{0,4}As$  (à direita) à temperatura de 77 K e para diferentes valores de  $\alpha_0$ .

É possível verificar que a absorção do  $Al_{0,6}Ga_{0,4}As$  para temperatura de 77 K não acontece para comprimentos de onda superiores a 600 nm. Na realidade, pode-se dizer que existe uma pequena absorção de luz para energias um pouco abaixo do *gap* do semicondutor. Esta é chamada de absorção de Urbach, e ocorre devido a participação de fônons da rede cristalina [35]. De qualquer maneira a absorção de Urbach é insignificante comparado a que ocorre para energias maiores que  $E_g$ , desta forma ela não está incluída na figura 42.

### 4.3 Microluminescência

Para analisar os espectros de microluminescência ( $\mu$ PL), assim como a varredura da  $\mu$ PL em função do campo elétrico  $\mathcal{E}$ , é necessário entender como ocorre a variação do campo elétrico no dispositivo. Sabe-se que o campo elétrico no interior da região intrínseca está relacionado com o potencial da junção *p-i-n*,  $V_i$  ( $\sim 1,5$  V) e com o potencial aplicado  $V_a$ , de acordo com a relação  $\mathcal{E} = V_i - V_a/l$  onde  $l$  é a largura da região intrínseca. Desta forma é possível controlar o campo elétrico na região intrínseca variando o potencial aplicado nos terminais elétricos do dispositivo.

Durante todas as medidas de  $\mu$ PL, as amostras foram mantidas dentro de uma câmara criogênica sob uma pressão de 0,2 mBarr e resfriadas com nitrogênio líquido à temperatura de 77 K. Estas medidas foram obtidas através do mesmo esquema ilustrado na figura 33.

Foi utilizado como fonte de excitação um laser de hélio-neônio na linha de 632  $nm$  com uma potência de saída de aproximadamente 6 mW. Ao passar pelo caminho óptico, o feixe de laser perde intensidade devido a espalhamentos, reflexões e absorção causados pelas lentes, prisma e objetiva utilizados no experimento. Desta forma, o valor real da potência de excitação que chega até a amostra foi de 2,92 mW. Estas medidas da potência foram adquiridas através de um medidor de potência digital. Quando o feixe de laser incide sobre a superfície da amostra, uma parte é refletida de volta enquanto a outra penetra e é fortemente absorvida a uma taxa  $\propto \alpha^{-1}$  na região  $p$  do dispositivo [17]. Entretanto, uma fração da luz incidente alcança a região posterior a camada intrínseca onde estão os QDs. Os fótons absorvidos criam pares elétrons-buraco que se recombinam após um determinado tempo. Este tempo é característico de cada semiconductor e é chamado de tempo de vida. Ao se recombinarem os pares elétrons-buraco geram fótons de energia  $\hbar\omega = E_g$  que são emitidos em todas as direções espaciais. Parte desta emissão é coletada por uma objetiva e encaminhada até um espectrômetro através de uma fibra óptica. Antes da luz proveniente da amostra ser capturada pela fibra óptica, ela passa por um filtro óptico que bloqueia todos os comprimentos de onda relacionados a fonte de excitação. Desta forma, é possível garantir que o espectro observado não possui vestígios do laser.

É importante esclarecer que dispositivos do tipo  $p-i-n$  podem apresentar alguma luminescência devido a aplicação de um potencial elétrico, este fenômeno é denominado eletroluminescência. Entretanto, este não é o caso dos dispositivos estudados neste trabalho, já que mesmo com o potencial máximo aplicado e na ausência de excitação eletromagnética, não se foi possível observar nenhuma emissão no dispositivo.

Foram obtidos espectros de  $\mu$ PL das amostras 1521, 1522 e 1523 para vários potenciais aplicados. O sinal negativo indica que o potencial aplicado é inverso. A figura 43 (superior) mostra os espectros de  $\mu$ PL para diversos potenciais aplicados. Pode-se perceber que houve um aumento considerável na intensidade de PL com o aumento do potencial direto aplicado para as bandas situadas em 872, 927 e 962 e 988  $nm$ , como mostra a figura 43 (inferior). O aumento na intensidade da emissão destas bandas ocorre devido ao maior confinamento quântico proporcionado pelas barreiras de potencial nos pontos quânticos quando se aumenta o potencial direto aplicado. Um exemplo simplificado de uma estrutura  $p-i-n$  com pontos quânticos na camada intrínseca submetida a um potencial direto e indireto é mostrado na figura 44.

A partir desta figura pode-se verificar que a barreira de potencial que confina os portadores na direção  $x$  pode ser considerada triangular nos casos (a) e (c). Esta barreira

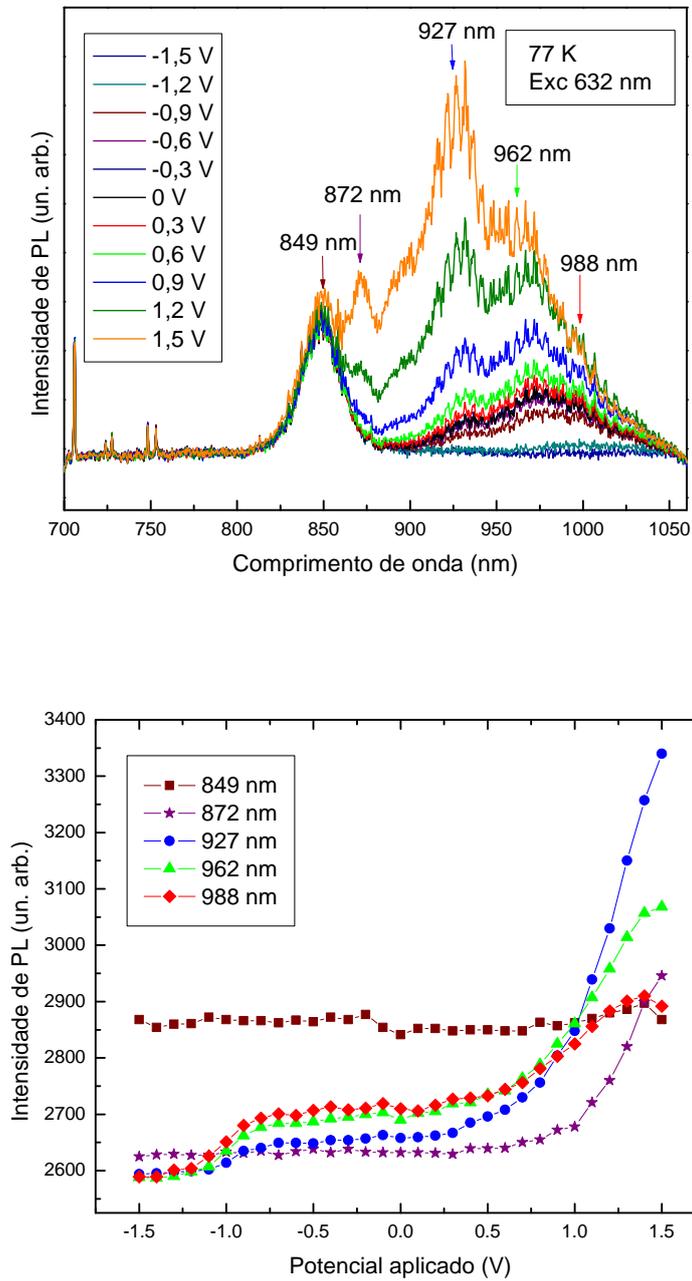


Figura 43: Espectro de  $\mu$ PL obtido com a amostra 1521 para diferentes potenciais aplicados (superior) e intensidade de PL para cada ponto indicado por setas em função do potencial aplicado (inferior).

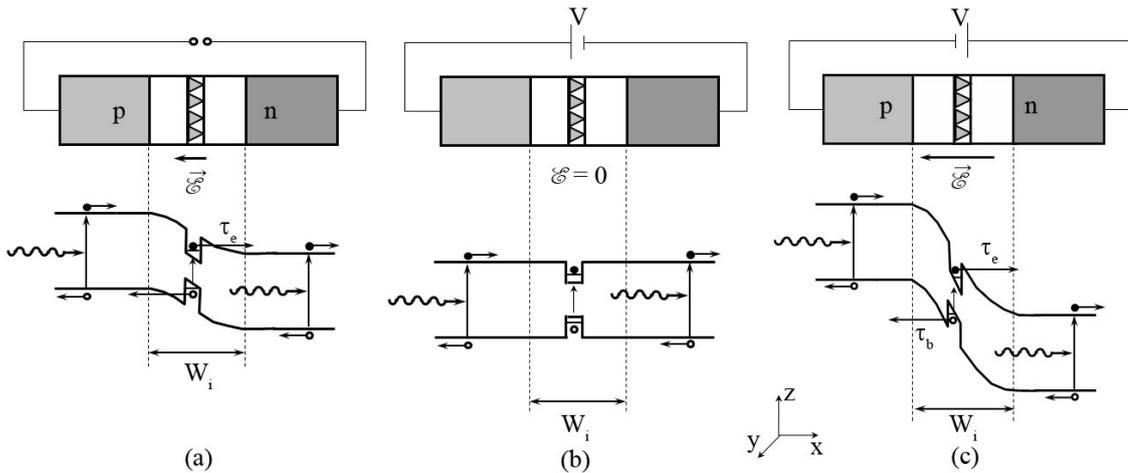


Figura 44: Representação do diagrama de bandas de uma estrutura  $p$ - $i$ - $n$  com pontos quânticos na região intrínseca sem nenhum potencial elétrico aplicado (a), submetida a um potencial direto (b) e inverso (c).

é fortemente modificada com a variação do campo elétrico na região intrínseca. Desta forma, quando  $\mathcal{E} = 0$ , as bandas de energia (figura 44 (b)) estarão no mesmo potencial, isto significa que as bandas estarão planas (*flat band*) e o confinamento dos portadores nos pontos quânticos será máximo. Como o tempo de tunelamento para elétrons  $\tau_e$  e buracos  $\tau_b$  depende da geometria da barreira de potencial, ele também dependerá do campo elétrico externo. A aproximação de Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) pode ser utilizada para se calcular os valores de  $\tau_e$  e  $\tau_b$  de uma barreira de potencial triangular [18]. Considerando que o potencial de confinamento na direção  $x$  possui uma largura  $L$  e esteja submerso a um campo elétrico perpendicular  $\mathcal{E}$ , o tempo de tunelamento para o elétron e buraco é dado por

$$\tau_{e,b} = \frac{2m_{e,b}^* L^2}{\hbar\pi} e^{-\frac{4}{3\hbar e\mathcal{E}} \sqrt{2m_{e,b}^* E_{e,b}^3}}, \quad (4.4)$$

onde  $m_{e,b}^*$  corresponde a massa efetiva e  $E_{e,b}$  a energia de ionização. Os subscritos  $e$  e  $b$  referem-se aos elétrons e buracos respectivamente. A partir da equação 4.4 pode-se observar que o tempo de tunelamento diminui exponencialmente com o aumento do campo elétrico externo ou com o aumento do potencial inverso aplicado, uma vez que o potencial inverso implica em um aumento do campo elétrico na região intrínseca. Portanto, a probabilidade para que os elétrons e buracos tunelem e se recombinem fora dos pontos quânticos cresce com o aumento do campo elétrico. Utilizando esta compreensão é possível relacionar a variação da intensidade das bandas na figura 43 com a mudança na probabilidade de tunelamento do elétron e buraco em um ponto quântico sob um campo elétrico

externo. Também é possível observar na figura 43 a presença de uma banda situada em  $849 \text{ nm}$  que não possui nenhuma variação na intensidade. Esta banda está associada a emissão das barreiras de GaAs, que como não proporcionam nenhuma forma de confinamento aos pares elétrons-buraco, não sofrem nenhuma influência do campo elétrico [36]. Outro fato interessante para observar no espectro de  $\mu\text{PL}$  da figura 43, é o surgimento de uma emissão centrada em  $872 \text{ nm}$  para valores maiores que  $1,2 \text{ V}$ . Esta emissão está relacionada com defeitos na rede cristalina do GaAs que foram gerados pela presença de carbono durante crescimento da heteroestrutura da amostra 1521.

As medidas obtidas para todas as três amostras foram adquiridas utilizando a mesma metodologia e condições descritas anteriormente. A figura 45 (superior) mostra os espectros de  $\mu\text{PL}$  da amostra 1522 para vários potenciais aplicados. Da mesma forma que na amostra 1521, as barreiras de potencial dos pontos quânticos de InAs que confinam os pares elétrons-buraco, foram fortemente modificadas com o aumento do potencial elétrico aplicado. A figura 45 (inferior) mostra as intensidades para cada ponto indicado pelas setas em função do potencial aplicado. Assim como na amostra 1521 a emissão posicionada em  $837 \text{ nm}$  não sofre nenhuma alteração com a variação do potencial e está associada as barreiras de GaAs [36].

A figura 46 (superior) mostra os espectros de  $\mu\text{PL}$  para a amostra 1523 para diferentes potenciais diretos e inversos aplicado. As intensidades em cada ponto (marcadas por setas) foram plotadas em função do potencial elétrico aplicado. Pode-se perceber a partir da comparação entre os espectros de  $\mu\text{PL}$  das três amostras, que todas elas possuem o mesmo perfil de emissão. Isto ocorre pelo fato de que as amostras possuem o mesmo número de camadas com pontos quânticos de InAs, e estes foram crescidos seguindo as mesmas taxas de deposição. Isto significa dizer que o tamanho médio dos pontos quânticos é o mesmo em todas as amostras. Outro fator importante a ser observado é de que as barreiras de potencial que separam os pontos quânticos (tanto entre camadas quanto laterais) são formados pelo semiconductor GaAs para todas as amostras.

Por meio dos espectros de emissão das amostras 1521, 1522 e 1523, é possível identificar a presença de três bandas centradas em torno de  $923$ ,  $959$  e  $987$ . De acordo com a analogia utilizada anteriormente, estas bandas foram associadas aos QDs de InAs pelo fato de sentirem uma influência do campo elétrico aplicado. Entretanto, é interessante demonstrar que todos os sistemas de QDs possuem este tipo de característica de possuírem bandas espaçadas de ( $\sim 35 \text{ meV}$ ). Isto ocorre devido a discretização da densidade de estados que é uma característica de qualquer sistema que proporciona o confinamento quântico

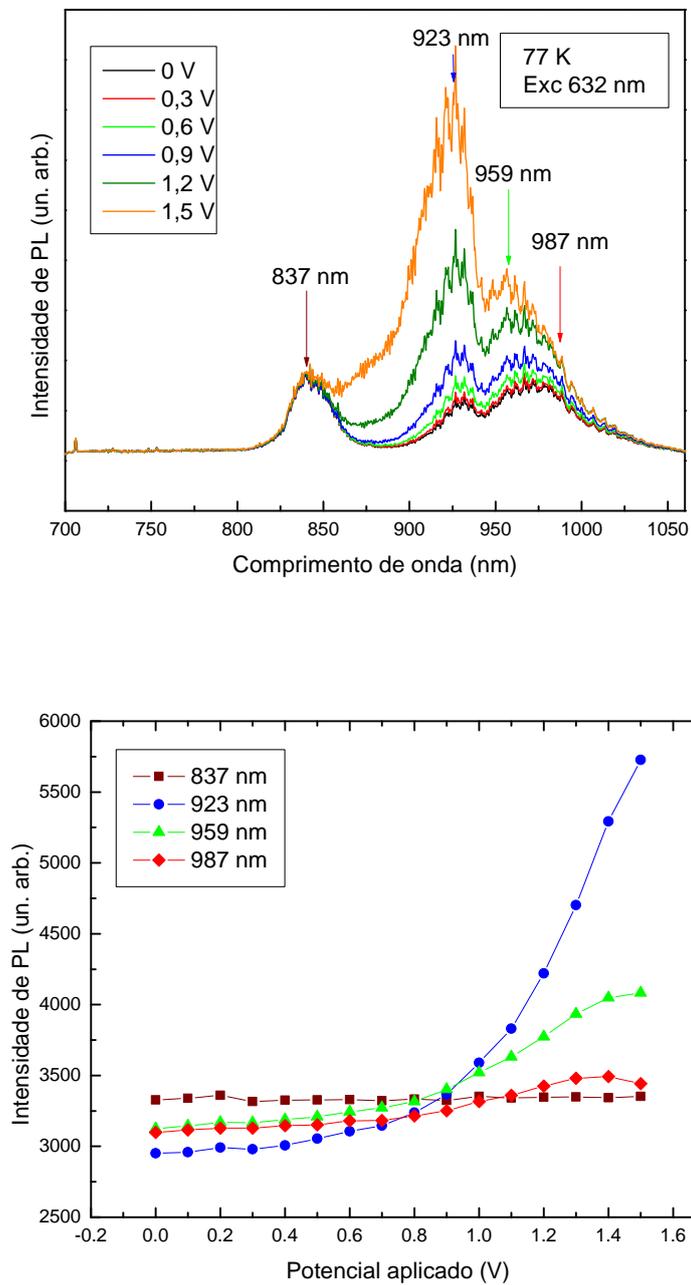


Figura 45: Espectro de  $\mu$ PL obtido com a amostra 1522 para diferentes potenciais aplicados (superior) e intensidade de PL para cada ponto indicado por setas em função do potencial aplicado (inferior).

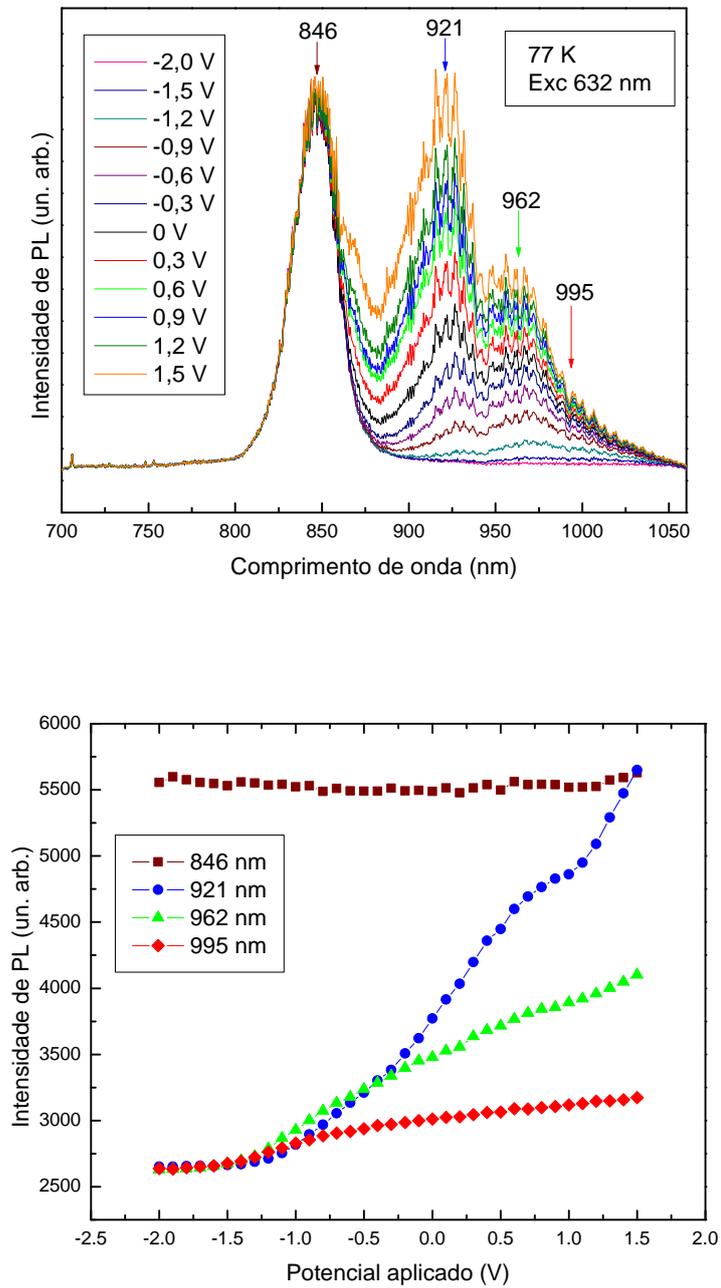


Figura 46: Espectro de  $\mu$ PL obtido com a amostra 1523 para diferentes potenciais aplicados (superior) e intensidade de PL para cada ponto indicado por setas em função do potencial aplicado (inferior).

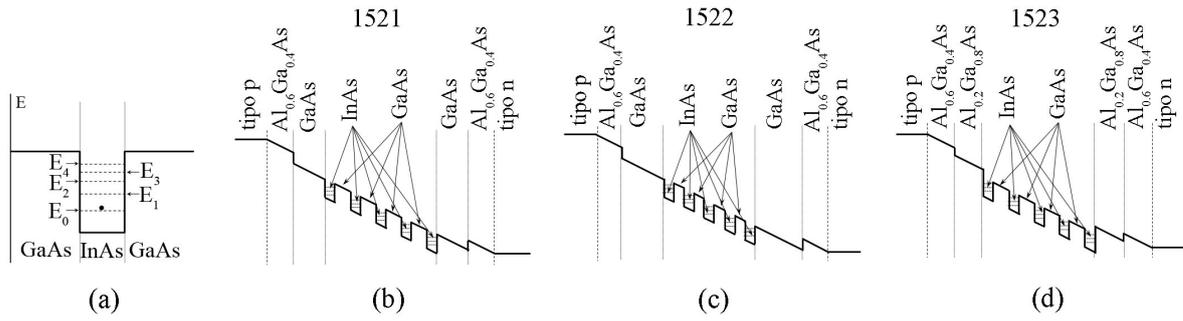


Figura 47: Representação do diagrama de bandas bidimensional de um ponto quântico de InAs imerso em uma estrutura de GaAs (a) e da região intrínseca das amostras 1521 (b), 1522 (c) e 1523 (d). Os níveis discretos de energia ( $E_0$ ,  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$  e  $E_4$ ) estão representados pelas linhas tracejadas em (a).

dos pares elétrons buracos. Um exemplo de confinamento está mostrado na figura 47 (a) representado pelo diagrama de bandas bidimensional de um ponto quântico de InAs imerso em uma estrutura de GaAs. Assim como em qualquer outro sistema quântico, é possível resolver a equação de Schrödinger para os elétrons dentro deste potencial de confinamento, de forma a obter os valores quantizados da energia para esta partícula. Estes valores de energia estão representados pelas linhas tracejadas na figura 47 (a). A recominação dos pares elétrons-buraco de diferentes níveis de energia dentro de um ponto quântico proporcionam emissões em diferentes comprimentos de onda.

Estudos realizados em pontos quânticos de InAs [37] crescidos sob as mesmas condições que as heteroestruturas das amostras 1521, 1522 e 1523 pela técnica de MBE indicam que as posições marcadas pelas setas em aproximadamente 923, 959 e 987 nm nas figuras 43, 45 e 46 estão relacionadas as transições dos estados  $E_4$ ,  $E_3$  e  $E_2$  dos pontos quânticos de InAs, como mostra a figura 47 (a). A visualização destes níveis de maior energia só foi possível devido a alta intensidade de excitação óptica ( $\sim 2 \times 10^4 W/cm^2$ ). Com esta intensidade, a quantidade de pares elétrons-buraco gerados são suficientes para preencherem todos os estados de energia dos níveis  $E_0$ ,  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$  e  $E_4$ . As emissões relacionadas ao nível fundamental  $E_0$  e o primeiro estado excitado  $E_1$  não foram visualizadas devido ao fato de que o detector presente no espectrômetro utilizado nas medidas era uma CCD Hamamatsu S7031-1006, e como se sabe, estes detectores possuem uma curva de sensibilidade ou eficiência quântica que vai a zero para comprimentos de ondas maiores que 1050 nm. Esta é justamente a região do estado fundamental e do primeiro estado excitado à temperatura de 77 K. A emissão do estado  $E_2$  posicionada em  $\sim 987$  nm, também não ficou muito evidente nas medidas realizadas uma vez que ela está posicionada em uma região onde a sensibilidade do detector é muito baixa, veja a figura 48.

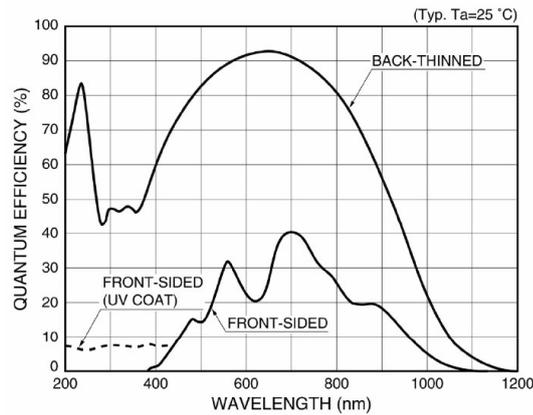


Figura 48: Curva característica da eficiência quântica do detector Hamamatsu S7031-1006 utilizado na obtenção das medidas de  $\mu$ PL [38].

Devido ao fato de não ter sido identificado as emissões referentes aos estados  $E_0$  e  $E_1$  dos QDs através da CCD Hamamatsu S7031-1006, realizamos uma visita ao laboratório do Núcleo de Física Aplicada da Universidade de Brasília para utilizarmos um detector de Germânio. As medidas de  $\mu$ PL também foram realizadas à temperatura de 77 K utilizando como fonte de excitação um laser de hélio-neônio com uma potência de saída de  $\sim 2$  mW. O aparato das lentes e objetivas utilizadas neste experimento foi o mesmo já explicado anteriormente com a única diferença de que a luminescência proveniente da amostra foi encaminhada até um espectrômetro (Spex 500) acoplado a um detector de Germânio, também resfriado à temperatura de nitrogênio líquido.

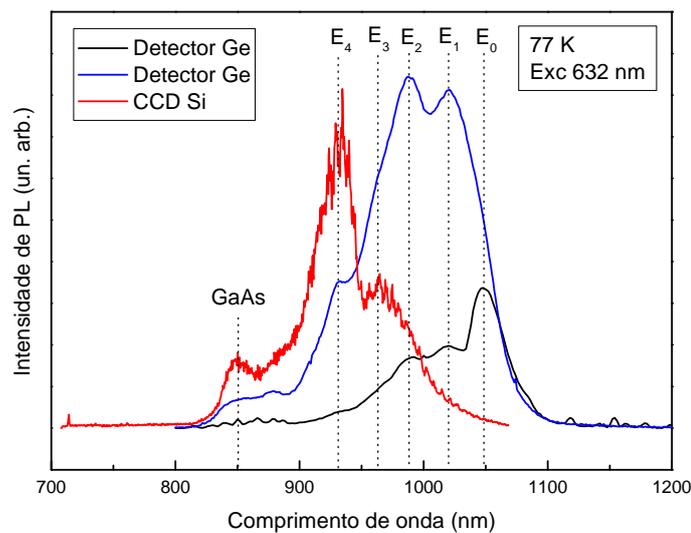


Figura 49: Espectros de  $\mu$ PL da amostra 1522 sem nenhum potencial elétrico aplicado obtidos através da CCD (linha vermelha) e do detector de Germânio (linhas preta e azul).

Como a curva de sensibilidade do Germânio é bastante efetiva na região do infravermelho mais distante, foi possível realizar a identificação da emissão de todos os estados referentes aos QDs. A figura 49 mostra os espectros de  $\mu$ PL para a amostra 1522 realizadas com o uso da CCD (linha vermelha) e através do detector de Germânio para uma baixa intensidade de excitação (linha preta) e outra maior (linha azul). Quando a intensidade de excitação é menor, a quantidade de fótons que atingem a região excitada é suficiente para preencher somente os estados de menor energia  $E_0$ ,  $E_1$  e  $E_2$ . Entretanto, ao aumentar a intensidade de excitação, os estados de maior energia vão sendo preenchidos, e desta forma será possível evidenciá-los.

## 4.4 Varredura Superficial da Microluminescência

Os processos que envolvem a transferência de cargas entre os pontos quânticos é um assunto que tem sido bastante estudado nos últimos tempos [39, 40, 41]. Desta forma, várias explicações teóricas foram criadas para compreender estes fenômenos. Muitos trabalhos recentes mostram que as medidas da varredura da microluminescência fornecem parâmetros necessários para a compreensão dos processos de transferência de energia entre pontos quânticos [42, 43, 44].

Neste trabalho a transferência de cargas entre os pontos quânticos vizinhos sob presença de um campo elétrico perpendicular aos planos de crescimentos dos QDs foram investigados através das medidas da varredura superficial da microluminescência. Desta maneira foi necessário obter uma série de medidas para as três amostras submetidas a diferentes potenciais aplicados. As medidas da varredura superficial da microluminescência foram realizadas à temperatura de nitrogênio líquido (77 K) através do experimento mostrado na figura 33. Foi utilizado como fonte de excitação a linha de 632 nm de um laser de hélio-neônio cuja potência de incidência na amostra foi de 2,92 mW. O feixe do laser foi focalizado na superfície da amostra através de uma objetiva, dando origem a um *spot* de  $\sim 5\mu m$  de diâmetro. Este feixe de laser incidente é fortemente absorvido pelos semicondutores que compõem a heteroestrutura, de maneira a criar pares elétrons-buraco. Uma vez criados, estes portadores estão sujeitos aos processos de transporte de cargas; são eles, corrente de condução, que surge devido ao campo elétrico intrínseco ou aplicado e a corrente de difusão, que ocorre devido ao grande acúmulo de portadores em uma pequena região do espaço. O efeito do campo elétrico faz com que os portadores sejam conduzidos para direções opostas do dispositivo. Os elétrons se movimentam no sentido oposto ao campo elétrico descendo a barreira de potencial (em direção à região  $n$ ), sendo alguns

eventualmente capturados pelos QDs. Por outro lado, os buracos que forem gerados na região  $n$  seguem em direção à região  $p$  podendo da mesma forma serem capturados pelos QDs (ver figura 44). Já o efeito de difusão, faz com que os pares elétrons-buraco se desloquem para regiões de menores concentrações, i.e. na direção radial apontando para fora do feixe de incidência, como mostra a figura (50).

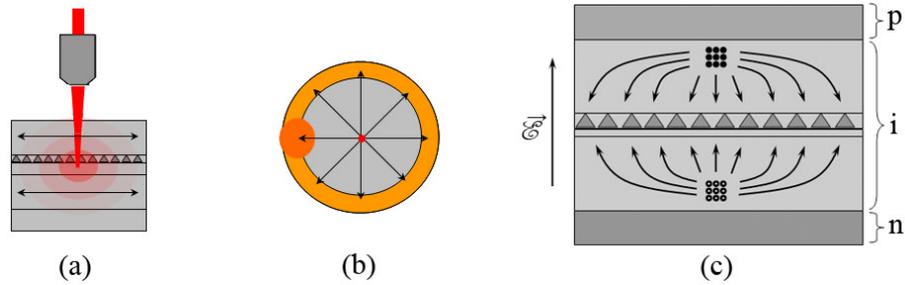


Figura 50: Ilustração do processo de difusão de portadores em (a) visão lateral e (b) visão superior na ausência do campo elétrico e (c) visão lateral com a presença do campo elétrico.

Após um determinado tempo, os pares elétrons-buraco se recombinam dando origem a fótons. Estes fótons por sua vez retornam através da objetiva e prisma até o dispositivo de varredura, que é composto por uma fibra óptica de  $50 \mu m$  de diâmetro e um motor de passo acoplado a um micro-transladador. A imagem da luminescência gerada pela objetiva na região do dispositivo de varredura possui uma ampliação de aproximadamente 17 vezes. Desta forma o dispositivo que compõem a fibra óptica e o micro-transladador realiza uma varredura numa direção que corresponde a imagem do diâmetro da mesa. A fibra óptica então, coleta continuamente a luminescência que chega até ela, encaminhando-a até um espectrômetro. Tanto o motor de passo quanto o espectrômetro se comunicam com um computador através de um software desenvolvido através do LabView especificamente para esta tarefa. Utilizando este software o espectrômetro passa a funcionar como um fotodetector, que irá detectar somente o comprimento de onda desejado. Durante a realização da varredura o programa vai fazendo leituras nas medidas da posição do motor e da intensidade da luz captada naquele ponto. Desta forma, no final de cada varredura obtêm-se uma matriz  $n \times 2$  onde  $n$  é o número de leituras realizadas, e 2 representa as medidas de intensidade e posição.

Antes de dar início a realização das medidas de varredura superficial da  $\mu PL$ , foi necessário calibrar o equipamento de maneira a conhecer com precisão os parâmetros de conversão do sistema micro-transladador. A calibração foi realizada executando a varredura em um objeto com dimensões conhecidas. Neste caso utilizou-se um *pinhole* de  $10 \mu m$  de diâmetro. Uma fonte de luz foi inserida atrás do *pinhole* de maneira que

a objetiva conseguisse focalizar o ponto de luz e amplificar na região do dispositivo de varredura. A câmera CCD, mostrada na figura 33, foi utilizada para focalizar com precisão a imagem do *pinhole*. Um comprimento de onda aleatório relacionado a fonte de luz foi selecionado no software que controla o motor de passo e o espectrômetro. Desta forma, foi realizado uma varredura de maneira com que a fibra óptica percorresse todo o diâmetro da imagem do *pinhole*. Vários valores da intensidade da luz foram adquiridos em função da posição do motor, como mostra a figura 51.

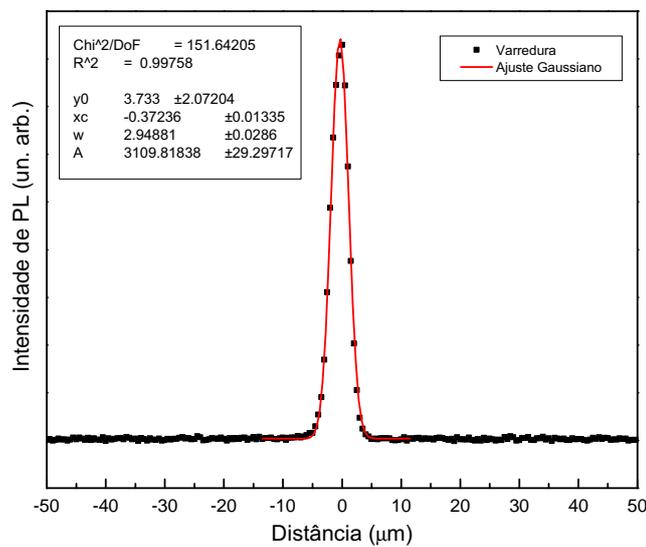


Figura 51: Varredura superficial de um *pinhole* de  $10 \mu\text{m}$  de diâmetro utilizado para a calibração da técnica.

Esta varredura do *pinhole* mostrada na figura 51 foi ajustada a uma curva Gaussiana representada pela curva vermelha, cuja equação é dada por

$$y = y_0 + \frac{A}{\Delta\sqrt{\pi/2}} e^{-2\left(\frac{x-x_c}{\Delta}\right)^2}, \quad (4.5)$$

onde  $y_0$ ,  $x_c$ ,  $\Delta$  e  $A$  são os parâmetros de ajuste da equação, e significam respectivamente a posição da base da curva no eixo  $y$ , a posição do pico central da curva no eixo  $x$ , a largura à meia altura e a área da curva de ajuste. É importante salientar que a largura do diâmetro do *pinhole* pode ser muito bem representada pelo valor da largura à meia altura da Gaussiana ( $\Delta$ ). Pode-se verificar na figura 51 que o valor de  $\Delta$  da curva de ajuste foi fixado em  $2,9488 \mu\text{m}$ , o que não corresponde ao valor conhecido do diâmetro do *pinhole* ( $10 \mu\text{m}$ ). Desta forma, através de uma simples análise de proporção entre estes valores,

encontra-se um fator multiplicativo de calibragem que é 3,3912. Este fator foi utilizado para a real redimensionalização de todos os resultados obtidos.

As medidas de varredura da microluminescência foram realizadas em cada amostra para os comprimentos de onda sinalizados por setas nos espectros de  $\mu$ PL mostrado nas figuras 43, 45 e 46. Primeiramente o *spot* do laser foi focalizado na superfície de uma das mesas utilizando o auxílio de uma câmera CCD. A mesa a ser estudada foi devidamente conectada a uma fonte de corrente contínua, de maneira a facilitar a aplicação de uma tensão direta ou reversa no dispositivo.

As primeiras medidas foram realizadas na amostra 1521. Para cada comprimento de onda indicado por setas na figura 43, variou-se o potencial de 0 a 1,5 V em valores acrescidos de 0,3 V. Para cada potencial aplicado, foi realizado uma varredura da  $\mu$ PL de maneira a verificar a influência do campo elétrico no processo de difusão lateral de portadores. Estas medidas estão mostradas na figura 52.

Todas as curvas de varredura foram normalizadas para os valores de máxima intensidade. Desta maneira é possível comparar visualmente a diferença no perfil de cada curva para os comprimentos de onda selecionados. A curva vermelha representa a varredura realizada para o comprimento de onda fixado em 632 nm, que corresponde ao próprio laser. Portanto, pode-se dizer que a curva vermelha representa muito bem a região onde o feixe do laser está incidindo, i.e. a região de excitação da amostra.

A figura 52 mostra somente três das seis curvas obtidas para os potenciais 0, 0,3; 0,6; 0,9; 1,2 e 1,5 V. Pode-se perceber que a mudança do perfil da varredura com o aumento do potencial aplicado é praticamente imperceptível visualmente. Portanto é necessário utilizar a equação 4.5 como ajuste gaussiano de forma a obter o parâmetro largura à meia altura  $\Delta$  para todas as curvas. Desta forma, os valores de  $\Delta$  podem ser plotados em função do potencial aplicado, como mostra a figura 53.

O parâmetro  $\Delta$  está associado a difusão lateral dos portadores, uma vez que para se recombinarem nas regiões vizinhas da área de geração é necessário que os pares elétron-buraco se desloquem para estas regiões. Este deslocamento lateral ocorre justamente devido ao processo de difusão que é causado pelo intenso gradiente de pares fotogerados.

A partir da figura 53 é possível observar que o efeito de difusão dos portadores para as barreiras de GaAs (849 nm) possui um valor intermediário em comparação com as outras emissões. Um outra observação importante a ser feita é de que os valores de  $\Delta$  foram constantes com o aumento do potencial elétrico. Esta evidência já era esperada, uma vez

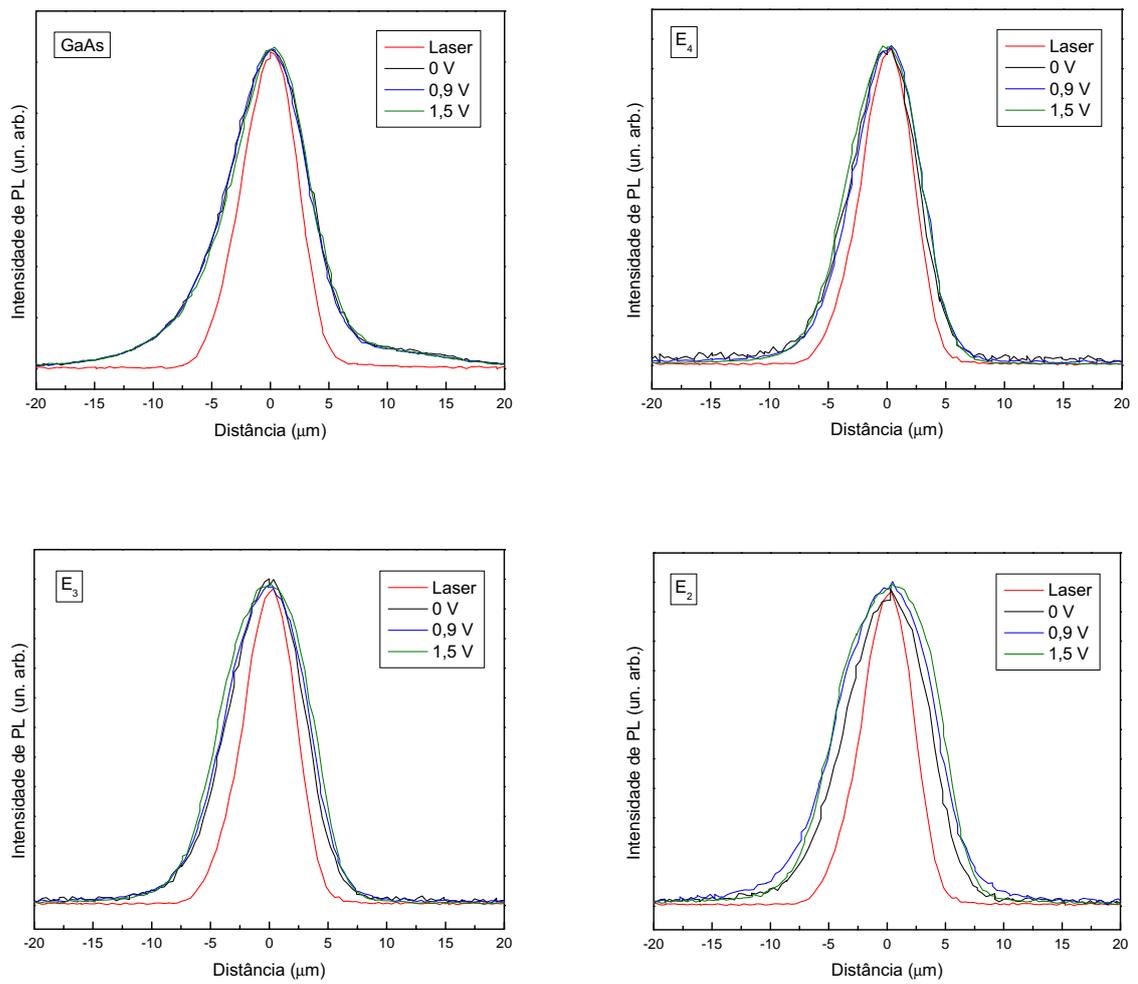


Figura 52: Varredura superficial da  $\mu$ PL referente a amostra 1521, para os valores de comprimentos de onda indicados na figura 43, variando o potencial aplicado de 0 a 1,5V.

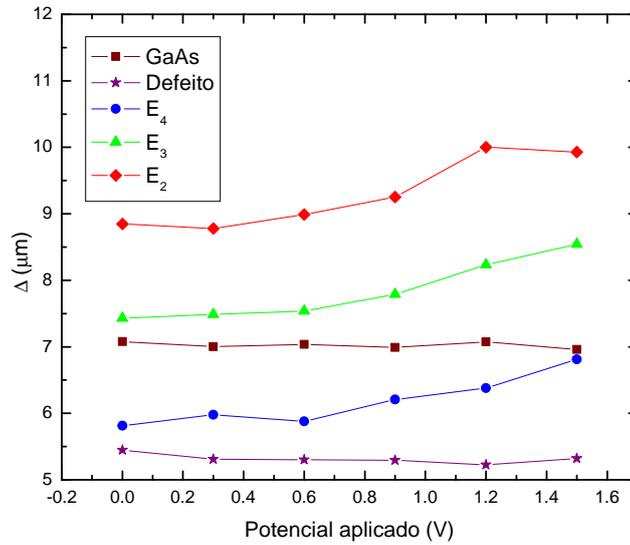


Figura 53: Valores da largura à meia altura obtida pelo ajuste gaussiano das curvas mostradas na figura 52 em função do potencial aplicado.

que foi comprovado através das medidas de  $\mu\text{PL}$  (figuras 43, 45 e 46) que as barreiras de GaAs não sofrem nenhuma influência com o campo elétrico. Por outro lado, o efeito de difusão para os comprimentos de onda relacionados aos estados  $E_4$ ,  $E_3$  e  $E_2$  dos pontos quânticos possui uma influência com o aumento do potencial elétrico.

Para explicar esta variação da difusão dos portadores entre os pontos quânticos com o aumento do campo elétrico, é conveniente considerar três possíveis suposições. A primeira diz que para que os portadores confinados nos pontos quânticos possam migrar para regiões distantes da excitação, é necessário que haja tunelamento destas partículas para pontos quânticos vizinhos [45]. Para que este efeito de tunelamento ocorra é necessário que as funções de onda das partículas confinadas consigam atravessar a barreira presente entre os pontos. Deste modo, o tempo de vida dos pares elétron-buraco é maior do que o tempo de tunelamento, aumentando assim a probabilidade de tunelamento [46]. Vários estudos presentes na literatura mostram que este fenômeno de tunelamento só ocorre quando os pontos quânticos possuem uma distância média menor que  $\sim 10 \text{ nm}$  [47, 48]. Esta suposição, portanto pode ser descartada para a análise das amostras estudadas, uma vez que devido a baixa taxa de deposição de InAs utilizada no crescimento das amostras, a distância média entre os QDs é da ordem de  $40 \text{ nm}$ . Isto implica em um tempo de tunelamento superior ao tempo de vida característico da transição radiativa nestes QDs que é  $\sim 1 \text{ ns}$  [49].

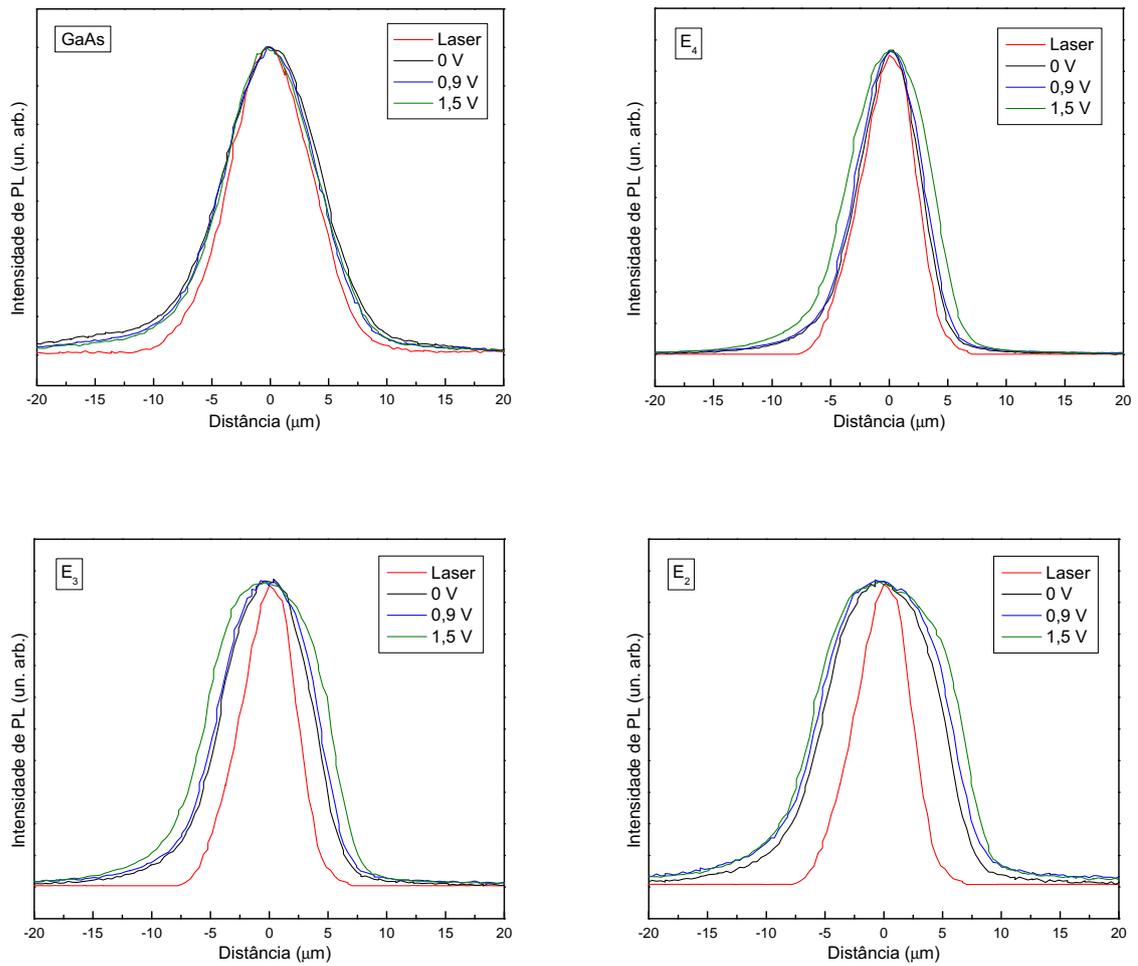


Figura 54: Varredura superficial da  $\mu\text{PL}$  referente a amostra 1522, para os valores de comprimentos de onda indicados na figura 45, variando o potencial aplicado de 0 a 1,5V.

A segunda suposição a ser considerada leva em conta os processos de ativação térmica que ocorre no regime de altas temperaturas ( $T > 90\text{K}$ ) que contribui para a redistribuição dos portadores entre pontos quânticos vizinhos [50, 51, 52]. Neste caso os portadores confinados nos pontos quânticos menores são termicamente ativados para a WL, recombinando posteriormente nos pontos quânticos maiores. Este processo de ativação térmica (também chamado de *carrier hopping*) foi estudado em pontos quânticos de InAs em função da temperatura por Chaib [37], e foi verificado que na realidade o aumento da temperatura provoca uma diminuição da difusão dos portadores nos QDs. Desta forma, esta segunda suposição também não pode ser utilizada para explicar o processo de difusão de portadores entre QDs. Por fim, a terceira suposição considera que a difusão dos portadores fotogerados ocorre nas barreiras de GaAs ou até mesmo nas regiões  $p$  e  $n$  antes de serem capturadas pelos QDs (veja figura 50 (c)). Assim como dito anteriormente, os elétrons gerados na região  $p$  seguem em sentido oposto ao campo elétrico sendo alguns eventualmente capturados pelos QDs. Da mesma maneira, os buracos gerados na região  $n$  seguem no sentido do campo elétrico sendo alguns capturados pelos QDs, como mostra a figura 44.

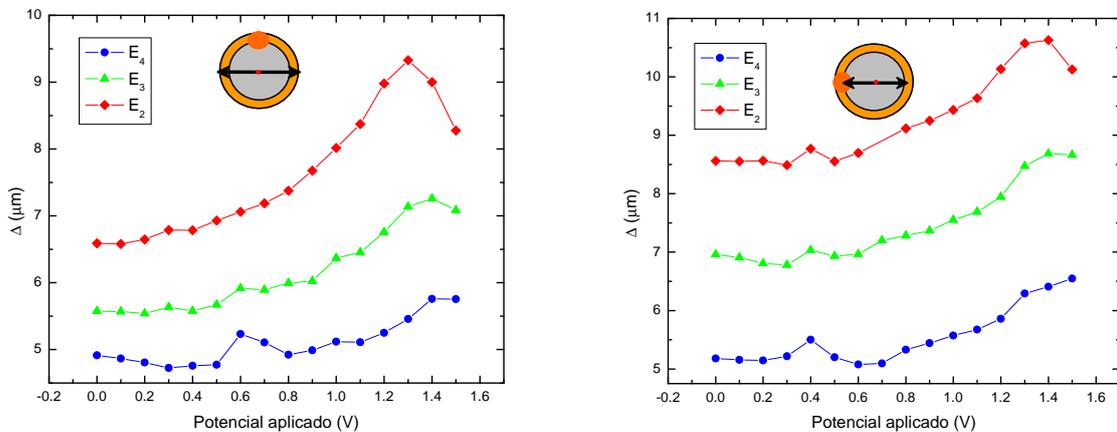


Figura 55: Valores da largura à meia altura (mostradas na figura 54) para duas direções diferentes da varredura (mostradas no desenho interno de cada gráfico) em função do potencial aplicado.

Vários estudos também demonstraram que o transporte lateral de portadores pode ser afetado pelo efeito de migração dos portadores através de centros intermediários de recombinação gerados por eventuais defeitos ou impurezas do meio [53, 54]. Entretanto, estes efeitos não são predominantes, podendo desta forma serem descartados na análise dos dados.

As medidas realizadas nas amostras 1522 e 1523 seguiram os mesmos procedimentos utilizados na aquisição de dados de varredura da amostra 1521. Desta forma, para cada comprimento de onda indicado por setas nas figuras 45 e 46, variou-se o potencial de 0 a 1,5 V em valores acrescidos de 0,1 V para a amostra 1522 e 0,3 V para a amostra 1523. Esta redução dos intervalos do potencial para a amostra 1522 foi realizada de modo a obter com mais detalhes a variação da difusão de portadores em função do campo elétrico. Para cada potencial aplicado, foi realizada uma varredura da  $\mu$ PL, como mostram as figuras 54 e 56 referentes as amostras 1522 e 1523 respectivamente. As curvas de varredura foram normalizadas para possibilitar a comparação entre os diversos potenciais aplicados. A curva vermelha corresponde a varredura do spot do laser, identificando assim a região de excitação da amostra. A equação 4.5 foi utilizada como ajuste Gaussiano de todas as curvas de varredura obtidas. Desta maneira, os valores da largura à meia altura ( $\Delta$ ) correspondente a cada comprimento de onda e a cada potencial aplicado foram plotados, como mostram as figuras 55 e 57 representando as amostras 1522 e 1523 respectivamente. A figura 55 possui dois gráficos referentes à varredura em duas diferentes direções na superfície da amostra, mostrado pelos desenhos no interior de cada gráfico. Estas medidas nas duas direções foram realizadas para demonstrar a reprodutibilidade do perfil obtido nestes resultados.

A partir da figura 57 é possível observar que, assim como na amostra 1521, a difusão correspondente às barreiras de GaAs em 846 nm não sofreu nenhuma influência com o aumento do campo elétrico. Este resultado já era esperado uma vez que foi comprovado através da intensidade de  $\mu$ PL para o GaAs (figura 46) que estas barreiras não são afetadas pelo potencial elétrico aplicado. Este mesmo efeito foi observado na amostra 1522, porém este resultado foi omitido da figura 55 para melhor visualização das outras curvas.

Fazendo a comparação entre as medidas da largura à meia altura de todas as amostras figuras 53, 55 e 57, pode-se observar que o efeito de difusão de portadores para as transições correspondentes aos QDs ( $E_2$ ,  $E_3$  e  $E_4$ ) possui o mesmo perfil para todas as amostras, sendo mais pronunciada para as amostras 1522 e 1523. Esta diferença de variação entre as amostras está relacionado com a diferença nas camadas relacionadas a região intrínseca, mostrada na figura 47. A interpretação para o aumento do efeito de difusão de portadores com o potencial aplicado vincula a terceira suposição feita para explicar uma possível maneira de transferência de cargas entre os QDs com o confinamento quântico proporcionado pelos QDs. Com o aumento do potencial elétrico direto (figura 28 (b)) ocorre a redução da barreira de potencial na região intrínseca proporcionando um maior confinamento aos portadores (figura 44 (b)). Para facilitar a compreensão, considera-se

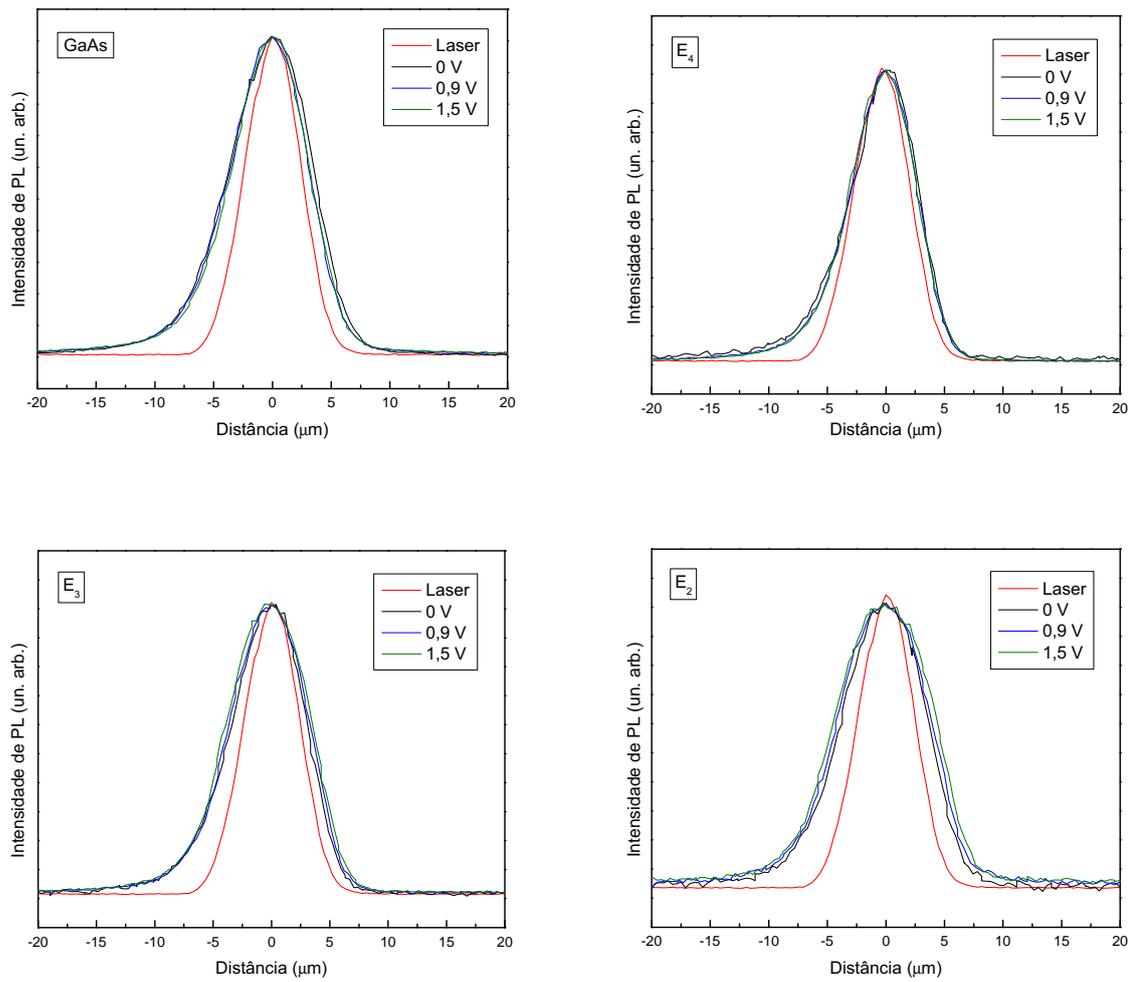


Figura 56: Varredura superficial da  $\mu\text{PL}$  referente a amostra 1523, para os valores de comprimentos de onda indicados na figura 46, variando o potencial aplicado de 0 a 1,5V.

a condição de que o campo elétrico na região intrínseca seja nulo (i.e.  $V_i = V_a$ ). Desta forma, o único processo de transporte de portadores que ocorre é o de difusão lateral, como mostra a figura 50 (a) e (b). Entretanto, com o aumento do campo elétrico na região intrínseca, os portadores estão sujeitos a uma combinação dos processos de difusão e condução, como mostra a figura 50 (c).

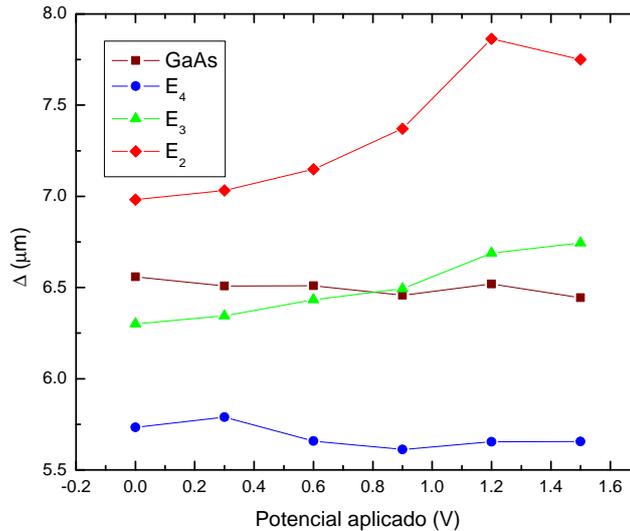


Figura 57: Valores da largura à meia altura obtida pelo ajuste gaussiano das curvas mostradas na figura 56 em função do potencial aplicado.

Portanto, considera-se que os portadores estão sendo gerados nas barreiras de GaAs difundindo-se lateralmente e sendo conduzidos verticalmente pelo campo elétrico até serem capturados pelos QDs. Este processo de geração, difusão, condução e captura nos QDs acontece continuamente, uma vez que a fonte de excitação é contínua. Quando capturados nos QDs, os pares elétrons-buraco podem se recombinar ou tunelar indo para os contatos metálicos e se transformando em corrente elétrica. Desta forma, o processo de difusão de portadores será mais pronunciada quanto maior for o confinamento proporcionado pelos QDs. Como foi explicado anteriormente, a variação do confinamento possui uma relação diretamente proporcional com o tempo de tunelamento, dado pela equação 4.4. Por outro lado, com o aumento do potencial elétrico direto, o confinamento dos pares nos QDs aumenta, proporcionando desta forma a recombinação, e possibilitando todavia a visualização do efeito de difusão.

Outro fenômeno importante que pode ser observado através das figuras 53, 55 e 57 é a de que os valores de  $\Delta$  são maiores para maiores comprimentos de onda. Este fato serviu como motivação para realizar uma investigação sobre este efeito, que está mostrada na

seção posterior.

#### 4.4.1 Varredura Superficial da Microluminescência em Função do Comprimento de Onda

Os resultados de varredura da microluminescência relacionado aos QDs mostrados na seção anterior revelam que o efeito de difusão é maior para maiores comprimentos de onda. Desta forma, para compreender qual é o real comportamento da difusão de portadores em função do comprimento de onda, foram realizadas várias medidas de varredura na amostra 1523 sem nenhum potencial elétrico aplicado. Algumas destas curvas estão mostradas pela figura 58 (à esquerda). Estas medidas foram obtidas nas mesmas condições descritas anteriormente. As curvas foram ajustadas pela equação 4.5 e os valores de  $\Delta$  foram plotados em função do comprimento de onda, como mostra a figura 58 (à direita).

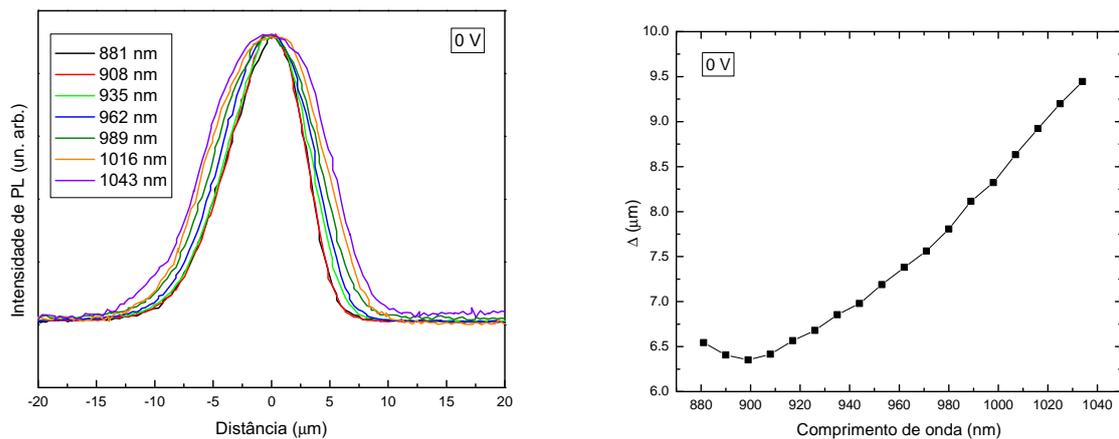


Figura 58: Varredura superficial da  $\mu\text{PL}$  referente a amostra 1523 para diversos valores de comprimentos de onda (à esquerda), e a medida da largura à meia altura  $\Delta$  de cada curva em função do comprimento de onda (à direita).

É possível observar através da figura 58 que a partir de 900  $\text{nm}$ , os valores de  $\Delta$  aumentam linearmente com o comprimento de onda. Os valores menores que 900  $\text{nm}$  podem estar sendo afetados pela emissão relacionada ao defeito de carbono do GaAs posicionada em torno de 870  $\text{nm}$ , figura 46. Este fenômeno do aumento da difusividade de portadores para maiores comprimentos de onda pode ser associado ao fato de que ao serem capturados pelos QDs, os portadores procuram os estados de menor energia. Este processo está ilustrado na figura 59 onde uma concentração de portadores são gerados nas barreiras de GaAs em uma região de excitação demarcada pela linha pontilhada. A

partir do momento que os portadores são gerados nas barreiras, eles difundem para regiões distantes da região de excitação. A concentração de portadores instantâneos depois de serem gerados, pode ser representado por uma Gaussiana, mostrada na figura 59. Como uma pequena concentração de portadores conseguem atingir distâncias maiores, estes por sua vez são capturados pelos QDs ocupando os estados de menor energia. Portanto, é de se esperar que comprimentos de onda maiores (menores energias) sejam mais privilegiados pelo processo de difusão de portadores. Este efeito deve ser menos evidente quanto maior for o campo elétrico na região intrínseca, uma vez que o campo elétrico possibilita que os portadores escapem por meio de tunelamento para os contatos elétricos.

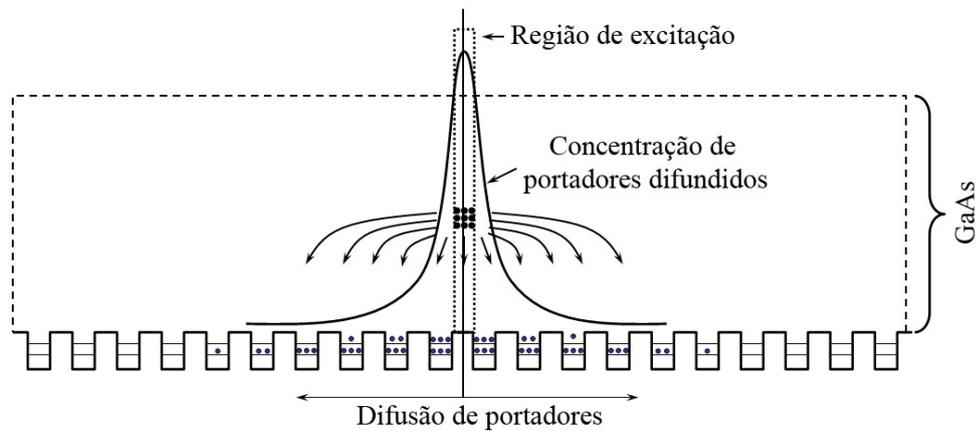


Figura 59: Ilustração esquemática do processo de difusão de elétrons gerados por um feixe que incide na região de excitação seguido da captura dos mesmos pelos pontos quânticos de InAs.

## 4.5 Microluminescência em Função da Intensidade de Excitação

As propriedades de discretização da densidade de estados, a alta eficiência de captura e o longo tempo de vida ( $\sim 1$  ns) que caracterizam os sistemas de QDs, proporcionam um interessante efeito não linear [49]. Um exemplo claro é o de preenchimento dos estados que pode ser observado nos experimentos de fotoluminescência quando se varia a intensidade de excitação. Para se observar estes comportamentos, vários espectros de  $\mu$ PL foram obtidos para diferentes intensidades de excitação. Como o laser utilizado na excitação possui uma potência de saída fixa de 2,92 mW, foi necessário variar o diâmetro do *spot* incidente de maneira a obter diferentes valores de intensidade de excitação. Para cada *spot* do laser foi realizado uma varredura de modo a obter precisamente o valor do diâmetro do mesmo, como mostra a figura 60 (à esquerda). Estes valores foram utilizados para

calcular a área da região de excitação na superfície da amostra. Desta forma, foi possível obter intensidades variando entre  $1,5 \times 10^3$  e  $1,6 \times 10^4 \text{ W/cm}^2$ . Para cada varredura do *spot* do laser, foi obtido um espectro de  $\mu\text{PL}$  de forma a associar cada intensidade  $I_{PL}$  nos pontos mostrados por setas na figura 60 (à direita) a intensidade de excitação  $I_{exc}$ . Estas medidas de  $I_{PL}$  em função de  $I_{exc}$  estão mostradas na figura 61. Todas estas medidas foram realizadas à temperatura de 77 K mantendo o dispositivo a 0 V.

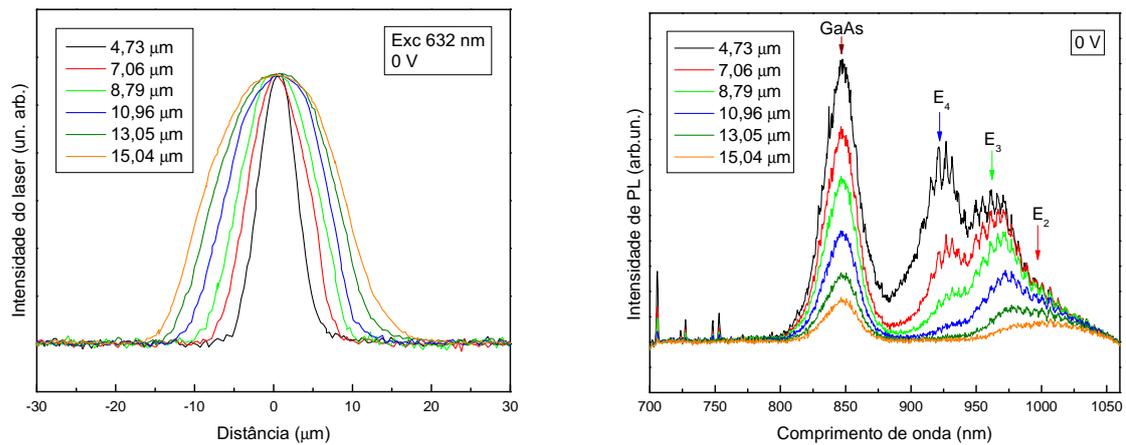


Figura 60: Varredura superficial do *spot* do laser (à esquerda) utilizado para excitar a amostra 1523. Espectros de  $\mu\text{PL}$  referente a cada *spot* de excitação (à direita).

A partir da figura 60 (à direita), observa-se que quando a intensidade de excitação é aumentada gradualmente os estados de menor energia referente aos QDs vão sendo preenchidos até atingirem uma intensidade máxima de saturação. Neste ponto, pode-se dizer que todos os estados daquele nível para todos os QDs imersos na região de excitação estão preenchidos. A partir deste ponto de saturação, os estados correspondentes aos níveis de energia maiores vão sendo preenchidos da mesma forma até saturar. A explicação para esta relação entre as intensidades de excitação e emissão pode ser dada a partir da relação entre as taxas de geração, recombinação e as concentrações de portadores. Como foi discutido na seção 2.2, no regime estacionário, ou sobre excitação contínua, a taxa de geração de portadores  $G$  tende a igualar à taxa total de recombinação de portadores  $R$ . Sabe-se que a taxa de recombinação total é igual a soma da taxa de recombinação radiativa, que como foi visto na equação 2.55, é proporcional a  $n^2$ , mais a taxa de recombinação não-radiativa que depende apenas de  $n$  [55], desta forma é possível escrever que

$$G = an^2 + bn \quad (4.6)$$

onde  $a$  e  $b$  representam os coeficientes das taxas de recombinação radiativa e não-radiativa respectivamente. Considerando que a taxa de recombinação é proporcional à intensidade de excitação  $I_{exc}$ , e a intensidade de fotoluminescência  $I_{PL}$  ao quadrado da concentração de portadores  $n^2$ , conclui-se que

$$I_{exc} = a' I_{PL} + b' \sqrt{I_{PL}} \quad (4.7)$$

Portanto o termo  $a' I_{PL}$  da equação 4.7 está relacionado com a recombinação radiativa, e o termo  $b' (I_{PL})^{1/2}$  está relacionado com a recombinação não-radiativa. Desta maneira, em um gráfico *log-log* as componentes lineares podem ser associadas a recombinação radiativa, ou seja, a própria fotoluminescência, enquanto que as componentes não-lineares estão associadas aos processos não-radiativos, que pode ser relaxação entre níveis de um mesmo QD.

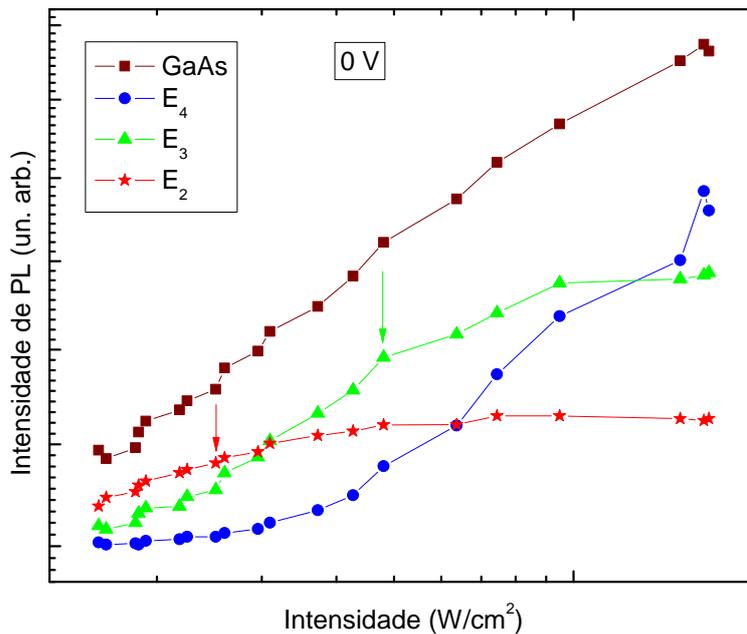


Figura 61: Intensidade de PL em cada ponto mostrado por setas na figura 60 em função da largura do *spot* do laser.

A figura 61 mostra que a variação da intensidade de PL com a intensidade de excitação para o GaAs possui um perfil linear. Este fato já era esperado uma vez que o GaAs está presente no dispositivo na forma *bulk*, isto significa que a quantidade de estados acessíveis é muito maior que a concentração de pares elétron-buraco fotogerados. Desta forma,

a maioria dos pares podem recombinar radiativamente, proporcionando uma reta com inclinação 0,14 mostrado na figura 61. Analisando esta mesma figura para o caso das emissões relacionadas aos QDs, pode-se observar que para o estado de menor energia  $E_2$ , a curva  $\log I_{PL} \times \log I_{exc}$  possui um perfil linear com a inclinação de 0,08 até a intensidade de  $2,6 \times 10^3 W/cm^2$  indicada pela seta vermelha. Esta região linear representa o intervalo de intensidade de excitação que proporcionou o preenchimento total do nível  $E_2$ . A partir desta intensidade, os valores de  $I_{PL}$  atingem um patamar de saturação, e as transições não-radiativas começam a ser predominantes. A mesma coisa acontece para o estado  $E_3$ , onde um perfil linear com inclinação 0,05 pode ser observado até o valor de intensidades  $4,8 \times 10^3 W/cm^2$  indicado pela seta verde na figura 61. Da mesma forma que no nível  $E_2$ , esta intensidade de excitação indica que os valores de  $I_{PL}$  chegaram a uma posição de saturação a partir da qual outras transições não-radiativas surgem. Também é possível observar a partir da figura 61 que os valores de  $I_{PL}$  para o estado de maior energia  $E_4$  posicionado em  $921 nm$  não alcançaram o patamar de saturação. Isto não foi possível pois a intensidade máxima de excitação adquirida foi obtida através do limite do menor *spot*.

## 5 Conclusão

Neste trabalho, foi realizado o estudo dos processos de transferência de energia entre multicamadas de pontos quânticos auto-organizados de InAs, localizados na região intrínseca de um dispositivo do tipo *p-i-n*. Para concretizar este estudo, foram realizadas várias investigações utilizando a técnica de  $\mu$ PL resolvida espectralmente e espacialmente, em função do campo elétrico aplicado perpendicularmente ao plano onde estão os QDs, da intensidade de excitação e da energia de recombinação.

Foi possível identificar a emissão correspondente ao GaAs, que forma as barreiras de potencial, e mais cinco bandas de emissão relacionadas aos estados  $E_0$ ,  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$  e  $E_4$  dos pontos quânticos de InAs. Os valores da intensidade de  $\mu$ PL do GaAs não sofreram nenhuma influência com o campo elétrico, uma vez que este semiconductor estava presente nas amostras em forma de *bulk*, não proporcionando desta forma nenhum confinamento aos portadores. Por outro lado, foi possível verificar uma forte influência do campo elétrico na intensidade de emissão dos pontos quânticos. A variação da intensidade de  $\mu$ PL com o campo elétrico foi associada com a mudança na geometria das barreiras triangulares proporcionadas pelos QDs sob efeito do campo elétrico aplicado. De acordo com a aproximação (WKB), o tempo de tunelamento dos elétrons e buracos são fortemente influenciados pelo campo elétrico, explicando assim a variação da intensidade da fotoluminescência com o aumento do potencial inverso aplicado.

As medidas da varredura superficial da  $\mu$ PL mostraram que o transporte de cargas no GaAs não sofreu nenhuma influência do campo elétrico. Este fato já era previsto, uma vez que as medidas de  $\mu$ PL resolvidas espectralmente mostraram que as emissões do GaAs não são influenciadas pelo potencial aplicado. Por outro lado, foi verificado um interessante acréscimo da transferência de energia entre os QDs com a diminuição do campo elétrico na região intrínseca. Os processos de transferência de energia entre os QDs foram associados às correntes de difusão de portadores nas barreiras, juntamente com o processo de ativação térmica. Foi possível concluir que o aumento da transferência de energia ocorreu devido ao aumento do confinamento quântico proporcionado pelos QDs

no regime de baixo campo elétrico na região intrínseca.

Os resultados das medidas de  $\mu$ PL resolvida espacialmente em função do comprimento de onda evidenciam que a transferência de energia entre os QDs diminui linearmente com a energia de recombinação dos portadores. Concluiu-se que devido à natureza Gaussiana da distribuição de portadores difundidos, a concentração de pares que alcançam longas distâncias é menor, preenchendo preferencialmente somente os estados dos níveis de menor energia dos QDs.

Por fim, foi possível identificar a partir das medidas de  $\mu$ PL em função da intensidade de excitação o efeito de preenchimento de estados dos pontos quânticos. Esta conclusão foi baseada na observação das curvas da intensidade de PL ( $I_{PL}$ ) em função da intensidade de excitação ( $I_{exc}$ ) na escala  $\log - \log$ . Foi verificado que o GaAs possui um perfil linear para todos os valores de  $I_{exc}$ , isto implica que a quantidade de estados disponíveis no GaAs é muito maior que a quantidade de pares fotogerados, predominando desta maneira os processos de recombinação radiativo. No caso dos QDs, foi observado que os estados de menor energia foram preenchidos preferencialmente até alcançar um patamar de saturação. Este preenchimento é evidenciado por uma curva linear crescente em  $\log I_{PL} \times \log I_{exc}$  durante o qual há predominância dos processos de recombinação radiativa. A partir deste patamar de saturação surgem os processos de recombinação não-radiativa associado as relaxações entre níveis.

## 5.1 Perspectivas e Futuros Trabalhos

- Implementar nas equações de taxa para elétrons e buracos a contribuição da corrente de difusão.
- Estudar o efeito da variação da temperatura na luminescência e na transferência de energia sob presença de campo elétrico aplicado.
- Realizar medidas de varredura superficial da  $\mu$ PL em função da intensidade de excitação e da energia de recombinação para vários potenciais aplicados.

## *Referências*

- [1] GAMMON, D. Electrons in Artificial Atoms. *Nature*, v. 405, p. 899, jun. 2000.
- [2] HARRIS, L.; MOWBRAY, D. J.; SKOLNICK, M. S.; HOPKINSON, M. and HILL, G. Emission Spectra and Mode Structure of InAs/GaAs Self-organized Quantum Dot Lasers. *Appl. Phys. Lett.*, v. 73, p. 969, ago. 1998.
- [3] MAIMON, S.; FINKMAN, E.; BAHIR, G.; SCHACHAM, S. E.; GARCIA J. M. and PETROFF P. M. Intersublevel Transitions in InAs/GaAs Quantum Dots Infrared Photodetectors. *Appl. Phys. Lett.*, v. 73, p. 2003, out. 1998.
- [4] LUNDSTROM, T.; SCHOENFELD, W.; LEE, H. and PETROFF, P. M. Exciton Storage in Semiconductor Self-Assembled Quantum Dots. *Science*, v. 286, p. 2312, dez. 1999.
- [5] MOSKALENKO, E. S.; LARSSON, M.; KARLSSON, K. F.; HOLTZ, P. O.; MON-EMAR, B.; SCHOENFELD, W. V.; and PETROFF, P. M. Enhancement of the Luminescence Intensity of InAs/GaAs Quantum Dots Induced by an External Electric Field. *Nano Letters*, v. 7, p. 188, out. 2006.
- [6] MOSKALENKO, E. S.; DONCHEV, V.; KARLSSON, K. F.; HOLTZ, P. O.; MON-EMAR, B.; SCHOENFELD, W. V.; GARCIA, J. M.; and PETROFF, P. M. Effect of an Additional Infrared Excitation on the Luminescence Efficiency of a Single InAs/GaAs Quantum Dot. *Phys. Rev. B*, v. 68, p. 155317, abr. 2003.
- [7] CHAIB, J. P. M.; DA SILVA, S. W.; MONTE, A. F. G. and MORAIS, P. C. Electric Field Effects on the Spatial Energy Transport in Self-assembled Quantum Dots. *Journ. of Phys. D*, v. 41, p. 105104, abr. 2008.
- [8] PIERCE, G. W. Crystal rectifiers for electric currents and electric oscillations. Part I. carborundum. *Phys. Rev.*, v. (, p. S, eries I) 2531mai. 1907.
- [9] NEAMEN, D. A. **Semiconductor Physics and Devices: Basic Principles**. University of New Mexico: McGraw-Hill, 3rd ed., 2003.
- [10] ASHCROFT, N. W. e MERMIN, N. D. **Solid State Physics**. Cornell University: Saunders College Publishing, 1976.
- [11] HUMMEL, R. E. **Electronic Properties of Materials**. Berlim: Springer-Verlag, 2001.
- [12] RAMSTAD, A.; BROCKS, G. and KELLY, P. J. Theoretical Study of the Si(100) Surface Reconstruction. *Phys. Rev. B*, v. 51, p. 14504, mai. 1995.

- [13] SZE, S. M. **Semiconductor Devices, Physics and Technology**. AT&T Bell Laboratories: John Wiley & Sons, 1985.
- [14] TYAGI, M. S. **Introduction to Semiconductor Materials and Devices**. Indian Institute of Technology: John Wiley & Sons, 1991.
- [15] VAN ZEGHBROECK, B. **Principles of Semiconductor Devices**. Livro online disponível em: <http://ece-www.colorado.edu/~bart/book/>. acesso em 02 mar. 2009.
- [16] HARRISON, P. **Quantum Wells, Wires and Dots**. University of Leeds: John Wiley & Sons, 2005.
- [17] REZENDE, S. M. **Materiais e Dispositivos Eletrônicos**. Universidade Federal de Pernambuco: Livraria da Física, 2<sup>a</sup> edição, 2004.
- [18] DAVIES, J. H. **The Physics of Low-Dimensional Semiconductor**. Glasgow University: Cambridge University Press, 1998.
- [19] KELLY, M. J. **Low-dimensional Semiconductors: Materials, Physics and Technology**. Oxford University Press, 1995.
- [20] SCHERER, A. and CRAIGHEAD, H.G. Fabrication of Small Laterally Patterned Multiple Quantum Wells. *Appl. Phys. Lett.*, v. 49, p. 1284, set. 1986.
- [21] GOLDSTEIN, L.; GLAS, F.; MARZIN, J.Y.; CHARASSE, M.N. and LE ROUX, G. Growth by Molecular Beam Epitaxy and Characterization of InAs/GaAs Strained-layer Superlattices. *Appl. Phys. Lett.*, v. 47, p. 1099, set. 1985.
- [22] BIMBERG, D; GRUNDMANN, M and LEDENSTOV, N. N. **Quantum Dot Heterostructures**. John Wiley & Sons, 1998.
- [23] CARLSSON, N.; SEIFERT, W.; PETERSSON, A.; CASTRILLO, P.; PISTOL, M. E. and Samuelson, L. Study of the Two-dimensional-Three-dimensional Growth Mode Transition in Metalorganic Vapor Phase Epitaxy of GaInP/InP Quantum-sized Structures. *Appl. Phys. Lett.*, v. 65, p. 3093, out. 1994.
- [24] GEORGSSON, K.; CARLSSON, N.; SAMUELSON, L.; SEIFERT, W. and WALLENBERG, L. R. Transmission Electron Microscopy Investigation of the Morphology of InP Stranski-Krastanow Islands Grown by Metalorganic Chemical Vapor Deposition. *Appl. Phys. Lett.*, v. 67, p. 2981, set. 1995.
- [25] THIBADO, P. M.; BENNETT, B. R.; TWIGG, M. E.; SHANABROOK, B. V. and WHITMAN, L.J. Evolution of GaSb Epitaxy on GaAs(001)-c(4 × 4). *J. Vac. Sci. Technol. A*, v. 14, p. 885, jan. 1996.
- [26] FERRER, J.C.; PEIRÓ, F.; CORNET, A.; MORANTE, J. R.; UZTMEIER, T.; ARMELLES, G. and BRIONES, F. Self-assembled Quantum Dots of InSb Grown on InP by Atomic Layer Molecular Beam Epitaxy: Morphology and Strain Relaxation. *Appl. Phys. Lett.*, v. 69, p. 3887, out. 1996.
- [27] TANAKA, S.; IWAI, S. and AOYAGI, Y. Self-assembling GaN Quantum Dots on  $Al_xGa_{1-x}N$  Surfaces Using a Surfactant. *Appl. Phys. Lett.*, v. 69, p. 4096, out. 1996.

- [28] LOWISCH, M.; RABE, M.; STEGEMANN, B.; HENNEBERGER, F.; GRUNDMANN, M.; TURCK, V. and BIMBERG, D. Zero-dimensional Excitons in (Zn,Cd)Se Quantum Structures. *Phys. Rev. B*, v. 16, p. R11074, jul. 1996.
- [29] HOMMEL, D.; LEONARDI, K.; HEINKE, H.; SELKE, H.; OHKAWA, K.; GINDELE, F. and WOGGON, U. CdSe/ZnSe Quantum Dot Structures: Structural and Optical Investigations. *Phys. Stat. Sol.*, v. 202, p. 835, 1997.
- [30] CIRLIN, G. E.; DUBROVSKII, V. G.; PETROV, V. N.; POLYAKOV, N. K.; KORNEEVA, N. P.; DEMIDOV, V. N.; GOLUBOK, A. O.; MASALOV, S. A.; KUROCHKIN, D. V.; GORBENKO, O. M.; KOMYAK, N. I.; USTINOV, V. M.; TSATSUL'NIKOV, A. F.; ALFEROV, Zh. I.; LEDENSTOV, N. N.; GRUNDMANN, M. and BIMBERG, D. Formation of InAs Quantum Dots on a Silicon (100) Surface. *Semicond. Sci. Technol.*, v. 13, p. 1262, jul. 1998.
- [31] MONTE, A. F. G.; CRUZ, J. M. R. and MORAIS P. C. An Experimental Design for Microluminescence. *Rev. Sci. Instrum.*, v. 68, p. 3890, out. 1997.
- [32] Disponível em: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/index.html>. acesso em 12 fev. 2009.
- [33] STRANSKI, I. N. and KRASTANOW, L. *Sitzungsber. Akad. Wiss. Wien*, v. 146, p. 797, 1938.
- [34] FRY, P. W.; ITSKEVICH, I. E.; PARNELL, S. R.; FINLEY, J. J.; WILSON, L. R.; SCHUMACHER, K. L.; MOWBRAY, D. J.; SKOLLNICK, M. S.; AL-KHAFAJI, M.; CULLIS, A. G.; HOPKINSON, M.; CLARK, J. C. and HILL, G. Photocurrent Spectroscopy of InAs/GaAs Self-assembled Quantum Dots. *Phys. Rev. B*, v. 62, p. 16784, dez. 2000.
- [35] SCHUBERT, E. F. **Light-Emitting Diodes**. Rensselaer Polytechnic Institute: Cambridge University Press, 2006.
- [36] ASPNES, D. E. GaAs Lower Conduction-band Minima: Ordering and Properties. *Phys. Rev. B*, v. 14, p. 5331, dez. 1976.
- [37] CHAIB, J. P. M. C. **Efeito do Campo Elétrico na Transferência de Energia Entre Pontos Quânticos Auto-organizados de InAs/GaAs**, Tese (mestrado em Física) - Instituto de Física da Universidade de Brasília, 2004.
- [38] **QE65000 Scientific-grade Spectrometer**, Manual do equipamento - Ocean Optics, Inc., Dunedin, FL, USA, 2007.
- [39] DANTAS, N. O.; MONTE, A. F. G.; FANYAO QU; SILVA, R. S. and MORAIS, P. C. Energy Transfer in PbS Quantum Dots Assemblies Measured by Means of Spatially Resolved Photoluminescence. *Appl. Surf. Sci.*, v. 238, p. 209, ago. 2004.
- [40] DE SALES F. V.; SILVA, S. W.; CRUZ, J. M. R.; MONTE, A. F. G.; SOLER, M. A. G. and MORAIS, P. C. Indications of Amplified Spontaneous Emission in the Energy Transfer Between InAs Self-assembled Quantum Dots. *Phys. Rev. B*, v. 70, p. 235318, dez. 2004.

- [41] NISHIBAYASHI, K.; KAWAZOE, T.; OHTSU, M.; AKAHANE, K. and YAMAMOTO, N. Observation of Interdot Energy Transfer Between InAs Quantum Dots. *Appl. Phys. Lett.*, v. 93, p. 042101, jul. 2008.
- [42] MARQUES, F. A. M.; MONTE, A. F. G.; HOPKINSON, M. Electric Field Effects on the Carrier Migration in Self-assembled InAs/GaAs Quantum Dots. *Microelectron. J.*, v. 40, p. 838, 2009.
- [43] MONTE, A. F. G.; DE SALES, F. V.; DA SILVA, S. W.; SOLER, M. A. G.; CRUZ, J. M. R.; MORAIS, P. C.; DA SILVA, M. J.; QUIVY, A. A.; LEITE, J. R. Photoexcited Carrier Diffusion in Self-assembled InAs/GaAs Quantum Dots With Different Dot Densities. *Physica E*, v. 17, p. 122, 2003.
- [44] MONTE, A. F. G.; DE SALES, F. V.; FINLEYA, J. J.; FOX, A. M.; DA SILVA, S. W.; MORAIS, P. C.; SKOLNICK, M. S.; HOPKINS, M. Time-resolved Measurements and Spatial Photoluminescence Distribution in InAs/AlGaAs Quantum Dots. *Microelectron. J.*, v. 34, p. 747, 2003.
- [45] DAVID, M.-T.; KUO e YIA-CHUNG CHANG. Electron Tunneling Rate in Quantum Dots Under a Uniform Electric Field. *Phys. Rev. B*, v. 61, p. 11051, abr. 2000.
- [46] BRACKER, A. S.; SCHEIBNER, M.; DOTY, M. F.; STINAFF, E. A.; PONOMAREV, I. V.; KIM, J. C.; WHITIMAN, L. J.; REINECKE, T. L. and GAMMON, D. Engineering Electron and Hole Tunneling With Asymmetric InAs Quantum Dot Molecules. *Appl. Phys. Lett.*, v. 89, p. 233110, out. 2006.
- [47] HEITZ, R.; MUKHAMETZHANOV, I.; CHEN, P. and MADHUKAR, A. Excitation Transfer in Self-organized Asymmetric Quantum Dot Pairs. *Phys. Rev. B*, v. 58, p. 10151, out. 1998.
- [48] HUFFAKER, D. L. e DEPPE, D. G. Electron and Hole Tunneling in a Moderate Density Quantum Dot Ensemble With Shallow Confinement Potentials. *Appl. Phys. Lett.*, v. 73, p. 366, jul. 1998.
- [49] TACKEUCHI, A.; KURODA, T.; MASE, K.; NAKATA, Y. and YOKOYAMA, N. Dynamics of Carrier Tunneling Between Vertically Aligned Double Quantum Dots. *Phys. Rev. B*, v. 62, p. 1568, jul. 2000.
- [50] LUBYSHEV, D. I.; GONZALEZ-BORRERO, P. P.; MAREGA, E.; PETITPREZ, E.; LA SCALA, N. and BASMAJI, P. Exciton Localization and Temperature Stability in Self-organized InAs Quantum Dots. *Appl. Phys. Lett.*, v. 68, p. 205, out. 1995.
- [51] POLIMENI, A.; PATANÈ, A.; HENINI, M.; EAVES, L. and MAIN, P. C. Temperature Dependence of the Optical Properties of InAs/ $Al_yGa_{1-y}As$  Self-organized Quantum Dots. *Phys. Rev. B*, v. 59, p. 5064, fev. 1999.
- [52] MONTE, A. F. G.; FINLEY, J. J.; ASHMORE, A. D.; FOX, A. M.; MOWBRAY, D. J. and SKOLNICK, M. S. Carrier Dynamics in Short Wavelength Self-assembled InAs/ $Al_{0.6}Ga_{0.4}As$  Quantum Dots With Indirect Barriers. *Journ. of Appl. Phys.*, v. 93, p. 3524, mar. 2003.

- [53] LOBO, C.; LEON, R.; MARCINKEVICIUS, S.; YANG, W.; SERCEL, P. C.; LIAO, X. Z.; ZOU, J. and COCKAYNE, D. J. H. Inhibited Carrier Transfer in Ensembles of Isolated Quantum Dots. *Phys. Rev. B*, v. 60, p. 16647, dez. 1999.
- [54] SOBOLEV, M. M.; KOVSH, A. R.; USTINOV, V. M.; EGOROV, A. Yu.; ZHUKOV, A. E.; MAKSIMOV, M. V. and LEDENTSOV, N. N. Deep-level Transient Spectroscopy in InAs/GaAs Laser Structures With Vertically Coupled Quantum Dots. *Semiconductors*, v. 31, p. 1249, out. 1997.
- [55] AKTIENGESELLSCHAFT, S. **Semicondutores**. Siemens AG: Edgard Blücher, 1973.

## *APÊNDICE A – Resumos e Artigos*

### **A.1 Resumos em congressos**

Resumos apresentados em congressos, encontros e escolas especializadas:

★ **F. A. M. Marques, Adamo F. G. do Monte, José R. K. F. Santos e Mark Hopkinson**, *Spatially Resolved Microluminescence Investigation in Quantum Dots*, XXXI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Maio de 2008, Águas de Lindoia - SP

★ **F. A. M. Marques, José R. K. F. Santos, Andre Rezende, Adamo F. G. do Monte e Mark Hopkinson**, *Influence of Electric Field on Spatially Resolved Microluminescence of Semiconductor Quantum Dots*, VI Encontro Regional da Sociedade Brasileira de Física, Outubro de 2008, Ouro Preto - MG

★ **F. A. M. Marques, Adamo F. G. do Monte e Mark Hopkinson**, *Determination of Maximum Carrier Propagation in InAs/GaAs Quantum Dots With External Applied Bias*, 14<sup>th</sup> Brazilian Workshop on Semiconductor Physics, Março de 2009, Curitiba - PR

★ **F. A. M. Marques, A. R. F. Oliveira, G. A. Alves, A. F. dos Reis, Adamo F. G. do Monte e Mark Hopkinson**, *Influence of External Electric Field on the Carrier Diffusion in InAs/GaAs Quantum Dots*, XXXII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Maio de 2009, Águas de Lindoia - SP

### **A.2 Artigos em Revistas Especializadas**

Artigo publicado em revistas indexadas:

★ **F. A. M. Marques, Adamo F. G. do Monte e Mark Hopkinson**, *Electric Field Effects on the Carrier Migration in Self-assembled InAs/GaAs Quantum Dots*, *Microelectron. J.*, vol. 40, pp. 838-840, (2009).

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)