

**Universidade Estadual de Campinas**  
Instituto de Física “Gleb Wataghin”

---

**Laser de Faces Clivadas com Regiões Ativas**  
**Nanoestruturadas Bombeados por Injeção Eletrônica**

---

por

José Roberto Mialichi

**Orientação:** Prof. Dr. Newton Cesário Frateschi

Este exemplar  
corresponde à redação  
final da tese de mes-  
trado defendida pelo  
aluno José Roberto Mi-  
alichi e aprovada pela  
comissão julgadora.

Dissertação de Mestrado apresentada ao Instituto de Física “Gleb Wataghin” da Universidade Estadual de Campinas para a obtenção do Título de Mestre em Ciências.

- Março de 2006 -

Campinas, 05 de Maio  
de 2008

Teut A. L.

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP**

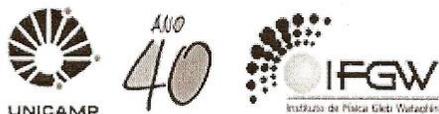
M58L Mialichi, José Roberto  
Laser de faces clivadas com regiões ativas nanoestruturadas  
bombeados por injeção eletrônica / José Roberto Mialichi. --  
Campinas, SP : [s.n.], 2006.

Orientador: Newton Cesário Frateschi.  
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de  
Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".

1. Lasers semicondutores. 2. Nanoestrutura. 3. Ganho  
ótico. I. Frateschi, Newton Cesário. II. Universidade Estadual  
de Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.

- **Título em inglês:** Cleaved face laser with nanostructured active region pumped by electronic injection
- **Palavras-chave em inglês (Keywords):**
  1. Semiconductor lasers
  2. Nanostructures
  3. Optical gain
- **Área de concentração:** Física da Matéria Condensada
- **Titulação:** Mestre em Física
- **Banca examinadora:**

Prof. Newton Cesário Frateschi  
Prof. Mauro Monteiro Garcia de Carvalho  
Prof. Maurício Pamplona Pires
- **Data da defesa:** 31.03.2006
- **Programa de Pós-Graduação em:** Física



Secretaria de Pós-Graduação - Tel: (19) 3788-5305 FAX: (19) 3788-4142

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE **JOSÉ ROBERTO MIALICH I – RA 001888**, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN” DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 31/03/2006.

**COMISSÃO JULGADORA:**

Prof. Dr. Newton Cesário Frateschi (Orientador do Candidato)  
DFA/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Mauro Monteiro Garcia de Carvalho – DFA/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Maurício Pamplona Pires – IF/UFRJ/RJ



“Porque um dia é preciso parar de sonhar,  
tirar os planos da gaveta e, de algum  
modo, começar.” (Amir Klink)

## Necessidade Imutável

*“... o conhecimento do próprio sentir, das próprias habilidades de todo gênero e de seus limites imutáveis é o caminho mais seguro para chegar ao maior contentamento possível de si mesmo. Pois aquilo que vale para as circunstâncias internas vale para as externas: ou seja, para nós o único consolo eficaz está na total certeza da necessidade imutável.” (Schopenhauer)*

A meus pais, Dirce Sartorello Mialichi e José Mialichi.

## **Agradecimentos**

---

Agradeço ao Professor Newton Cesário Frateschi, pela imprescindível atuação como um orientador criativo e incentivador durante todo o trabalho.

Agradeço aos professores do grupo LPD, especialmente ao professor Mauro Carvalho, que direta ou indiretamente, me deram subsídios e me incentivaram neste processo.

Agradeço aos técnicos e funcionários do LPD, A. A. Von Zuben, Hélio Tobata, Ary, Celso, Márcia e a Rosa pelos serviços que me prestaram sem medir esforços.

Agradeço aos colegas de trabalho, Adenir da Silva, David Figueira, Luís Barea, Felipe Vallini, Paulo Jarschel, Júlio Bertin, Tácita Ramos, Guilherme Zelcovit e Luis Nieto pela significativa colaboração e companheirismo.

Agradeço aos funcionários da CPG, especialmente à Maria Ignez, Armando e Cássia pela presteza e facilitação burocrática para meu acesso ao título.

Agradeço aos meus amigos, Felipe Modenese, Fernando Rossi, Danilo Mustafa, Bruno Martins, Giovana Gadioli, Lorena Mundim, Mariana Vieira e Luana Caron pelo companheirismo.

Agradeço à Camila Volpe e a toda minha família pelo amor, compreensão, paciência e apoios incansáveis.

Agradeço ao CNPQ, pelo apoio financeiro.

“O temor do Senhor é o princípio do conhecimento...” (Pv 1:7)

## Resumo

---

Esta dissertação de mestrado apresenta estudos teóricos sobre o cálculo de ganho óptico em nanoestruturas baseadas no sistema InGaAs/InGaAsP. A partir da teoria de perturbação dependente do tempo, cuja perturbação é a interação de uma onda eletromagnética-matéria, e da teoria de Kane para a estrutura de bandas de semicondutores que relaciona a matriz de transição envolvida nos processos radiativos com parâmetros experimentais desta mesma banda, desenvolvemos todo o formalismo teórico deste cálculo do ganho óptico, além de criarmos uma ferramenta computacional para a aplicação do mesmo às nanoestruturas semicondutoras, tais como poço, fio e ponto quântico. Curvas espectrais de ganho são geradas para cada caso e as análises comparativas destas curvas demonstram que nanofios e nanopontos propiciam condições de alto ganho óptico devido ao confinamento de suas dimensões e, ainda melhor, controle espectral. O efeito da não-homogeneidade das dimensões dos pontos também é considerado.

Subseqüentemente, aplicamos os resultados do cálculo de ganho óptico para calcular a corrente de limiar de lasers de semicondutores de faces clivadas a partir das equações de taxa de fótons e portadores na cavidade com a injeção de corrente elétrica. Um estudo é realizado para a otimização do comprimento da cavidade para cada um dos meios de amplificação de luz: *bulk*, poços, fios e pontos quânticos.

Por fim, descrevemos nossos primeiros resultados para o crescimento epitaxial, através do método de crescimento epitaxial de feixe químico (**CBE**), dos componentes básicos de uma estrutura de laser de semicondutor. Fabricamos e caracterizamos um diodo de junção de InP e poços quânticos de InGaAs/InGaAsP. Amostras epitaxiais de lasers de poços quânticos obtidas externamente foram processadas em lasers de diversos comprimentos de cavidade e caracterizadas. Especialmente, apresentamos curvas de corrente de limiar em função do comprimento da cavidade do laser em concordância qualitativa com nossas simulações, estabelecendo o primeiro passo para o refinamento de nossa ferramenta computacional.

# Abstract

---

This master's dissertation presents the theoretical studies on the calculation of optical gain in nanostructures based on the InGaAs/InGaAsP/InP system. From the time dependent perturbation theory, where perturbation is the interaction of an electromagnetic wave with matter, and the Kane's theory for semiconductors band structure, relating the transition matrix involved in the radioactive processes with experimental parameters of the same band structure, we have developed a theoretical formalism for the optical gain calculation. We then developed a simulation tool to apply to semiconductors structures, such as well, wire, and quantum dot. Spectral gain curves are generated for each case and comparative analyses of these curves demonstrates that quantum wires and quantum dots provide higher optical gain due to its confined dimensions and, even better, much spectral control. The effects of non-homogeneous dot size distribution are also considered.

Subsequently, we have applied the simulation tool to calculate the threshold current in semiconductor lasers with cleaved faces (edge emitting lasers), based on the rate equations for photons and carriers in the optical resonant cavity with the injection of electrical current. A study is performed for the optimization of the length of the cavity for each of active region medium: bulk, wells, wires, and quantum dots.

Subsequently, we have described our first results for the epitaxial growth by chemical beam epitaxy (**CBE**) of the basic components of a semiconductor laser: InP junction diode and quantum wells of InGaAs/InGaAsP. Finally, epitaxial samples of quantum well lasers obtained externally were processed in lasers of several resonant cavity lengths and characterized. We have especially presented curves of threshold current as a function of the length of the resonant cavity of the laser in qualitative agreement with our simulations, establishing the first step for refining of our simulation tool.

# Índice

---

<b>Agradecimentos</b> .....	<b>vi</b>
<b>Resumo</b> .....	<b>vii</b>
<b>Abstract</b> .....	<b>viii</b>
<b>Índice</b> .....	<b>ix</b>
<b>Introdução</b> .....	<b>1</b>
Perspectiva Histórica .....	1
<b>Capítulo 1</b> .....	<b>9</b>
<b>Parâmetros Materiais de compostos InGaAsP</b> .....	<b>9</b>
1.1 Introdução .....	9
1.2 Sistema InGaAsP .....	9
<b>Capítulo 2</b> .....	<b>15</b>
<b>Cálculo do Ganho Óptico</b> .....	<b>15</b>
2.1 Introdução .....	15
2.2 Recombinação .....	15
2.3 Densidade de Estados de Portadores nas Bandas para <i>Bulk</i> .....	18
2.4 Regra de Ouro de Fermi .....	19
2.5 Interação Onda Eletromagnética-Átomo .....	22
2.6 Matriz de Transição .....	23
2.7 Transições Entre Bandas .....	24
2.8 <i>Bulk</i> .....	25
<b>Capítulo 3</b> .....	<b>30</b>
<b>Desenvolvimento do Cálculo de Ganho para Poço, Fio e Ponto Quântico</b> .....	<b>30</b>
3.1 Introdução .....	30
3.2 Soluções do Poço Quântico Finito .....	30
3.3 Cálculo de Ganho do Poço Quântico .....	34
3.4 Soluções do Fio Quântico .....	38
3.5 Cálculo de Ganho do Fio Quântico .....	40
3.6 Soluções do Ponto Quântico .....	45
3.7 Cálculo de Ganho do Ponto Quântico .....	47
<b>Capítulo 4</b> .....	<b>50</b>
<b>Curvas Espectrais de Ganho</b> .....	<b>50</b>
4.1 Introdução .....	50
4.2 Espalhamento Intrabanda .....	50
4.3 Quase-Níveis de Fermi .....	52
4.4 Resultados Teóricos e Estudos Comparativos .....	56
4.5 Análise Conjunta .....	61
4.5 Efeitos da Não-Homogeneidade das Dimensões dos Pontos Quânticos .....	67
<b>Capítulo 5</b> .....	<b>73</b>
<b>Laser de Semicondutores</b> .....	<b>73</b>
5.1 Introdução .....	73
5.2 Fator de Confinamento .....	73
5.4 Equações de Taxa .....	85
5.5 Corrente de Limiar .....	91

5.6 Estudo Comparativo .....	93
<b>Capítulo 6 .....</b>	<b>102</b>
<b>Crescimento Epitaxial de Poços Quânticos e Diodo de InP .....</b>	<b>102</b>
6.1 Introdução.....	102
6.2 Epitaxia de Feixes Químicos (CBE).....	102
6.3 Caracterização de Amostras .....	105
6.3.1 Efeito Hall .....	105
6.3.2 Perfilometria de dopagem: CxV eletroquímico .....	109
6.3.3 Raio-X .....	110
6.3.4 Fotoluminescência .....	113
6.3.5 Perfilometria .....	115
6.4 Desenvolvimento de Poços Quânticos.....	116
6.5 Dopagem e Fabricação de um Diodo de InP .....	121
<b>Capítulo 7 .....</b>	<b>127</b>
<b>Caracterização de Laser de Poços Quânticos .....</b>	<b>127</b>
7.1 Introdução.....	127
7.2 Dimensionamento de um Laser de Poços Quânticos .....	128
7.3 Processamento de Laser.....	129
7.3.1 Fotogravação Positiva.....	129
7.3.2 Corrosão .....	130
7.3.3 Deposição de SiO <sub>2</sub> .....	130
7.3.4 Fotogravação Negativa .....	131
7.3.5 Lift-Off .....	132
7.3.6 Desbaste.....	133
7.3.7 Metalização do substrato .....	133
7.3.8 Alloy.....	133
7.3.9 Clivagem .....	133
7.4 Caracterização de Laser de Poços Quânticos .....	134
7.5 Confronto de Resultados .....	142
<b>Conclusão .....</b>	<b>146</b>
<b>Referências Bibliográficas .....</b>	<b>148</b>

# Introdução

## Perspectiva Histórica

O advento do laser data de 1958, ano em que foi publicado o artigo de Schawlow e Townes [Schawlow et al, 1958]. Em Maio de 1960 era operado com sucesso um laser de estado sólido de rubi [Maiman, 1960] e em Dezembro deste mesmo ano surgiu o laser de gás He-Ne [Javan et al, 1961]. A possibilidade de emissão estimulada em semicondutores [Dumke, 1962] era considerada durante este período. Em 1962 diversos grupos reportaram lasers provenientes de semicondutores. O dispositivo consistia de uma junção p-n de GaAs [Hall, 1962]. O processo de recombinação elétron-buraco na região de depleção da junção provia o ganho óptico e a face clivada perpendicular ao plano da junção (formando uma cavidade ressonante) provia a realimentação óptica, duas condições indispensáveis para qualquer laser. Outros materiais da família III-V da tabela periódica, mostrada na figura 1, tais como InP, InAs, InGaAs, GaAsP e InPAs, cujo bandgap é direto, eram usados para obter lasers de semicondutores de diferentes comprimentos de onda.

**Tabela Periódica dos Elementos**

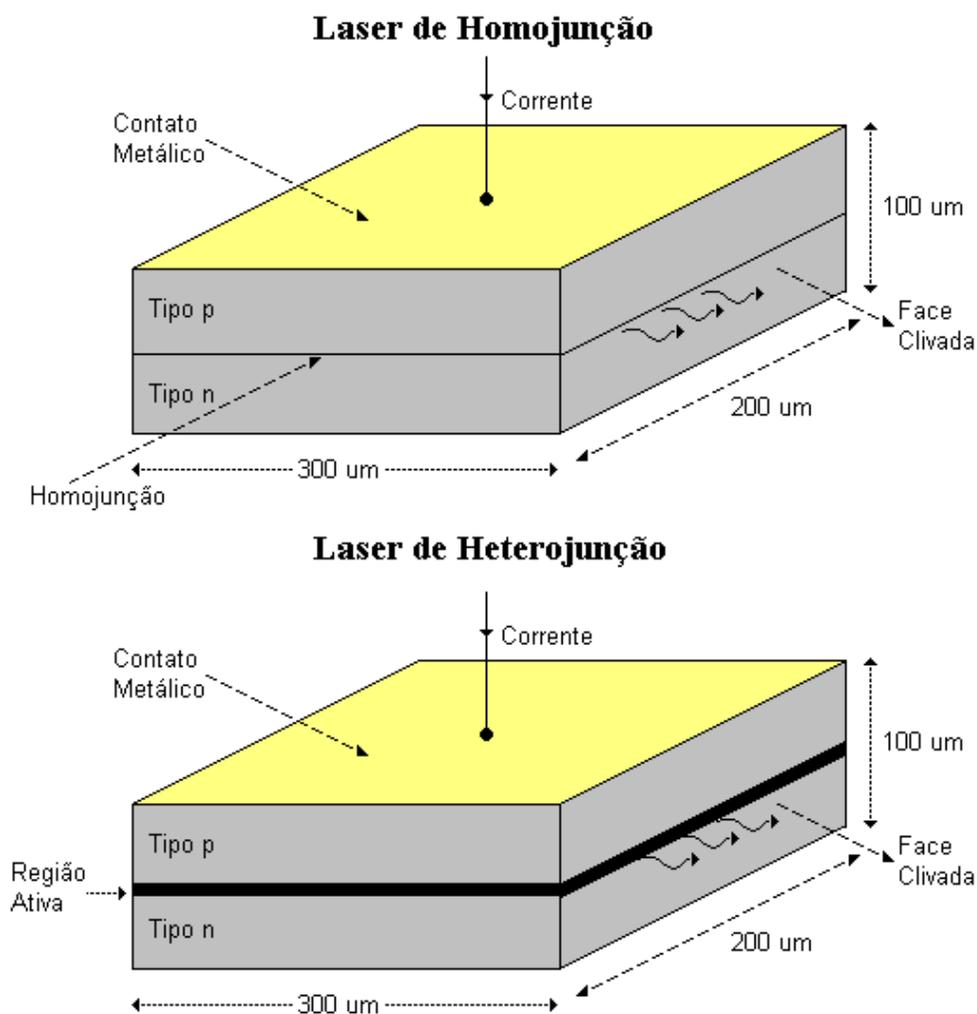
1	I A																										2																																								
1	H																											He																																							
2	II A																		3	B	4	C	5	N	6	O	7	F	8	Ne																																					
3	11	12																	13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar																																					
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54																															
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
6	55	56	* La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn																																																	
7	87	88	+ Ac	Rf	Ha	106	107	108	109	110																																																									

* Lanthanide Series	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
+ Actinide Series	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Figura 1 - Tabela periódica. Em destaque, família III/V.

Entretanto, a utilidade prática destes dispositivos recentes era limitada, pois  $J_{th}$ , densidade de corrente de limiar (densidade de corrente necessária para que a emissão estimulada seja amplificada) era da ordem de  $50 \text{ kA/cm}^2$ , o que tornava inviável a operação destes dispositivos a temperatura ambiente. Em 1963 foi sugerido que os lasers de semicondutores poderiam ser melhorados se uma camada de outro material semiconductor fosse inserida entre duas camadas confinantes do mesmo material semiconductor que tivesse energia de *bandgap* relativamente maior comparado ao primeiro [Kroemer, 1963]. Como o dispositivo consiste de dois materiais semicondutores distintos, comumente é chamado de laser de heteroestrutura, em contraste com o dispositivo de um só material semiconductor chamado de laser de homojunção. Ambos são mostrados na figura. 2:



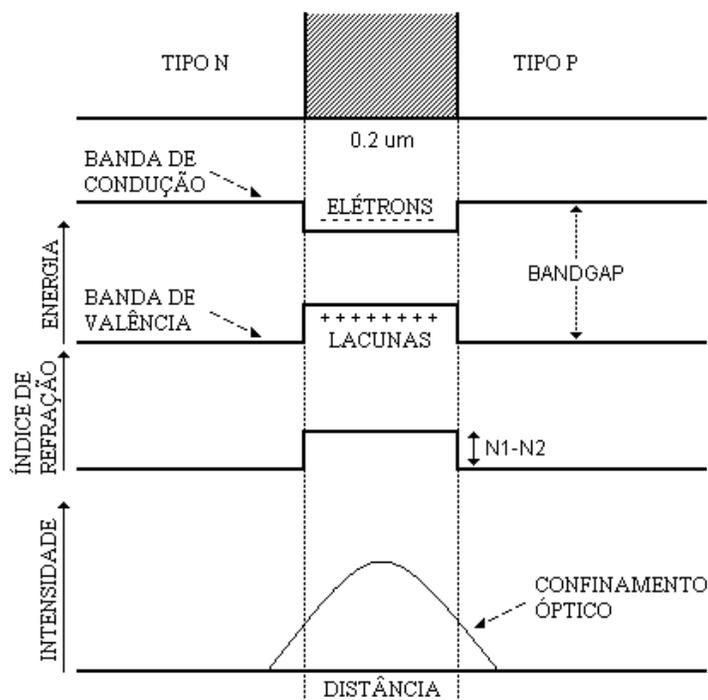
**Figura 2** - Laser de homojunção e laser de heterojunção. A região ativa do laser de heteroestrutura possui espessura da ordem de centenas de nanômetros.

Lasers de heteroestruturas são também classificados como heteroestrutura simples e dupla heteroestrutura, dependendo das camadas confinantes (que envolve a região ativa) ter energia de *bandgap* maior em relação a região ativa em uma ou ambas as interfaces.

Entretanto, o uso da heteroestrutura requer o casamento do parâmetro de rede de ambos os semicondutores envolvidos; apenas em 1969 foi demonstrado com sucesso a operação (no modo pulsado) de um laser de heteroestrutura a temperatura ambiente [Hayashi, 1969]. O dispositivo foi feito usando a técnica LPE (*liquid-phase epitaxial*) para o crescimento das camadas de GaAs e AlGaAs. Em 1970 foi conseguido a operação no modo contínuo a temperatura ambiente.

Em 1969, o valor de  $J_{th}$  era da ordem de  $5 \text{ kA/cm}^2$  para um laser de dupla heteroestrutura de GaAs a temperatura ambiente. Em 1975 este valor caiu para  $0.5 \text{ kA/cm}^2$  através da obtenção de um camada ativa fina ( $\approx 0.1 \text{ }\mu\text{m}$ ), o que significou uma redução de duas ordens de grandeza no valor de  $J_{th}$  desde o primeiro dispositivo feito em 1962. O laser de semicondutor, inicialmente considerado uma curiosidade de laboratório, foi convertido a uma fonte prática e compacta de luz coerente para numerosas aplicações.

As explicações físicas para a redução da densidade da corrente de limiar com o advento da heteroestrutura são duas: as camadas confinantes que envolvem a região ativa possuem energia de *bandgap* maior; ao mesmo tempo, possuem índice de refração menor em relação à região ativa [Alferov, 1963], como pode ser visto na figura 3. A diferença de energia de *bandgap* ajuda a confinar elétrons e lacunas na região ativa, onde eles se recombinam para produzir ganho óptico. A diferença de índice de refração confina o modo óptico dentro da região ativa, que atua como um guia de onda dielétrico. O confinamento do modo óptico reduz significativamente perdas internas que, de outra forma, ocorreriam na ausência do guia de onda devido ao espalhamento do modo óptico fora da região ativa [Kressel, 1969].

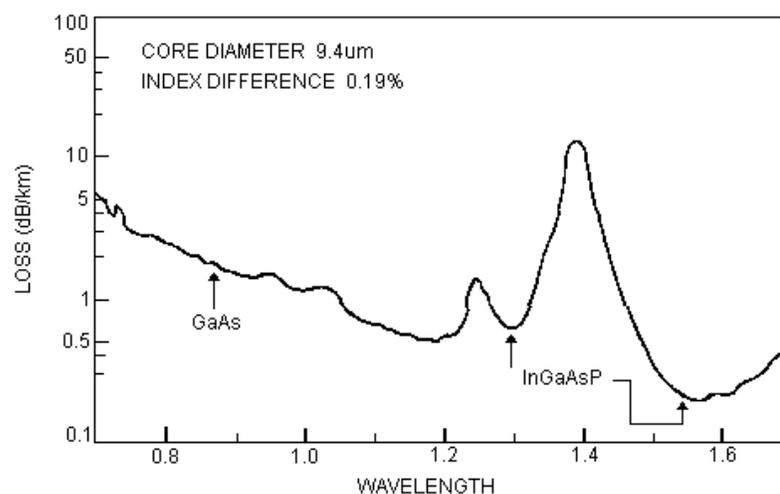


**Figura 3** - Diagrama esquemático da descontinuidade de energia e do índice de refração nas interfaces do laser de heteroestrutura. A área hachurada corresponde à região ativa. O confinamento óptico da intensidade da luz na região ativa é mostrada no último diagrama.

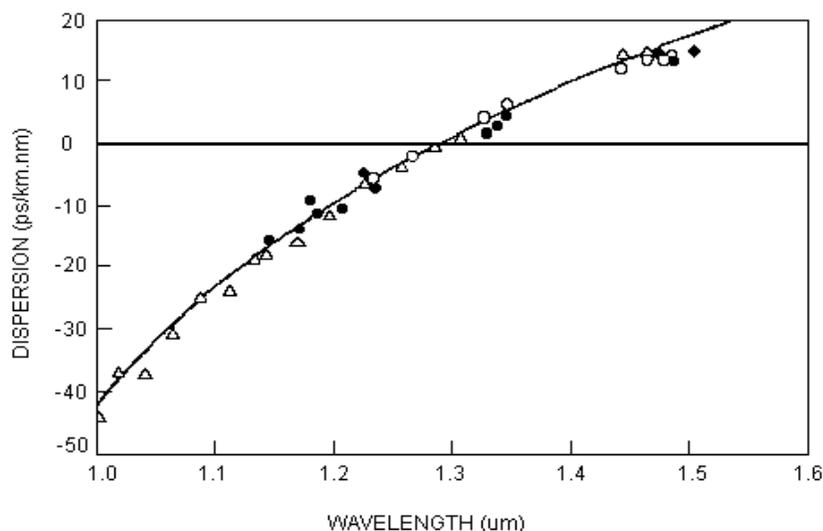
No início da década de 80, lasers de GaAs continuaram a ser desenvolvidos. Entretanto, o espectro de emissão do comprimento de onda estava limitado a valores de 0,8 a 0,9 μm. Lasers de semicondutores cujo espectro de emissão de comprimento de onda eram de 1,1 a 1,6 μm (*long-wavelength*) despertaram considerável interesse para aplicações em comunicações através de fibras ópticas [Suematsu, 1983]. Embora muitos materiais tenham sido considerados, a combinação InGaAsP/InP tornou-se a melhor opção do ponto de vista do casamento do parâmetro de rede [Moon *et al*, 1974]. A região ativa é composta pelo material semiconductor quaternário  $In_{(1-x)}Ga_{(x)}As_{(y)}P_{(1-y)}$ . Através da variação da fração molar dos subíndices  $x$  e  $y$ , praticamente qualquer comprimento de onda entre 1,1 a 1,6 μm pode ser selecionado. As camadas confinantes neste laser de heteroestrutura consiste de InP ou mesmo InGaAsP, desde que as frações molares sejam diferentes da região ativa.

Em sistemas de comunicações ópticas, a informação é transmitida pela propagação da luz dentro de uma fibra óptica na forma de uma sequência codificada de pulsos ópticos. O sinal enfraquece durante a propagação devido a perdas associadas a fibra. Após uma certa distância é necessário regenerar o sinal através do uso de um repetidor (combinação de um detetor,

amplificador e transmissor). Outro aspecto a considerar está relacionado a taxa de transmissão de pulsos (número de *bits* transmitidos por segundo). Esta taxa está limitada pela dispersão cromática associada a fibra, responsável pelo alargamento do pulso óptico durante a propagação em uma fibra mono-modo. Portanto, o objetivo principal em sistemas de comunicações ópticas está na escolha de um comprimento de onda que minimize a perda do sinal na fibra e maximize a taxa de transmissão de pulsos. As figuras 4 e 5 mostram, respectivamente, a variação da perda óptica (dB/km) [Miya *et al*, 1979] e o coeficiente de dispersão (ps/km.nm) [Sugimura *et al*, 1980] em função do comprimento de onda para uma fibra de silica mono-modo.



**Figura 4** - Perda de intensidade da onda eletromagnética transmitida ao longo de uma fibra óptica mono-modo em função do comprimento de onda. Figura extraída do livro "Semiconductor Lasers" [Agraval *et al*, 1993].



**Figura 5** - Dispersão da onda eletromagnética transmitida ao longo de uma fibra óptica mono-modo em função do comprimento de onda. Figura extraída do livro "Semiconductor Lasers" [Agraval *et al*, 1993].

A primeira geração de sistemas de transmissão por ondas de luz utilizava lasers de GaAs que operavam, aproximadamente, a 0.85  $\mu\text{m}$  (comprimento de onda). Os valores de perda e dispersão na fibra limitavam a taxa de transmissão a 100 Mb/s e restringiam o uso de repetidores a cada 10 Km de distância. A segunda geração de sistemas utilizava comprimento de onda em torno de 1.3  $\mu\text{m}$ , região na qual a dispersão na fibra é desprezível. Taxas de transmissão da ordem de 2Gb/s foram conseguidas em fibras de sílica mono-modo. Entretanto, o valor da perda de intensidade do sinal transmitido restringia o uso de repetidores a cada 50 Km, no máximo. A terceira geração de sistemas de comunicação óptica operava a 1.55  $\mu\text{m}$ , ou seja, comprimento de onda no qual a perda na fibra é mínima. Para moderadas taxas de transmissão, o uso de repetidores excedia facilmente 100 km de distância.

Embora a variação de composição do sistema quaternário  $\text{In}_{(1-x)}\text{Ga}_{(x)}\text{As}_{(y)}\text{P}_{(1-y)}$  tenha colaborado com o desenvolvimento de dispositivos que emitiam luz em um comprimento de onda favorável à transmissão de dados via fibra óptica, a eficiência destes dispositivos era muito limitada. A variação dimensional da região ativa de lasers de heteroestrutura proporcionou progressos significativos no que diz respeito à sua utilização enquanto componente optoeletrônico. Em 1975, as pesquisas já apontavam uma melhora na eficiência de lasers de heteroestrutura a partir da redução da espessura da região ativa: a densidade da corrente de limiar havia diminuído consideravelmente quando camadas de 100 nm foram obtidas através de novas técnicas de crescimento de filmes finos. A variação de composição dos materiais não mais representava uma alternativa viável para incrementar esta eficiência.

A inserção de nanoestruturas na região ativa - por exemplo, o crescimento de finas camadas nanométricas de espessuras comparáveis ao comprimento de onda de Broglie do elétron (chamados poços quânticos) - permitiu a utilização de níveis quantizados nesta dimensão com o controle do comprimento de onda de emissão através das características geométricas da estrutura e não mais somente pela composição. Além disto, estas estruturas mostraram ter maior ganho óptico e maior pureza espectral. Desta forma, a densidade da corrente de limiar diminuiu, resultado do aumento da eficiência quântica no processo de recombinação de portadores devido à maior concentração espectral. Ao longo das duas últimas décadas, na seqüência deste processo de redução dimensional, as pesquisas nesta área têm-se concentrado na obtenção de lasers de semicondutores com região ativa nanoestruturada na forma de fios e pontos quânticos. A completa redução dimensional (ou seja, pontos quânticos) permite, em princípio, a criação de um

novo meio ativo no qual temos completo controle não só da emissão como também das propriedades espectrais deste meio; temos também o controle da dependência destas propriedades com a injeção de portadores. Ou seja, abre-se uma nova fronteira para dispositivos com novos meios ativos a partir dos quais podemos (principalmente através do controle de geometria) ajustar suas características optoeletrônicas fundamentais e adequá-los às aplicações mais diversas. Além disto, os volumes diminutos para inversão de população nestas estruturas podem resultar em lasers extremamente eficientes na conversão portador-luz. Sendo assim, este potencial de flexibilidade de projeto e eficiência de conversão optoeletrônica, jamais disponível, tem enorme importância em todo o desenvolvimento da optoeletrônica.

Considerando este contexto, nosso trabalho de dissertação apresenta uma importante contribuição ao analisar, de forma conjunta, o cálculo teórico do ganho óptico em nanoestruturas (baseadas no sistema InGaAs/InGaAsP) quando confinamos suas dimensões (bulk, poço, fio e ponto quântico). Mais ainda, tentamos estabelecer os primeiros passos experimentais que nos permitam uma avaliação qualitativa de nossas análises. Esta dissertação compõe-se de 7 capítulos, ao longos dos quais desenvolvemos duas metas que se complementam:

Os estudos teóricos sobre o cálculo de ganho óptico em nanoestruturas baseadas no sistema InGaAs/InGaAsP e a posterior inserção destas nanoestruturas em laser de faces clivadas, desenvolvidos ao longo dos capítulos 2, 3, 4 e 5;

Fabricação e caracterização de laser de poços quânticos, e o posterior confronto de resultados teóricos e experimentais, desenvolvidos nos capítulo 6 e 7.

No capítulo 1, apresentamos a forma como obtemos os parâmetros materiais dos sistemas ternários  $In_{(1-x)}Ga_{(x)}As$  e quaternários  $In_{(1-x)}Ga_{(x)}As_{(y)}P_{(1-y)}$ . Estes parâmetros, tais como parâmetro de rede, energia de bandgap, índice de refração entre outros, são utilizados ao longo de todo o trabalho desenvolvido nesta dissertação. No capítulo 2, deduzimos as expressões que nos conduzem ao cálculo geral de ganho, desenvolvida para o caso bulk. No capítulo 3 desenvolvemos as expressões de ganho para as nanoestruturas semicondutoras; ou seja, poço, fio e ponto quântico. Os níveis de energia e o subsequente cálculo de ganho são apresentados para cada caso. No capítulo 4 desenvolvermos a simulação computacional das expressões de ganho, através de rotinas numéricas. Com o intuito de tornar mais realístico nosso modelo teórico, consideramos o espalhamento intrabanda. A não-homogeneidade das dimensões dos pontos quânticos também é considerada em nosso modelo. O capítulo 5 trata, essencialmente, da

descrição do laser de semicondutor propriamente dito, assim como seu funcionamento enquanto dispositivo. As nanoestruturas são inseridas no laser: a corrente de limiar é estudada em função do comprimento da cavidade ressonante do laser; comparamos a performance do laser para os quatro casos abordados. No capítulo 6, descrevemos os procedimentos experimentais que compreendem o crescimento de materiais semicondutores e a caracterização de amostras. O objetivo é dimensionar e caracterizar as partes constituintes de um laser de poços quânticos: a região ativa de poços quânticos e as camadas confinantes, na forma de um diodo de InP.

O capítulo 7 descreve o dimensionamento, processamento e caracterização de um laser de poços quânticos; os resultados experimentais obtidos pela caracterização são confrontados com os resultados correlatos obtidos nas simulações teóricas (apresentadas no capítulo 4 e 5). O modelo teórico proposto é então verificado qualitativamente a partir deste confronto.

# Capítulo 1

## Parâmetros Materiais de compostos InGaAsP

### 1.1 Introdução

Neste capítulo apresentamos a forma como obtemos os parâmetros materiais dos sistemas ternários  $In_{(1-x)}Ga_xAs$  e quaternários  $In_{(1-x)}Ga_xAs_yP_{(1-y)}$ . Estes parâmetros, tais como parâmetro de rede, energia de *bandgap*, índice de refração entre outros, são utilizados ao longo de todo o trabalho desenvolvido nesta dissertação.

### 1.2 Sistema InGaAsP

Existem dois sistemas principais de materiais usados na fabricação de lasers de semicondutores para obtenção de comprimentos de onda de interesse em telecomunicações:  $In_{(1-x-y)}Ga_xAl_yAs$  e  $In_{(1-x)}Ga_xAs_yP_{(1-y)}$ . Como podemos observar na figura 1.1, estes compostos situam-se em uma região cuja energia de *bandgap* dos semicondutores binários que os compõem varia de 0.4 a 2.4 eV; em comprimento de onda, de 0.5 a 3.1  $\mu\text{m}$ .

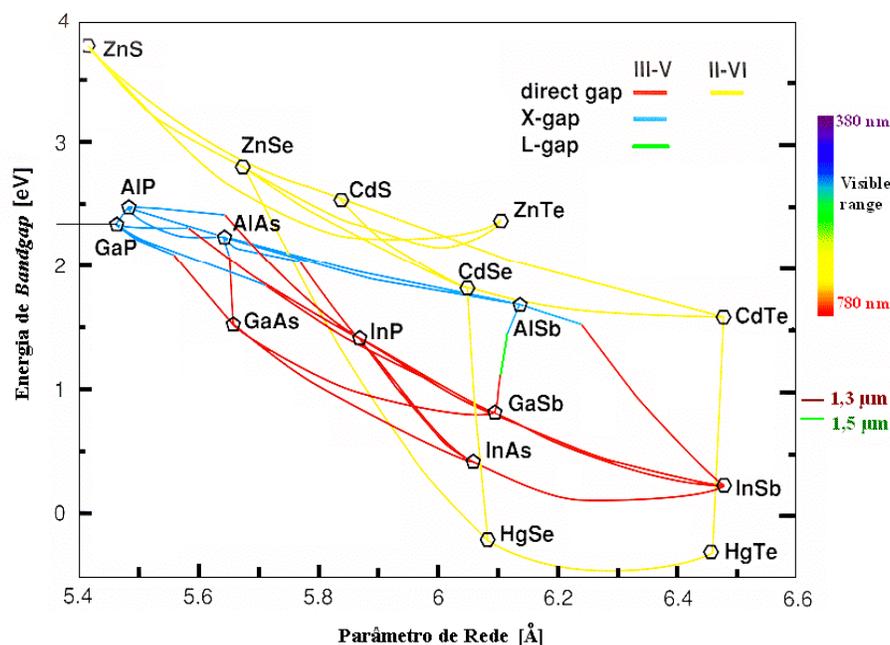


Figura 1.1 - Energia de bandgap e parâmetro de rede para diversos compostos binários.

Entretanto, estamos interessados nos compostos cuja energia de *bandgap* esteja situada entre os valores de 1.1 a 1.7  $\mu\text{m}$ . O sistema  $\text{In}_{(1-x)}\text{Ga}_{(x)}\text{As}_{(y)}\text{P}_{(1-y)}$ , cujas propriedades satisfazem as condições exigidas, será o sistema utilizado ao longo de todo o desenvolvimento deste trabalho. As propriedades deste sistema podem ser obtidas a partir da interpolação linear das propriedades dos semicondutores binários GaAs, GaP, InAs e InP [Minch *et al*, 1999]. Seja um parâmetro  $P$  dentre os parâmetros listados na tabela 1.1:

$$P(\text{In}_{(1-x)}\text{Ga}_{(x)}\text{As}_{(y)}\text{P}_{(1-y)}) = P(\text{GaAs})xy + P(\text{GaP})x(1-y) + P(\text{InAs})(1-x)y + P(\text{InP})(1-x)(1-y) \quad (1.1)$$

TABELA 1.1. Parâmetros Materiais de GaAs, InAs, InP e GaP.

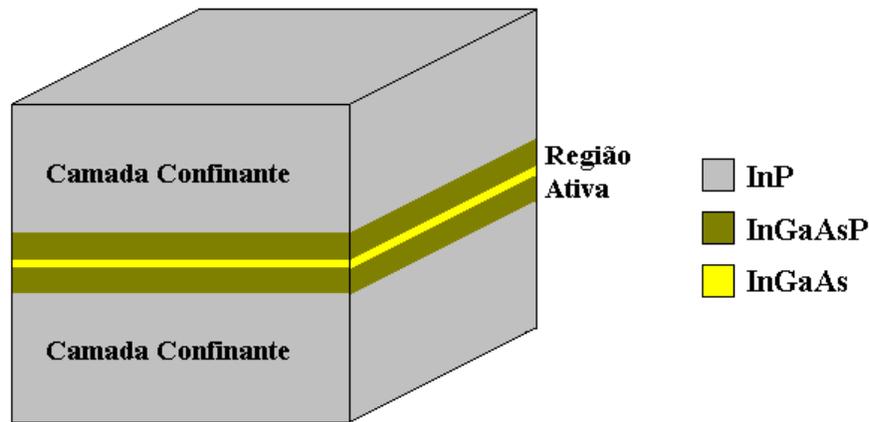
Parâmetro	Símbolo	Unidade	GaAs	InAs	InP	GaP
Parâmetro de Rede	a	Å	5.6533	6.0584	5.8688	5.4505
	C <sub>11</sub>	10 <sup>11</sup> dyn/cm <sup>2</sup>	11.879	8.329	10.11	14.05
	C <sub>12</sub>	10 <sup>11</sup> dyn/cm <sup>2</sup>	5.376	4.526	5.61	6.203
Potencial de Deformação Hidrostática (Banda Condução)	A <sub>c</sub>	eV	-7.17	-5.08	-5.04	-7.14
Potencial de Deformação Hidrostática (Banda Valência)	A <sub>v</sub>	eV	1.16	1	1.27	1.7
	b	eV	-1.7	-1.8	-1.7	-1.8
Parâmetro da Banda de Valência	$\gamma_1$	-	6.8	20.4	4.95	4.05
	$\gamma_2$	-	1.9	8.3	1.65	0.49
	$\gamma_3$	-	2.73	9.1	2.35	1.25
Massa do Elétron (condução)	m <sub>e</sub> /m <sub>0</sub>	-	0.067	0.023	0.077	0.25
Massa do Buraco Pesado	m <sub>hh</sub> /m <sub>0</sub>	-	0.5	0.4	0.6	0.67
Massa do Buraco Leve	m <sub>lh</sub> /m <sub>0</sub>	-	0.074	0.027	0.089	0.14
Índice de Refração	n	-	3.374	3.526	3.146	3.054
Modelo de Harrison Posição da Banda de Condução	E <sub>C</sub> <sup>H</sup>	eV	1.53	0.801	1.35	2.352
Modelo de Harrison Posição da Banda de Valência	E <sub>V</sub> <sup>H</sup>	eV	0.111	0.441	0	-0.388
Modelo do Estado Sólido Energia de Separação Spin-Órbita	$\Delta$	eV	0.34	0.38	0.11	0.08
Modelo do Estado Sólido Posição Média Banda de Valência	E <sub>V,SV</sub>	eV	-6.92	-6.67	-7.04	-7.40

Para o cálculo da energia de *bandgap* do sistema  $\text{In}_{(1-x)}\text{Ga}_{(x)}\text{As}_{(y)}\text{P}_{(1-y)}$ , a expressão é obtida da seguinte forma [Chuang, 1995], [Hellwege, 1986]:

$$E_{\text{GAP}}(\text{In}_{(1-x)}\text{Ga}_{(x)}\text{As}_{(y)}\text{P}_{(1-y)}) = 1.35 + 0.642x - 1.101y + 0.78x^2 + 0.101y^2 - 0.159xy - 0.28x^2y + 0.109xy^2 \text{ (eV)} \quad (1.2)$$

A partir das equações 1.1 e 1.2, podemos delinear todas as propriedades do sistema que desejamos através das frações molares  $x$  e  $y$ . Entretanto, é necessário ressaltar que o parâmetro

de rede dos materiais que compõe o laser de heteroestrutura (o qual nos referiremos ao longo deste trabalho) tenham o mesmo valor. No crescimento epitaxial destas estruturas, é fundamental que esta condição seja adotada, pois o crescimento descasado leva a acúmulos de tensão limitando a espessura da camada. Deve-se notar que estruturas de laser que utilizam camadas tensionadas na região ativa são também de interesse, mas não objeto de nosso estudo neste trabalho. Seja o laser de heteroestrutura com região ativa nanoestruturada – baseado no sistema InGaAs/InGaAsP - entre camadas confinantes de InP, mostrado esquematicamente na figura 1.2:



**Figura 1.2** - Representação de um laser de heteroestrutura com região ativa nanoestruturada.

Quando não houver camada nanoestruturada na região ativa, nos referiremos, neste caso, como *bulk*: a região ativa constitui uma camada extensa (da ordem de alguns micrômetros, ou seja, muitas células unitárias) de um mesmo material (que pode ser InGaAsP ou mesmo InGaAs) como ilustra a figura 2 (**Introdução**). O parâmetro de rede do InP é uma propriedade intrínseca deste semiconductor; portanto, para que o parâmetro de rede das estruturas representadas na figura acima tenham o mesmo valor:

$$P_{rede}(InP) = P_{rede}(In_{(1-x)}Ga_{(x)}As) = P_{rede}(In_{(1-x)}Ga_{(x)}As_{(y)}P_{(1-y)}) \quad (1.3)$$

cujo valor do parâmetro de rede do InP é igual a  $5.8688\text{\AA}$ . Portanto, se substituirmos os valores dos parâmetros de rede (tabela 1) na equação 1.1, obtemos as frações molares do sistema

$$In_{(1-x)}Ga_{(x)}As_{(y)}P_{(1-y)}:$$

$$5.8688 = 5.6533xy + 5.4505x(1-y) + 6.0584(1-x)y + 5.8688(1-x)(1-y) \quad (1.4)$$

$$\Rightarrow y = \frac{0.4183x}{0.1896 + 0.0132x}$$

O sistema  $In_{(1-x)}Ga_xAs$  pode ser considerado uma composição particular do sistema  $In_{(1-x)}Ga_xAs_yP_{(1-y)}$  em que a fração molar  $y = 1$ ; portanto:

$$5.8688 = 5.6533x + 6.0584(1 - x) \quad (1.5)$$

$$\Rightarrow x = 0.468$$

Note que, a partir do parâmetro de rede, temos  $In_{(0.532)}Ga_{(0.468)}As$ , cujas propriedades a serem usadas podem ser calculadas a partir da equação 1.1 e da tabela 1:

$$n = 3.374x + 3.526(1 - x) = 3.455$$

$$E_{GAP} = 0.35 + 0.57x + 0.5x^2 = 0.7317 \text{ eV}$$

$$m_e / m_0 = 0.067x + 0.023(1 - x) = 0.044$$

$$m_{hh} / m_0 = 0.5x + 0.4(1 - x) = 0.447$$

$$\Delta = 0.34x + 0.38(1 - x) = 0.36 \text{ eV} \quad (1.6)$$

Relacionamos, na equação 1.6, os parâmetros principais que utilizaremos no decorrer deste trabalho. No caso do InGaAsP, obtemos uma série de valores possíveis para os quais o parâmetro de rede é igual ao parâmetro de rede do InP, conforme visualizamos na figura 1.3:

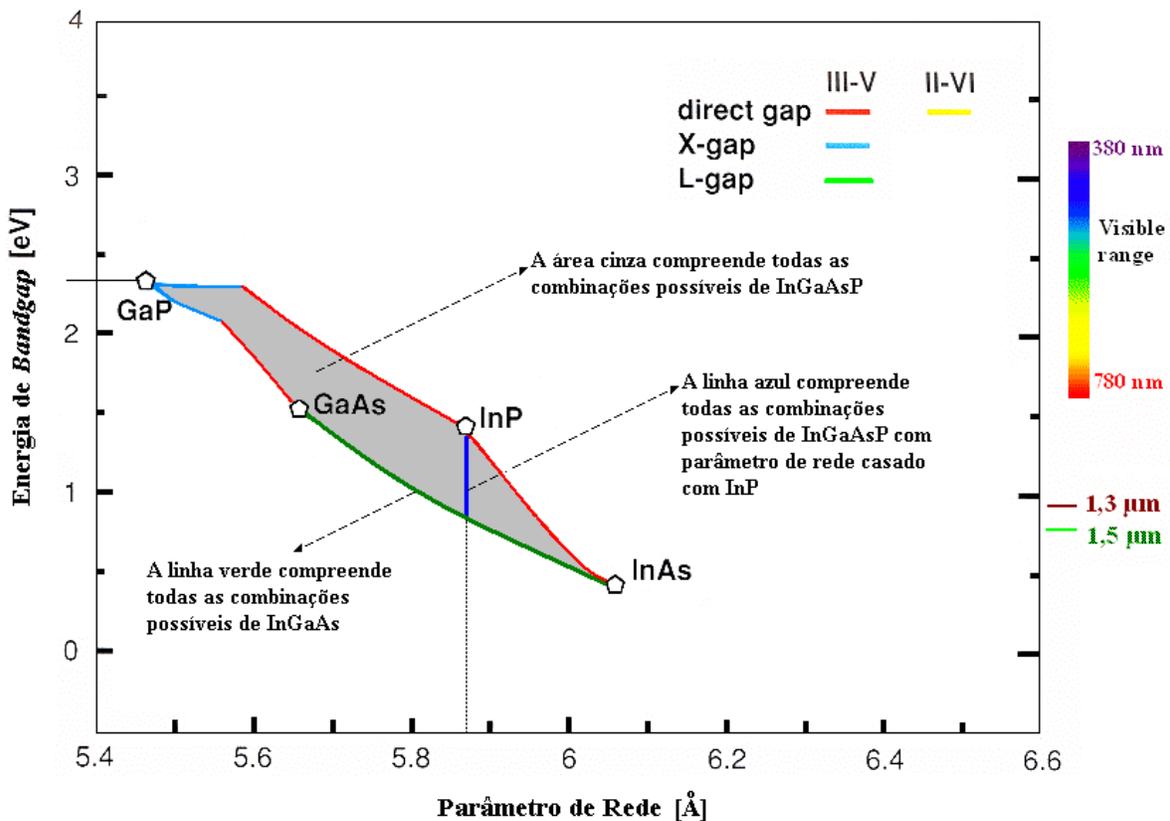


Figura 1.3 - Energia de bandgap e parâmetro de rede para o sistema InGaAsP.

A linha azul indicada na figura 1.3 compreende infinitos valores possíveis de frações molares que satisfazem a condição de casamento de parâmetro de rede. Portanto, faz-se necessário a escolha de um valor de energia de *bandgap* dentre todos estes valores possíveis de frações molares. A linha azul abrange valores de energia de *bandgap* que variam de 0.73 a 1.4 eV ( $Q = 1.69 \mu\text{m}$  a  $Q = 0.88 \mu\text{m}$ ); também nos referimos à energia de *bandgap* como fator-Q, em que expressamos os valores de energia em valores de comprimento de onda. A conversão se dá obviamente através da expressão:

$$\lambda = \frac{1.24}{E} \quad (1.7)$$

onde  $\lambda$  é o comprimento de onda ( $\mu\text{m}$ ) e  $E$  é a energia (eV). Estamos interessados em um laser cuja região de operação esteja entre  $Q = 1.45 \mu\text{m}$  e  $Q = 1.65 \mu\text{m}$ . Nos lasers nanoestruturados, a descontinuidade de energia nas interfaces InGaAsP/InGaAs formam poços de energia nas banda de condução e valência cuja largura é a espessura da própria camada nanoestruturada (**capítulo 3**). Estes poços propiciam a existência de níveis discretos tanto na banda de valência como na de condução (que são soluções da equação de Schroedinger quando aplicada a estas descontinuidades). A capacidade do laser de amplificar luz torna-se muito maior para fótons cuja energia seja igual a energia de transição entre um nível da banda de condução e outro da banda de valência (**capítulo 4**). É importante observar que a razão entre a descontinuidade na banda de condução e a diferença entre os respectivos bandgaps é aproximadamente 0.4 para todas composições [Bohrer, 1993], [Adachi, 1992] (**capítulo 3**). Portanto, a escolha da energia de *bandgap* do InGaAsP deve ser de tal forma que a descontinuidade entre as bandas de condução e valência favoreçam transições cujas energias estejam na região de nosso interesse; ou seja, entre  $Q = 1.45 \mu\text{m}$  e  $Q = 1.65 \mu\text{m}$ . Escolhemos  $E_{GAP} = 0.877 \text{ eV}$  ( $Q_{InGaAsP} = 1.414 \mu\text{m}$ ), valor experimental obtido através de resultados de fotoluminescência de amostras de InGaAsP crescidas sobre substratos de InP, com parâmetro de rede casados (**capítulo 6, seção 6.3**). A partir deste valor, calculamos as frações molares  $x$  e  $y$  substituindo a equação 1.4 na equação 1.2:

$$\begin{aligned} 0.877 = & 1.35 + 0.642x - 1.101 \left( \frac{0.4183x}{0.1896 + 0.0132x} \right) + 0.78x^2 + 0.101 \left( \frac{0.4183x}{0.1896 + 0.0132x} \right)^2 \\ & - 0.159x \left( \frac{0.4183x}{0.1896 + 0.0132x} \right) - 0.28x^2 \left( \frac{0.4183x}{0.1896 + 0.0132x} \right) + 0.109x \left( \frac{0.4183x}{0.1896 + 0.0132x} \right)^2 \end{aligned} \quad (1.8)$$

A solução da equação 1.8 é obtida de forma numérica, a partir da dependência da energia de *bandgap* do InGaAsP com a fração molar de Gálio, como mostra o gráfico da figura 1.4:

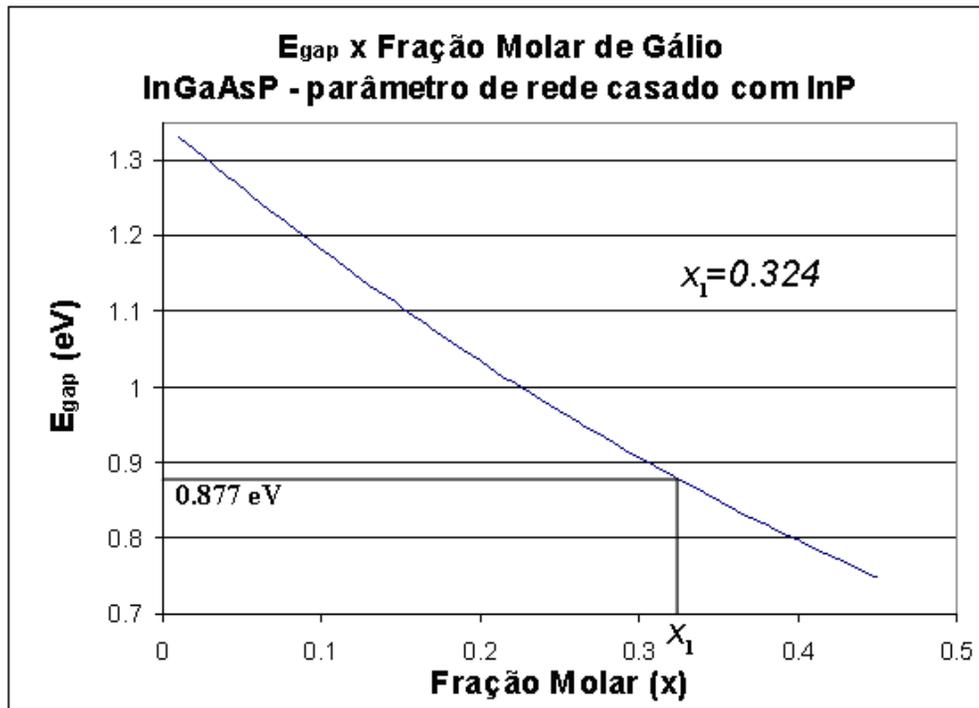


Figura 1.4 - Dependência da energia de bandgp com a concentração de Ga - Sistema InGaAsP/InP.

Portanto, se  $x = 0.324 \Rightarrow y = 0.7$ . Definido os valores das frações molares, temos  $In_{(0.676)}Ga_{(0.324)}As_{(0.7)}P_{(0.3)}$ , cujas propriedades a serem usadas podem ser calculadas a partir da equação 1.1 e da tabela 1:

$$\begin{aligned}
 n &= 3.374xy + 3.054x(1-y) + 3.526(1-x)y + 3.146(1-x)(1-y) = 3.368 \\
 m_e / m_0 &= 0.067xy + 0.25x(1-y) + 0.023(1-x)y + 0.077(1-x)(1-y) = 0.066 \\
 m_{hh} / m_0 &= 0.5xy + 0.67x(1-y) + 0.4(1-x)y + 0.6(1-x)(1-y) = 0.489
 \end{aligned}
 \tag{1.9}$$

Concluimos assim, uma breve exposição dos parâmetros materiais a serem utilizados nos capítulos subseqüentes. Observamos que, apesar de essencialmente fixarmos os valores a serem utilizados no restante desta tese, este capítulo nos serve de referência para estudos futuros que envolvam o sistema quaternário InGaAsP.

## Capítulo 2

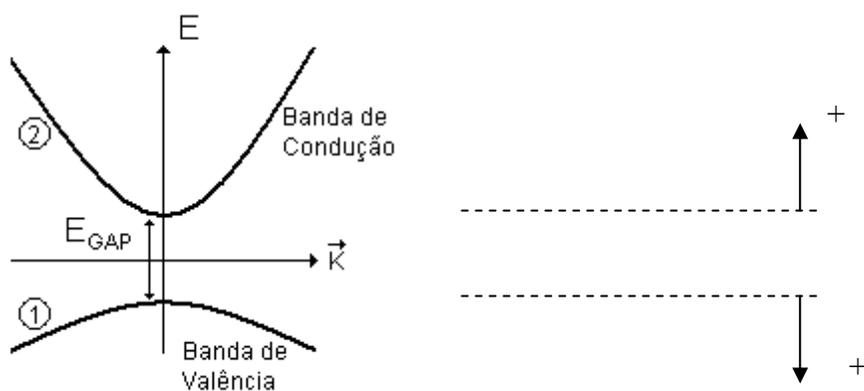
# Cálculo do Ganho Óptico

### 2.1 Introdução

Em breves palavras, o ganho óptico é uma medida da capacidade de um material (em nosso caso, semiconductor) de amplificar fótons. Para mensurar teoricamente esta capacidade, será necessário recapitular conteúdos pertinentes à mecânica quântica, física estatística, eletromagnetismo e física do estado sólido aplicado a semicondutores. Todo este desenvolvimento visa a dedução das expressões de ganho para *bulk* e nanoestruturas semiconductoras. Nas seções 2.2 a 2.6 são desenvolvidas as equações que conduzem à expressão geral de ganho, mostrada na seção 2.7; Na seção 2.8 a expressão geral é desenvolvida para o caso *bulk*.

### 2.2 Recombinação

Seja a estrutura de bandas de um semiconductor descrita pela figura 2.1:



**Figura 2.1** - Estrutura de bandas esquemática de um semiconductor. Note que o mínimo e o máximo de cada uma das bandas estão alinhados (bandgap direto)

Consideramos que o mínimo da banda de condução e o máximo da banda de valência estão alinhadas no ponto  $\vec{k} = 0$ . Neste caso dizemos que o *bandgap* é **direto**. Para um dado  $\vec{k}$ , as taxas de transições estimulada e espontânea são dadas por:

$$\Gamma_{STIM} = \rho(E_{21})[B_{21}f_2f_1 - B_{12}(1-f_1)(1-f_2)] \quad (2.1)$$

$$\Gamma_{SP} = A_{21}f_2f_1 \quad (2.2)$$

onde  $B_{12}$  é a taxa de absorção estimulada,  $B_{21}$  é a taxa de emissão estimulada,  $A_{21}$  é a taxa de emissão espontânea,  $\rho(E_{21})$  é a densidade de fótons com energia igual a energia de transição entre os estados 2 e 1,  $f_2$  é a probabilidade do estado na banda de condução estar ocupado e  $f_1$  é a probabilidade do estado na banda de valência ter uma lacuna.

As funções de probabilidades de Fermi-Dirac são dadas por:

$$f(E, E_{FC}) = f_2 = \frac{1}{e^{(E_C - E_{FC})/k_B T} + 1} \quad (2.3)$$

$$f(E, E_{FV}) = f_1 = \frac{1}{e^{(E_V - E_{FV})/k_B T} + 1}$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzman e  $T$  é a temperatura considerada,  $E_{FC}, E_{FV}$  são as energias dos quase-níveis de Fermi da banda de condução e da banda de valência, considerando que os elétrons e as lacunas formam dois sistemas em quase-equilíbrio, cujas densidades volumétricas são dadas pelas seguintes expressões:

$$N_e = \int \rho_C(E) f(E, E_{FC}) dE \quad (2.4)$$

$$N_b = \int \rho_V(E) f(E, E_{FV}) dE$$

onde  $N_e$  é a densidade de elétrons na banda de condução,  $N_b$  é a densidade de lacunas na banda de valência,  $\rho_C(E)$  é a densidade de estados na banda de condução e  $\rho_V(E)$  é a densidade de estados na banda de valência.  $N_e$  e  $N_b$  são valores fornecidos; portanto,  $E_{FC}$  e  $E_{FV}$  são valores de energia que resolvem as integrais contidas em 2.4. O cálculo dos quase-níveis de Fermi é desenvolvido no **capítulo 4**, onde introduzimos a constante  $\Delta\mu = E_{FC} - E_{FV}$  que indica o quão fora do equilíbrio o sistema está. A densidade de fótons numa certa energia  $E_{21} = E_C(\vec{k}) - E_V(\vec{k})$  é dada por:

$$\rho(E_{21}) = N(E_{21})P(E_{21}) \quad (2.5)$$

onde  $N(E_{21})$  é a densidade de estados de fótons e  $P(E_{21})$  é a probabilidade do fóton ocupar o estado, dada pela probabilidade de Bose-Einstein:

$$P(E_{21}) = \frac{1}{e^{(E_{21}/kT)} - 1} \quad (2.6)$$

Seja a condição de equilíbrio, em que o semiconductor está numa cavidade fechada e o sistema isolado, todos à temperatura  $T$ ; esperamos que  $\Delta\mu$  seja nulo e a distribuição de estados fotônicos seja igual à distribuição de estados de um corpo negro:

$$\Delta\mu \equiv E_{FC} - E_{FV} = 0; N(E_{21}) \rightarrow N_{\text{corponegro}}(E_{21}) \quad (2.7)$$

No equilíbrio, as taxas de transições estimulada e espontânea se igualam:

$$\Gamma_{STIM} = \Gamma_{SP} \quad (2.8)$$

Das equações 2.1 e 2.2 obtemos, a partir da igualdade da equação 2.8:

$$\frac{A_{21}}{B_{21} - B_{12} \frac{(1-f_1)(1-f_2)}{f_2 f_1}} = -\rho(E_{21}) \quad (2.9)$$

Após manipulações algébricas, a equação 2.9 pode ser assim expressa:

$$\frac{A_{21}}{B_{21} - B_{12} e^{(E_{21}/kT)}} = -\rho(E_{21}) \quad (2.10)$$

Da equação 2.5 obtemos:

$$\frac{A_{21}}{B_{12} e^{(E_{21}/kT)} - B_{21}} = \frac{N_{\text{corponegro}}(E_{21})}{e^{(E_{21}/kT)} - 1} \quad (2.11)$$

O lado direito da equação 2.11 é a densidade de estados fotônicos de Planck para corpo negro [Eisberg, 1985]. A igualdade é satisfeita se:

$$\begin{aligned} B_{12} &= B_{21} \\ A_{21} &= N_{\text{corponegro}}(E_{21}) B_{12} \end{aligned} \quad (2.12)$$

As relações da equação 2.12 são conhecidas como relações de Einstein [Svelto, 1982]. Ou seja, os coeficientes de emissão estimulada e absorção devem ser iguais e relacionados com o coeficiente de emissão espontânea através da distribuição de estados fotônicos de um corpo negro.

### Conceito de Ganho Óptico

Seja  $\rho_0$  a densidade inicial de fótons que atravessa uma cavidade ao longo de uma dimensão, por exemplo, ao longo do eixo  $\hat{z}$ . Seja  $\rho(E)$  esta mesma densidade inicial modificada após percorrer uma distância  $z$  da cavidade. Obviamente como a taxa de emissão estimulada depende da densidade de fótons, temos que  $\rho(E) = \rho_0(E) e^{gz}$ . O conceito de ganho óptico está

relacionado com a taxa de variação desta densidade ao longo da cavidade [Ogata,1990]; ou seja

$\frac{d\rho(E)}{dz} = g\rho(E)$ , onde  $g$  é o ganho relacionado a esta cavidade. Obtemos também:

$$\frac{d\rho(E)}{dz} = \frac{d\rho(E)}{dt} \cdot \frac{dt}{dz} = \frac{d\rho(E)}{dt} \cdot \frac{1}{v_g} \Rightarrow g = \frac{\Gamma}{\rho(E)v_g} \quad (2.13)$$

Onde  $\Gamma = \frac{d\rho(E)}{dt}$  é a taxa de transição e  $v_g$  é a velocidade de grupo dos fótons. Estamos

interessados no ganho resultante do processo de recombinação estimulada. A partir das relações de Einstein (2.12) e da equação 2.1, a equação do ganho (2.13) pode ser reescrita como:

$$g(E_{21}) = \frac{\Gamma_{STIM}}{\rho(E_{21})v_g} = \frac{B_{21}(f_2 + f_1 - 1)}{v_g} \quad (2.14)$$

A equação 2.14 expressa o valor do ganho para uma determinada energia  $E_{21} = E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k})$ , ou seja, para um mesmo valor de  $\vec{k}$ . Entretanto, para que haja ganho, é necessário considerarmos a condição fora de equilíbrio:

$$g(E_{21}) > 0 \Rightarrow f_2 + f_1 > 1 \Rightarrow \Delta\mu > E_c - E_v = E_{Transição} \quad (2.15)$$

A implicação da condição de não-equilíbrio expressa em 2.15 é melhor explicada no **capítulo 4**, através da análise da dependência de  $\Delta\mu$  com a concentração de portadores.

### 2.3 Densidade de Estados de Portadores nas Bandas para *Bulk*

Esta seção é pertinente ao desenvolvimento das seções posteriores em nossos cálculos do ganho óptico no caso de bandas parabólicas  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ . No espaço  $\mathbf{k}$ , aproximamos o número de estados presentes em uma esfera de raio  $k$  para o caso contínuo [Ashcroft, 1976]:

$$N = 2 \cdot \frac{4\pi k^3}{3} \cdot \frac{1}{(2\pi/L)^3} = 2 \cdot \frac{4\pi k^3}{3} \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \quad (2.16)$$

Onde  $V$  é o volume da cavidade. O número de estados entre  $k$  e  $k + \Delta k$ , por unidade de volume, é dado por:

$$\rho(k) = \frac{d(N/V)}{dk} = 2 \cdot 4\pi k^2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} = \frac{k^2}{\pi^2} \quad (2.17)$$

O resultado da equação 2.17 é conhecido por densidade de estados (por unidade de volume e de energia) para o caso de bandas parabólicas.

## 2.4 Regra de Ouro de Fermi

Para obtermos as taxas de emissão de fótons com a transição entre dois níveis quânticos de elétrons, necessitamos tratar a perturbação de uma onda eletromagnética ao sistema. De acordo com a teoria de perturbação dependente do tempo [Cohen-Tannoudji, 1977]:

$$H = H_0 + \mathcal{H}f \quad (2.18)$$

onde  $H_0$  é o hamiltoniano independente do tempo e  $\mathcal{H}f$  é o hamiltoniano dependente do tempo. O hamiltoniano não perturbado  $H_0$  satisfaz:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_0}{\partial t} = H_0 \Psi_0 \quad (2.19)$$

$$\Psi_0 = \sum_n a_n^{(0)} u_0^{(n)} e^{\frac{-iE_0^{(n)}t}{\hbar}} \quad (2.20)$$

onde consideramos que  $H_0 u_0^{(n)} = E_0 u_0^{(n)}$  e  $\int u_0^{(n)} u_0^{(m)} d^3\vec{r} = \delta_{nm}$

Seja a equação:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (H_0 + \mathcal{H}f)\Psi \quad (2.21)$$

Podemos sempre expandir  $\Psi$  na base  $u$  no tempo  $t = 0$ ; para qualquer tempo  $t$ , obtemos:

$$\Psi = \sum_n a_n(t) u_0^{(n)} e^{\frac{-iE_0^{(n)}t}{\hbar}} \quad (2.22)$$

Substituindo a equação 2.22 em 2.21, multiplicando ambos os lados da igualdade por  $u_0^{(s)}$  e integrando em todo o espaço, obtemos:

$$\dot{a}_s = \frac{-i}{\hbar} \sum_n a_n(t) \langle s | \mathcal{H}f | n \rangle e^{\frac{i(E_0^{(s)} - E_0^{(n)})t}{\hbar}} \quad (2.23)$$

onde o termo  $\langle s | \mathcal{H}f | n \rangle = \int u_0^{(s)} \mathcal{H}f u_0^{(n)} d^3\vec{r} \equiv \mathcal{H}f_{sn}$  é a matriz de transição. Integrando ambos os lados da equação 2.23, obtemos:

$$\int_0^t \dot{a}_s dt = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t \sum_n a_n(t) \langle s | \mathcal{H}f | n \rangle e^{\frac{i(E_0^{(s)} - E_0^{(n)})t}{\hbar}} dt \quad (2.24)$$

Se a perturbação for pequena,  $a_n(t)$  varia muito mais lentamente que os outros termos do lado direito da equação 2.24. Portanto:

$$a_s(t) \cong a_s(0) - \frac{i}{\hbar} \sum_n a_n(0) \int_0^t \mathcal{H}_{sn}(t) e^{\frac{i(E_0^{(s)} - E_0^{(n)})t}{\hbar}} dt \quad (2.25)$$

Convencionamos que a perturbação ocorre no instante  $t = 0$ . Anterior a este instante, o sistema encontra-se em um estado  $m$ ; portanto  $a_m = \delta_{mn} a_n$  ∴

$$a_s(t) = 0 - \frac{i}{\hbar} a_m \int_0^t \mathcal{H}_{sm}(t) e^{\frac{i(E_0^{(s)} - E_0^{(m)})t}{\hbar}} dt \quad (2.26)$$

Seja  $a_m = 1$ . Assumimos que a dependência temporal do hamiltoniano  $\mathcal{H}$  seja oscilatório

**(Interação Onda Eletromagnética-Átomo).** Seja  $\mathcal{H} = H' \text{sen}(\omega t) = H' \left( \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}}{2i} \right)$ ; logo

obtemos:

$$a_s(t, \omega) = -\frac{1}{2\hbar} H'_{sm} \int_0^t \left( e^{i(\omega_{sm} + \omega)t} - e^{i(\omega_{sm} - \omega)t} \right) dt = \frac{H'_{sm}}{2i\hbar} \left[ \frac{1 - e^{i(\omega_{sm} + \omega)t}}{\omega_{sm} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{sm} - \omega)t}}{\omega_{sm} - \omega} \right] \quad (2.27)$$

Onde  $\omega_{sm} = \frac{E_0^{(s)} - E_0^{(m)}}{\hbar}$ . A probabilidade de transição do sistema a partir do estado inicial

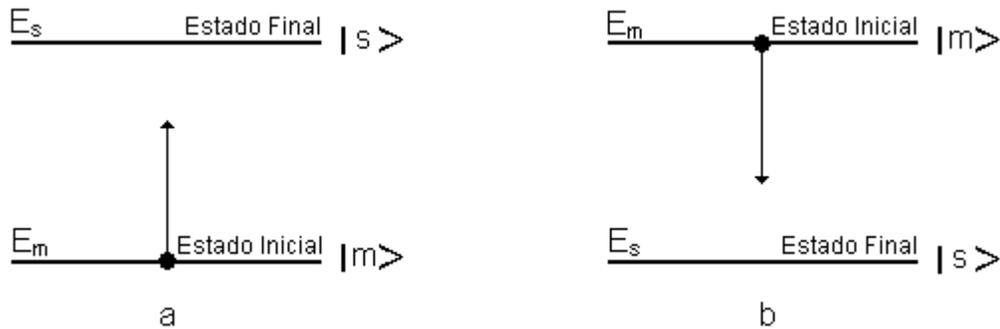
$a_m(0)$  para o estado final  $a_s(t, \omega)$  é dada pela seguinte expressão:

$$\mathcal{P}_{ms}(t, \omega) = |a_s(t, \omega)|^2 \quad (2.28)$$

Substituindo 2.27 em 2.28, obtemos:

$$\mathcal{P}_{ms}(t, \omega) = \frac{|H'_{sm}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{sm} + \omega)t}}{\omega_{sm} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{sm} - \omega)t}}{\omega_{sm} - \omega} \right|^2 \quad (2.29)$$

Para resolvermos a equação 2.29 faz-se necessário a análise da figura 2.2:



**Figura 2.2** - Disposição relativa das energias  $E_s$  e  $E_m$  associadas aos estados inicial e final.

Se  $E_m < E_s$  (fig. 2.2a), a transição  $|m\rangle \rightarrow |s\rangle$  ocorre através da absorção de um quantum de energia  $\hbar\omega$ . Se, por outro lado,  $E_m > E_s$  (fig. 2.2b), a transição  $|m\rangle \rightarrow |s\rangle$  ocorre através da emissão de um quantum de energia  $\hbar\omega$ . Assumimos o caso em que há absorção, ou seja,  $\omega_{sm} > 0$ ; toda a dedução que se segue é análoga ao caso em que há emissão. Reescrevemos a equação 2.29 da seguinte forma:

$$\mathcal{P}_{ms}(t, \omega) = \frac{|H'_{sm}|^2}{4\hbar^2} |A_- - A_+|^2 \quad (2.30)$$

$$A_+ = \frac{1 - e^{i(\omega_{sm} + \omega)t}}{\omega_{sm} + \omega} = -ie^{i(\omega_{sm} + \omega)t/2} \frac{\text{sen}[(\omega_{sm} + \omega)t/2]}{(\omega_{sm} + \omega)/2}$$

$$A_- = \frac{1 - e^{i(\omega_{sm} - \omega)t}}{\omega_{sm} - \omega} = -ie^{i(\omega_{sm} - \omega)t/2} \frac{\text{sen}[(\omega_{sm} - \omega)t/2]}{(\omega_{sm} - \omega)/2}$$

Se fixarmos o tempo  $t$ , a probabilidade de transição torna-se função apenas da variável  $\omega$ . A função de probabilidade apresenta valores máximos quando ocorre o fenômeno da ressonância, ou seja, quando  $\omega \cong \omega_{sm}$  ou  $\omega \cong -\omega_{sm}$ . Seja  $\omega = \omega_{sm}$ ; logo obtemos que  $A_-$  converge a um valor definido e  $A_+ \rightarrow 0$ , pois  $\omega_{sm} \gg 1$ .

Após todas estas considerações, calculamos a equação 2.30:

$$\mathcal{P}_{ms}(t, \omega) = \frac{|H'_{sm}|^2}{4\hbar^2} \left| -ie^{i(\omega_{sm} - \omega)t/2} \frac{\text{sen}[(\omega_{sm} - \omega)t/2]}{(\omega_{sm} - \omega)/2} \right|^2 = |H'_{sm}|^2 \frac{\text{sen}^2[(E - E_{sm})t/2\hbar]}{(E - E_{sm})^2} \quad (2.31)$$

Se temos  $\rho_f(E)$  estados de fótons com energia entre  $E$  e  $E + \Delta E$ , por unidade de volume, a probabilidade de transição de fótons é dada por:

$$P(t, E) = \int_E^{E+\Delta E} \mathcal{P}_{ms}(t, E) \rho_f(E) dE \quad (2.32)$$

Seja  $\Delta E \ll E$ ; logo obtemos:

$$P(t, E) = |H'_{sm}|^2 \rho_f(E) \frac{\text{sen}^2[(E - E_{sm})t/2\hbar]}{(E - E_{sm})^2} \quad (2.33)$$

Seja  $\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{\text{sen}^2 \alpha x}{\pi \alpha x^2} = \delta(x)$ ; este limite pode ser aplicado à equação 2.33 se extrapolamos o

tempo de transição entre os estados inicial e final para infinito ( $t \rightarrow \infty$ ), resultando:

$$P(t, E) = \frac{\pi |H'_{sm}|^2}{2\hbar} \rho_f(E) \delta(E - E_{sm}) t \quad (2.34)$$

Para finalizar, a probabilidade de transição de fótons, por unidade de tempo, conhecida como **regra de ouro de Fermi** [Cohen-Tannoudji, 1977], é definida como:

$$W(E) = \frac{\pi |H'_{sm}|^2}{2\hbar} \rho_f(E) \delta(E - E_{sm}) \quad (2.35)$$

A probabilidade de transição de fótons  $W(E)$  é a própria taxa de emissão ou absorção entre dois níveis discretos, dados pelos coeficientes  $B_{21}$  e  $B_{12}$ , onde  $\rho_f(E) = 1$  para emissão ou absorção estimuladas. Para a taxa de emissão espontânea  $A_{21}$ ,  $\rho_{sp}(E) = N(E)$ .

## 2.5 Interação Onda Eletromagnética-Átomo

Supomos, na equação 2.26, que o hamiltoniano dependente do tempo  $\mathcal{H}$  fosse oscilatório, ou seja,  $\mathcal{H} = H' \sin(\omega t)$ . Seja o hamiltoniano  $\mathcal{H}$  a interação entre uma onda eletromagnética e um elétron do átomo dado por:

$$\mathcal{H} = -\frac{q}{m_0} \vec{A} \cdot \vec{p} \quad (2.36)$$

Onde  $q$  é a carga do elétron,  $m_0$  é a massa de repouso do elétron e  $\vec{p}$  é o momento do elétron;  $\vec{A}$  é o vetor escalar da onda eletromagnética. Na aproximação semi-clássica,  $\vec{\mathcal{E}} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ ; seja o campo elétrico contínuo:

$$\vec{\mathcal{E}} = E_0 \hat{e} \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (2.37)$$

Onde  $\hat{e}$  é a polarização do campo elétrico. O fluxo da onda eletromagnética é dado por:

$$S = \left\langle \vec{\mathcal{E}} \times \vec{\mathcal{H}}^* \right\rangle = \frac{\varepsilon_0 E_0^2 c}{2n} \quad (2.38)$$

Onde  $c$  é a velocidade da luz,  $\varepsilon_0$  é a permissividade elétrica no vácuo e  $n$  é o índice de refração do meio. De maneira análoga, o fluxo de um fóton é dado por:

$$S = \hbar \omega \frac{c}{n} \quad (2.39)$$

Igualando as equações 2.38 e 2.39, obtemos que  $E_0 = \left(\frac{2\hbar\omega}{\epsilon_0}\right)^{1/2}$ ; substituindo o valor da amplitude do campo elétrico na equação 2.37, obtemos:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \Rightarrow \vec{A} = -E_0 \hat{e} \frac{1}{\omega} \text{sen}(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) = -\left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \omega}\right)^{1/2} \text{sen}(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \hat{e} \quad (2.40)$$

Substituindo 2.40 em 2.36:

$$\mathcal{H}f = \frac{q}{m_0} \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \omega}\right)^{1/2} \text{sen}(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) (\hat{e} \cdot \vec{p}) \quad (2.41)$$

Consideremos  $\vec{k} \cdot \vec{r} \ll 1$ ; logo  $\mathcal{H}f = \frac{q}{m_0} \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \omega}\right)^{1/2} (\hat{e} \cdot \vec{p}) \text{sen}(\omega t)$ . Portanto:

$$\mathcal{H}f = H' \text{sen}(\omega t) = \frac{q}{m_0} \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \omega}\right)^{1/2} (\hat{e} \cdot \vec{p}) \text{sen}(\omega t) \Rightarrow H' = \frac{q}{m_0} \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \omega}\right)^{1/2} (\hat{e} \cdot \vec{p}) \quad (2.42)$$

A partir da equação 2.42, o termo  $H'_{sm}$  pode ser expresso da seguinte forma:

$$H'_{sm} = \langle s | H' | m \rangle = \frac{q}{m_0} \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \omega}\right)^{1/2} \langle s | (\hat{e} \cdot \vec{p}) | m \rangle \quad (2.43)$$

Finalmente, podemos reescrever a equação 2.35 como:

$$W(E) = \frac{\pi q^2 |\langle s | (\hat{e} \cdot \vec{p}) | m \rangle|^2}{m_0^2 \epsilon_0 \omega} \delta(E - E_{sm}) = \frac{\pi q^2 |M_{12}|^2}{m_0^2 \epsilon_0 \omega} \delta(E - E_{sm}) \quad (2.44)$$

Onde  $M_{12} = \langle s | (\hat{e} \cdot \vec{p}) | m \rangle = \langle \varphi_1 | (\hat{e} \cdot \vec{p}) | \varphi_2 \rangle$  é conhecido como **matriz de transição**.

## 2.6 Matriz de Transição

Seja a matriz de transição dada por:

$$M_{12} = \langle \varphi_1 | (\hat{e} \cdot \vec{p}) | \varphi_2 \rangle = \hat{e} \cdot \langle \varphi_1 | \vec{p} | \varphi_2 \rangle = \hat{e} \cdot \mathbf{P}_{12} \quad (2.45)$$

Onde  $\mathbf{P}_{12} = \langle \varphi_1 | \vec{p} | \varphi_2 \rangle$ . Seja o comutador  $[P^2, \vec{X}] = -2i\hbar \vec{P}$ . Logo podemos reescrever:

$$\langle \varphi_1 | \vec{p} | \varphi_2 \rangle = -\frac{1}{2i\hbar} \langle \varphi_1 | [P^2, \vec{X}] | \varphi_2 \rangle = -\frac{1}{2i\hbar} [\langle \varphi_1 | P^2 \vec{X} | \varphi_2 \rangle - \langle \varphi_1 | \vec{X} P^2 | \varphi_2 \rangle] \quad (2.46)$$

Seja  $\frac{P^2}{2m}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ ; A equação 2.46 pode ser reduzida a:

$$\langle\varphi_1|\vec{p}|\varphi_2\rangle = \frac{im}{\hbar}(E_1 - E_2)\langle\varphi_1|\vec{X}|\varphi_2\rangle = im\omega\langle\varphi_1|\vec{X}|\varphi_2\rangle \quad (2.47)$$

Onde  $\omega$  é a frequência do fóton emitido ou absorvido. Portanto:

$$M_{12} = im\omega\hat{e}\cdot\langle\varphi_1|\vec{X}|\varphi_2\rangle = im\omega\hat{e}\cdot\mathbf{X}_{12} \quad (2.48)$$

Onde  $\mathbf{X}_{12} = \langle\varphi_1|\vec{X}|\varphi_2\rangle$ . As equações 2.45 e 2.48 são equivalentes. Em ambas notamos o produto escalar com o versor  $\hat{e}$  (polarização do campo elétrico). Este produto escalar deverá ser integrado em todo o espaço  $\mathbf{k}$ , mantendo-se uma polarização fixa (no caso de uma cavidade linear, polarização TE ou TM).

## 2.7 Transições Entre Bandas

A equação 2.14 pode ser reescrita, se substituirmos o termo  $B_{21}$  pela equação 2.44:

$$g(E_{21}) = \frac{\pi q^2 |M_{12}|^2 \delta(E - E_{21})(f_2 + f_1 - 1)}{m_0^2 \varepsilon_0 \omega v_g} = \frac{\pi q^2 \hbar |M_{12}|^2 \delta(E - E_{21})(f_2 + f_1 - 1)}{m_0^2 \varepsilon_0 E_{21} v_g} \quad (2.49)$$

Em um semiconductor teremos transições entre um elétron na banda de condução ( $\vec{k}_2 = \vec{k}_c$ ) e uma lacuna na banda de valência ( $\vec{k}_1 = \vec{k}_v$ ). Neste ponto faremos uma consideração importante: na teoria desenvolvida por **E. O. Kane** [Kane, 1956] constatamos que a banda de valência é composta de 3 bandas distintas duplamente degeneradas em  $\vec{k} = 0$ , vindas dos orbitais tipo s-p (banda de lacunas leves,  $J = 3/2$  e  $m_j = \pm 1/2$ , banda de lacunas pesadas,  $J = 3/2$  e  $m_j = \pm 3/2$  e banda de *split-off*,  $J = 1/2$  e  $m_j = \pm 1/2$ , esta última separada energeticamente pela interação spin-órbita, uma vez que seu momento angular orbital é nulo). Todas participam do processo de recombinação de elétrons-lacunas. Em geral deveríamos considerar todas as bandas de valência. Porém, a densidade de estados de portadores na banda de lacunas pesadas é muito maior comparado às bandas de lacunas leves e de *split-off*. Mais ainda, a probabilidade de termos lacunas na banda *split-off* é muito menor comparado às outras duas. Portanto, a banda de valência que participa efetivamente das transições é a banda de lacunas pesadas. Deste ponto em diante, o termo banda de valência refere-se somente a banda de lacunas pesadas. Integrando a equação

2.49 em todo o espaço  $\mathbf{k}_C$  (relativo à banda de condução) e em todo o espaço  $\mathbf{k}_V$  (relativo à banda de valência), obtemos:

$$g(E_f, E_{FC}, E_{FV}) = C(E_f) \iiint \iiint |M_{12}|^2 F(f_2, f_1) \delta(E - E_f) \rho(\vec{k}_C) \rho(\vec{k}_V) d^3\vec{k}_C d^3\vec{k}_V \quad (2.50)$$

Onde  $E_f$  é a energia do fóton ( $E_{21}$ ),  $E_{FC}$  é o quasi-nível de Fermi de condução,  $E_{FV}$  é o quasi-nível de Fermi de valência,  $C(E_f) = \frac{\pi q^2 \hbar}{m_0^2 \varepsilon_0 E_f v_g}$ ,  $F(f_2, f_1) = (f_2 + f_1 - 1)$  são as funções de probabilidade de Fermi e  $\rho(\vec{k}_C), \rho(\vec{k}_V)$  são as funções densidade de estados das bandas de condução e valência, respectivamente.

## 2.8 Bulk

Consideremos uma estrutura semicondutora sem qualquer confinamento de dimensões na escala nanométrica, denominado daqui por diante de *bulk*. O ganho do semicondutor se dá através do processo de recombinação entre elétrons e lacunas existentes, respectivamente, nas bandas de condução e valência. Para proceder ao cálculo de ganho de bulk, é necessário assumirmos algumas condições:

As bandas de condução e valência são supostas parabólicas ( $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ )

As transições são verticais, ou seja, ocorrem para o mesmo vetor de onda (**regra de seleção de  $\vec{k}$** ), em que  $|\vec{k}_C| = |\vec{k}_V| = k$ .

A partir destas considerações, a equação 2.50 pode ser simplificada:

$$g_{bulk}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) = C(E_f) \int |M_{12}|^2 F(f_2(k), f_1(k)) \delta(E(k) - E_f) \rho(k) dk \quad (2.51)$$

Onde a densidade de estados  $\rho(k)$ , dada pela equação 2.17, engloba o termo  $4\pi k^2$ . Notemos que, para resolvermos (2.51), necessitamos da matriz de transição, o que implica o conhecimento do elemento de matriz do momento linear  $p$  entre os estados iniciais e finais,  $P$ . Uma maneira de fazê-lo de forma indireta é utilizando o “método  $k \cdot p$ ” da **teoria de Kane** [Kane, 1956]. Neste tratamento, funções de onda de elétrons e lacunas são construídas a partir das soluções **tipo s** e **tipo p** das ligações s-p nas estruturas do diamante ou *zinc-blended*. Mais ainda, obtemos as energias das bandas de lacunas leves, pesadas e *split-off* justamente em função do elemento de matriz  $P$ , dadas pelas seguintes relações:

$$E_c = E_{gap} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k^2 P^2}{3} \left( \frac{2}{E_{gap}} + \frac{1}{E_{gap} + \Delta} \right) = E_{gap} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \quad (2.52)$$

$$E_{vhh} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}} \quad (2.53)$$

$$E_{vlh} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{2\hbar^2 k^2 P^2}{3E_{gap}} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}} \quad (2.54)$$

$$E_{so} = -\Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 k^2 P^2}{3(E_{gap} + \Delta)} = -\Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}} \quad (2.55)$$

Onde  $P \equiv -\frac{i}{m} \langle S | p_x | X \rangle = -\frac{i}{m} \langle S | p_y | Y \rangle = -\frac{i}{m} \langle S | p_z | Z \rangle$ ,  $\Delta$  é a energia de *split-off*,

$\frac{1}{m_c} = \frac{1}{m_0} + \frac{4P^2}{3E_{gap}} + \frac{2P^2}{3(E_{gap} + \Delta)}$  é a massa efetiva do elétron,  $m_{hh}$  é a massa do buraco pesado,

$\frac{1}{m_{lh}} = \frac{1}{m_0} - \frac{4P^2}{3E_{gap}}$  é a massa do buraco leve e  $\frac{1}{m_{so}} = \frac{1}{m_0} - \frac{2P^2}{3(E_{gap} + \Delta)}$  é a massa de *split-off*

*band*. A equação 2.52 pode ser reescrita como:

$$P^2 = \left| \langle S | p_x | X \rangle \right|^2 = m_0 \left( \frac{m_0}{m_c} - 1 \right) \frac{E_{gap} (E_{gap} + \Delta)}{2 \left( \frac{2\Delta}{3} + E_{gap} \right)} \quad (2.56)$$

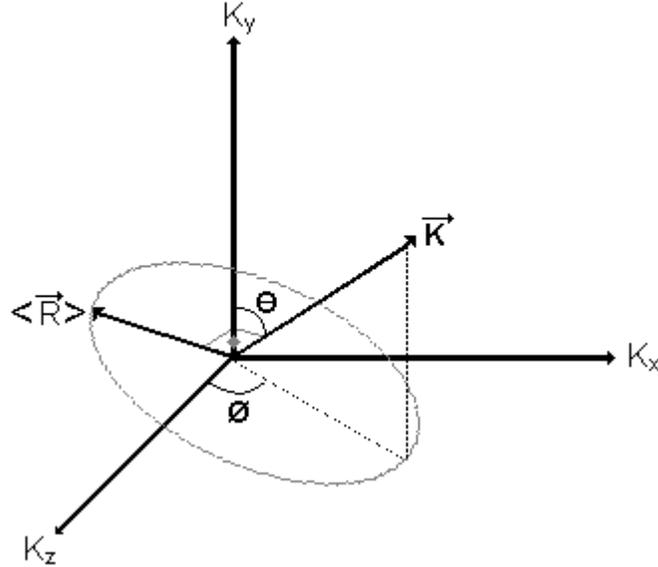
Lembramos que  $m_c$ ,  $E_{gap}$  e  $\Delta$  são valores obtidos experimentalmente. Portanto, a partir de parâmetros experimentais das bandas, pode-se obter a matriz de transição. Ou seja, a solução da equação 2.48 conduz a solução da equação 2.45 (ambas são equivalentes). Para concluirmos a avaliação da matriz de transição é importante considerar uma média espacial do elemento de matriz para o caso de uma polarização fixa do campo eletromagnético. Na teoria de **E. O. Kane**, o vetor  $\langle \vec{R} \rangle$  pode ser escrito como [Esaki *et al*, 1970]:

$$\langle \vec{R} \rangle \cdot \vec{x} = R(\cos(\theta) \text{sen}(\phi) + j \cos(\phi)) \quad (2.57)$$

$$\langle \vec{R} \rangle \cdot \vec{y} = -R \text{sen}(\theta) \quad (2.58)$$

$$\langle \vec{R} \rangle \cdot \vec{z} = R(\cos(\theta) \cos(\phi) - j \text{sen}(\phi)) \quad (2.59)$$

Onde  $R = \frac{\langle S | eX | P_x \rangle}{\sqrt{2}}$  é o elemento de matriz do vetor dipolo elétrico entre o orbital  $S$  e o orbital  $P_x$  ( $e$  é a carga elementar). Os ângulos  $\theta$  e  $\phi$  se referem ao espaço  $\mathbf{k}$ , em que, dado um vetor  $\vec{k}$ ,  $\langle \vec{R} \rangle \perp \vec{k}$ , conforme a figura 2.3:



**Figura 2.3** - Espaço K sobre o qual é integrada a matriz de transição de bulk, note que não há restrições sobre qualquer eixo considerado.

Seja a polarização do campo elétrico  $\hat{e} // \hat{x}$ ; Integrando  $|\langle \vec{R} \rangle \cdot \hat{e}|^2$  em todo o espaço  $\mathbf{k}$  e normalizando a integral, obtemos:

$$\frac{\iiint |\langle \vec{R} \rangle \cdot \hat{e}|^2 d^3 \vec{k}}{4\pi k^3 / 3} = \frac{\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} |\langle \vec{R} \rangle \cdot \hat{e}|^2 d\Omega}{4\pi} = \frac{\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} |R(\cos(\theta)\text{sen}(\phi) + j \cos(\phi))|^2 \text{sen}(\theta) d\theta d\phi}{4\pi} \quad (2.60)$$

$$= \frac{|R|^2}{4\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} (\cos^2(\theta)\text{sen}^2(\phi) + \cos^2(\phi)) \text{sen}(\theta) d\theta d\phi = \frac{2|R|^2}{3}$$

A partir das equações 2.45, 2.48 e 2.56, obtemos:

$$|R|^2 = \frac{e^2 \hbar^2}{2m^2 E^2} P^2 = \frac{e^2 \hbar^2}{4E^2} \left( \frac{1}{m_c} - \frac{1}{m_0} \right) \frac{E_{gap}(E_{gap} + \Delta)}{\left( \frac{2\Delta}{3} + E_{gap} \right)} \quad (2.61)$$

Seja a matriz de transição dada por:

$$|M_{12}|^2 = m^2 \omega^2 |\langle \vec{R} \rangle \cdot \hat{e}|^2 = \frac{m^2 E^2}{e^2 \hbar^2} |\langle \vec{R} \rangle \cdot \hat{e}|^2 \quad (2.62)$$

A partir das equações 2.60 e 2.61, a matriz de transição para *bulk*, integrada em todo o espaço  $\mathbf{k}$ , pode ser reescrita como:

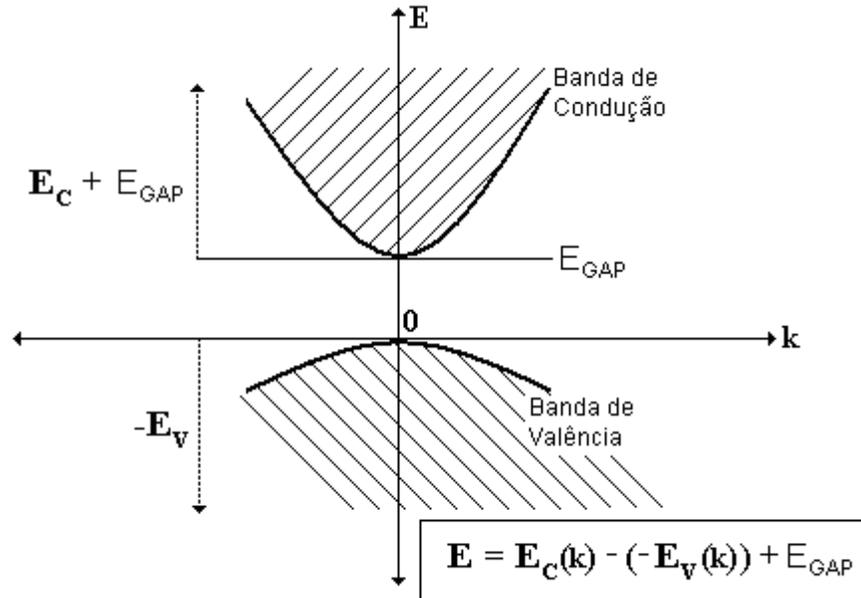
$$|M_{bulk}|^2 = \frac{m^2 E^2}{e^2 \hbar^2} \frac{2|R|^2}{3} = \frac{m_0^2}{6} \left( \frac{1}{m_c} - \frac{1}{m_0} \right) \frac{E_{gap} (E_{gap} + \Delta)}{\left( \frac{2\Delta}{3} + E_{gap} \right)} \quad (2.63)$$

Seja  $m_c \ll m_0$ ; se considerarmos transições somente com o mesmo spin, temos de multiplicar a equação 2.63 pelo fator  $1/2$ . Portanto:

$$|M_{bulk}|^2 = \frac{m_0^2}{12} \frac{E_{gap} (E_{gap} + \Delta)}{m_c \left( \frac{2\Delta}{3} + E_{gap} \right)} \quad (2.64)$$

A matriz de transição para *bulk* não depende do vetor de onda  $k$ . Depende somente de valores experimentais, a saber, a separação spin-órbita  $\Delta$ , o gap de energia e a massa efetiva da banda de condução. Uma vez com a matriz de transição, partimos para a resolução da equação 2.51.

Estabelecemos o referencial dos valores de energia, conforme a figura 2.4:



**Figura 2.4** - Referencial de energia adotado no diagrama de bandas para o cálculo do ganho do bulk.

A energia mais baixa de transição será a energia de *bandgap*. A partir deste referencial, podemos reescrever a equação 2.51 da seguinte forma:

$$g_{bulk}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) = C(E_f) |M_{bulk}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{F}(k(x)) \delta(x) \frac{dx}{dk} \quad (2.65)$$

$$\text{Onde } x(k) = E_{gap} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} - \left( -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}} \right) - E_f, \quad \frac{dx}{dk} = \frac{2\hbar^2 k(m_c + m_{hh})}{2m_c m_{hh}} = \frac{\hbar^2 k}{m_r} \quad e$$

$\mathfrak{F}(k) = \rho(k)(f_2(k) + f_1(k) - 1)$ . Portanto, obtemos:

$$x(k_0) = 0 \Rightarrow E_{gap} + \frac{\hbar^2 k^2 (m_c + m_{hh})}{2m_c m_{hh}} - E_f = 0 \Rightarrow k_0 = \left( \frac{2m_r (E_f - E_{gap})}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (2.66)$$

A partir do valor encontrado na equação 2.66, aplicamos a função Delta de Dirac na equação 2.65 e obtemos:

$$g_{bulk}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) = C(E_f) |M_{bulk}|^2 \mathfrak{F}(k_0) \frac{m_r}{\hbar^2 k_0} = C(E_f) |M_{bulk}|^2 \frac{\rho(k_0) m_r}{\hbar^2 k_0} (f_2(k_0) + f_1(k_0) - 1) \quad (2.67)$$

Para finalizar, substituímos todos os termos do cálculo do ganho para *bulk*:

$$\begin{aligned} g_{bulk}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) &= \frac{\pi q^2 \hbar}{m_0^2 \varepsilon_0 E_f v_g} \frac{m_0^2}{12} \frac{E_{gap} (E_{gap} + \Delta)}{m_c \left( \frac{2\Delta}{3} + E_{gap} \right)} \frac{m_r}{\hbar^2 \pi^2} \left( \frac{2m_r (E_f - E_{gap})}{\hbar^2} \right)^{1/2} (f_2(k_0) + f_1(k_0) - 1) \\ &= \frac{q^2 m_r}{12 \hbar \pi \varepsilon_0 E_f v_g} \frac{E_{gap} (E_{gap} + \Delta)}{m_c \left( \frac{2\Delta}{3} + E_{gap} \right)} \left( \frac{2m_r (E_f - E_{gap})}{\hbar^2} \right)^{1/2} (f_2(k_0) + f_1(k_0) - 1) \end{aligned} \quad (2.68)$$

$$\text{Onde } f_2(k_0) = \frac{1}{e^{\left[ \left( \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_c} \right) - E_{FC} \right] / kT} + 1} \quad e \quad f_1(k_0) = \frac{1}{e^{\left[ \left( \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_{hh}} \right) - E_{FV} \right] / kT} + 1}$$

Os conceitos desenvolvidos neste capítulo são o alicerce para calcularmos o ganho quando confinamos uma estrutura semicondutora em uma, duas ou três dimensões, denominadas, daqui por diante, de nanoestruturas, tema do próximo capítulo. Ou seja, tentamos sintetizar neste capítulo a base teórica do cálculo de ganho óptico em geral. Desta forma podemos partir para os casos específicos de nosso interesse nesta dissertação.

## Capítulo 3

---

# Desenvolvimento do Cálculo de Ganho para Poço, Fio e Ponto Quântico.

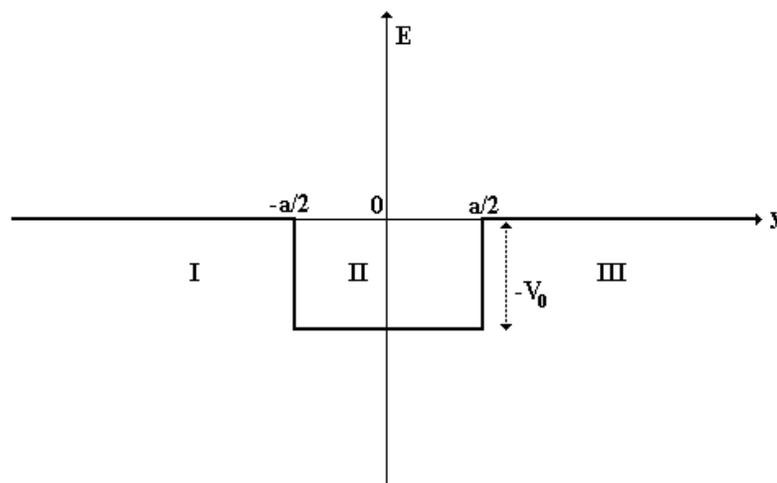
---

### 3.1 Introdução

No capítulo 2 resolvemos o cálculo de ganho para o caso *bulk*. Neste capítulo desenvolvemos as expressões de ganho para as nanoestruturas semicondutoras; ou seja, para os casos em que confinamos uma (1D), duas (2D) ou três dimensões (3D) do material semicondutor, os quais denominamos, respectivamente, de poço, fio e ponto quântico. Na **seção 3.2** resolvemos o problema da quantização de energia em um poço quântico. Na **seção 3.3** calculamos o ganho do poço quântico propriamente dito. De modo similar, as **seções 3.4 e 3.5** referem-se ao fio quântico, assim como as **seções 3.6 e 3.7** referem-se ao ponto quântico.

### 3.2 Soluções do Poço Quântico Finito

Seja um poço quântico descrito pela figura 3.1:



**Figura 3.1** - Diagrama do poço quântico de energia cujo valor da espessura é  $a$  e o valor da descontinuidade de energia é  $V_0$

Dada a equação de Schroedinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V\right) \Psi(y) = E \Psi(y) \quad (3.1)$$

As funções de onda que solucionam o poço finito descrito pela figura 3.1 são dadas por:

$$\begin{aligned} y < -a/2 &\Rightarrow \Psi_I(y) = Ae^{\eta y} + A'e^{-\eta y} \\ a/2 \leq y \leq a/2 &\Rightarrow \Psi_{II}(y) = Be^{iky} + B'e^{-iky} \\ y > a/2 &\Rightarrow \Psi_{III}(y) = Ce^{\eta y} + C'e^{-\eta y} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Onde  $\eta = \sqrt{\frac{-2m_I E}{\hbar^2}}$ ,  $k = \sqrt{\frac{2m_{II}(E + V_0)}{\hbar^2}}$  e  $m_I = m_{III} \neq m_{II}$ . Considere  $-V_0 < E < 0$ . As

funções de onda da equação 3.2 representam as soluções gerais. Na figura 3.1, as regiões I e III chamamos de barreira e a região II chamamos de poço. Neste modelo, usamos aproximação de massa efetiva: a massa efetiva do portador na barreira difere da massa efetiva do portador no poço. Isto se deve ao fato da barreira ser constituída de um material semiconductor cujas propriedades diferem do material semiconductor do poço. Para que as soluções expressas em 3.2 sejam finitas,  $A' = C = 0$ . Aplicando as condições de contorno em  $y = -a/2$ , para que as soluções sejam contínuas e analíticas neste ponto, obtivemos:

$$\begin{cases} \Psi_I(y)|_{y=-a/2} = \Psi_{II}(y)|_{y=-a/2} \\ \frac{d\Psi_I(y)}{dy}|_{y=-a/2} = \frac{d\Psi_{II}(y)}{dy}|_{y=-a/2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B = A \left( \frac{\eta + ik}{2ik} \right) e^{(-\eta + ik)a/2} \\ B' = -A \left( \frac{\eta - ik}{2ik} \right) e^{-(\eta + ik)a/2} \end{cases} \quad (3.3)$$

Repetimos o procedimento no ponto  $y = a/2$  e obtivemos:

$$\begin{cases} \Psi_{II}(y)|_{y=a/2} = \Psi_{III}(y)|_{y=a/2} \\ \frac{d\Psi_{II}(y)}{dy}|_{y=a/2} = \frac{d\Psi_{III}(y)}{dy}|_{y=a/2} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} C' = A \left( \frac{\eta^2 + k^2}{2k\eta} \right) \text{sen}(ka) \\ C = A \left( \frac{e^{-\eta a}}{4ik\eta} \right) [(\eta + ik)^2 e^{ika} - (\eta - ik)^2 e^{-ika}] \end{cases} \quad (3.4)$$

Como  $C = 0$ , obtemos:

$$\left( \frac{\eta - ik}{\eta + ik} \right)^2 = e^{2ika} \Rightarrow \left( \frac{\eta - ik}{\eta + ik} \right) = \pm e^{ika} \quad (3.5)$$

Seja  $k_0 = \sqrt{k^2 + \eta^2} = \sqrt{\frac{2}{\hbar^2} [(m_{II} - m_I)E + m_{II}V_0]}$  e  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{II}} < 0$

Se  $\left(\frac{\eta - ik}{\eta + ik}\right) = -e^{ika}$ , então  $\frac{\eta}{k} = \tan\left(\frac{ka}{2}\right)$ . Desta forma, temos as seguintes relações:

$$\frac{1}{\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)} = 1 + \tan^2\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{k^2 + \eta^2}{k^2} = \left(\frac{k_0}{k}\right)^2 \quad (3.6)$$

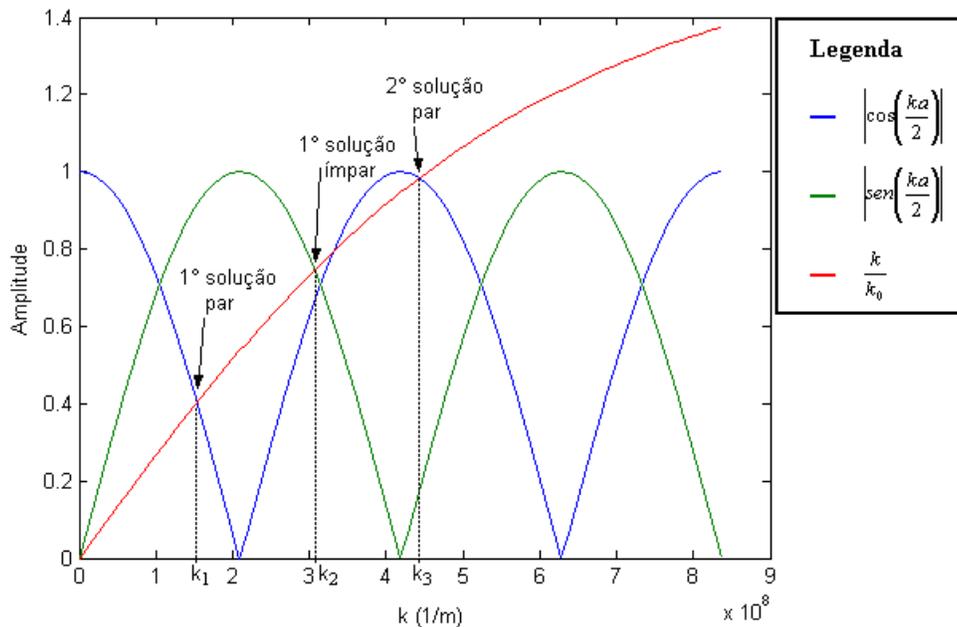
Que se torna equivalente ao conjunto de equações:

$$\left|\cos\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0}, \quad \tan\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 \quad (3.7)$$

Se  $\left(\frac{\eta - ik}{\eta + ik}\right) = e^{ika}$ , de maneira análoga, obtemos:

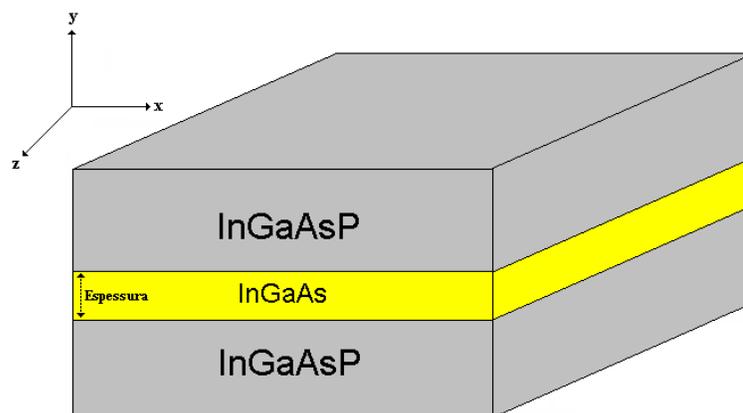
$$\left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right| = \frac{k}{k_0}, \quad \tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0 \quad (3.8)$$

Os valores de  $k$  que satisfazem a equação transcendental 3.7 são chamados de soluções pares e os valores de  $k$  que satisfazem a equação transcendental 3.8 são chamados soluções ímpares, conforme figura 3.2. O conjunto destes valores (pares e ímpares) conduzem-nos às soluções discretas de energia do poço finito.



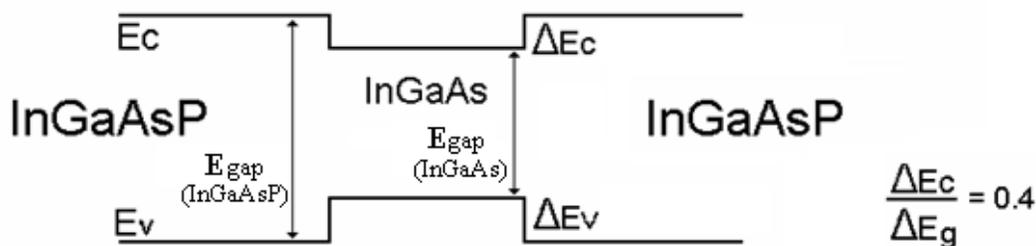
**Figura 3.2** - Soluções discretas de  $k$  que satisfazem as equações 3.7 e 3.8. Note que o conjunto de soluções é finito e depende do número de interseções que satisfazem estas expressões.

Seja a nanoestrutura 1D representada pela figura 3.3:



**Figura 3.3** - Poço quântico de InGaAs imerso em InGaAsP

O sistema *InGaAsP / InGaAs* é mencionado nas nanoestruturas 1D, 2D e 3D. O diagrama que representa a descontinuidade de energia das bandas de condução e valência entre os dois materiais semicondutores (válido nos três tipos de confinamento) pode ser visualizado na figura 3.4:



**Figura 3.4** - Diagrama de energia do poço quântico representado pela figura 3.3. Note que as descontinuidades de energia existem em razão da diferença da energia de bandgap entre os dois materiais.

Onde  $\Delta E_g = \Delta E_C + \Delta E_V = E_{GAP}(InGaAsP) - E_{GAP}(InGaAs)$ . Os valores de  $\Delta E_C$  e  $\Delta E_V$  são obtidos a partir da relação  $\frac{\Delta E_C}{\Delta E_g} = 0.4$ . Este valor foi obtido experimentalmente [Minch *et al*, 1999] e depende do tipo de material semiconductor utilizado. No sistema  $In_{(1-x)}Ga_{(x)}As_{(y)}P_{(1-y)} / InGaAs$  (ambos com parâmetro de rede casado com InP), o valor mencionado de  $\frac{\Delta E_C}{\Delta E_g}$  mantém-se aproximadamente constante.

### 3.3 Cálculo de Ganho do Poço Quântico

Considere a espessura do poço muito menor comparado às outras dimensões do mesmo. O cálculo de ganho para *bulk* pode ser aplicada no plano do poço; em outras palavras, pode ser considerado de forma bidimensional. Na direção perpendicular ao plano do poço, o cálculo do ganho é resolvido para cada valor de energia permitido em ambas as bandas; ou seja, para cada valor  $k_y$  permitido na banda de condução e na banda de valência. A partir destas considerações, podemos reescrever a equação 2.50 (capítulo 2, seção 2.7) para o poço quântico da seguinte forma:

$$g_{\text{poço}}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) = C(E_f) \sum_{ic, iv}^{L_C, L_V} \iiint \left[ \left| M_{\text{poço}}(E_{C_{ic}}, E_{V_{iv}}, \bar{k}_C, \bar{k}_V) \right|^2 \cdot F[f_1(E_{V_{iv}}, \bar{k}_V), f_2(E_{C_{ic}}, \bar{k}_C)] \right] \cdot \delta(E - E_f) \cdot \rho(E_{C_{ic}}, \bar{k}_C) \cdot \rho(E_{V_{iv}}, \bar{k}_V) \cdot d^2 \bar{k}_C d^2 \bar{k}_V \quad (3.9)$$

Analogamente, consideramos a aproximação de bandas parabólicas e regra de seleção de  $k$  no plano do poço (capítulo 2, seção 2.8). Consideramos também que as transições relacionadas aos níveis discretos do poço entre a banda de condução e valência são permitidas apenas entre níveis de mesmo número quântico  $L$ , ou seja,  $ic = iv$ . Desta forma, a equação 3.9 pode ser simplificada:

$$g_{\text{poço}}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) = C(E_f) \sum_i^L \int \left[ \left| M_{\text{poço}}(E_i, k_{\parallel}) \right|^2 \cdot F[f_1(E_{V_i}, k_{\parallel}), f_2(E_{C_i}, k_{\parallel})] \right] \cdot \delta(E - E_f) \cdot \rho(E_i, k_{\parallel}) \cdot dk_{\parallel} \quad (3.10)$$

Onde  $k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_z^2}$  e  $L = \min(L_C, L_V)$ . A matriz de transição para o poço quântico é obtida de maneira análoga ao caso do *bulk*. A diferença consiste na redução de 1D, ou seja, a matriz é calculada no plano  $k_x k_z$  do poço, conforme mostra a figura 3.5:

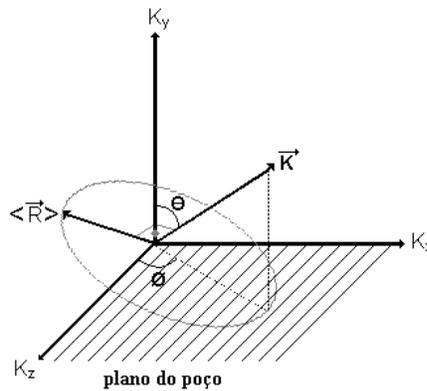


Figura 3.5 - Espaço K sobre o qual é integrado a matriz de transição do poço.

Seja a polarização do campo elétrico  $\hat{e} // \hat{x}$ ; Integrando  $|\langle \vec{R} \rangle \cdot \hat{e}|^2$  no plano  $k_x k_z$  e normalizando a integral, obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\int_0^{2\pi} |\langle \vec{R} \rangle \cdot \hat{e}|^2 d\phi}{2\pi} &= \frac{\int_0^{2\pi} |R(\cos(\theta)\text{sen}(\phi) + j\cos(\phi))|^2 d\phi}{2\pi} = \frac{|R|^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} (\cos^2(\theta)\text{sen}^2(\phi) + \cos^2(\phi)) d\phi \\ &= \frac{|R|^2(1 + \cos^2(\theta))}{2} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Onde  $\theta$  é o ângulo entre o vetor  $\vec{k}$  e  $\vec{k}_y$ , tal que  $\cos(\theta) = \frac{k_y}{k}$ . Seja  $k_y$  uma das soluções discretas  $k_i$  do poço quântico. De acordo com a suposição de bandas parabólicas,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \cos^2(\theta) = \frac{E_i}{E} \quad \text{onde} \quad E_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} \quad \text{são as energias quantizadas no poço e}$$

$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = E_i + E(k_{//})$  é a energia total. A partir das equações 3.11 e 2.61 (**capítulo 2, seção 2.8**), a matriz de transição para poço quântico, integrada no plano  $k_x k_z$ , pode ser reescrita como:

$$|M_{\text{poço}}(E_i, k_{//})|^2 = \frac{m^2 E^2 |R|^2 (1 + \cos^2(\theta))}{e^2 \hbar^2 2} = \frac{m_0^2}{8} \left( \frac{1}{m_c} - \frac{1}{m_0} \right) \frac{E_{\text{gap}}(E_{\text{gap}} + \Delta)}{\left( \frac{2\Delta}{3} + E_{\text{gap}} \right)} \left( 1 + \frac{E_i}{E_i + E(k_{//})} \right) \quad (3.12)$$

Seja  $m_c \ll m_0$ ; se considerarmos transições somente com o mesmo spin, temos de multiplicar a equação 3.12 pelo fator  $1/2$ . Portanto:

$$|M_{\text{poço}}(E_i, k_{//})|^2 = \frac{m_0^2}{16} \frac{E_{\text{gap}}(E_{\text{gap}} + \Delta)}{m_c \left( \frac{2\Delta}{3} + E_{\text{gap}} \right)} \left( 1 + \frac{E_i}{E_i + E(k_{//})} \right) \quad (3.13)$$

No plano  $k_x k_z$ , aproximamos o número de estados presentes em uma circunferência de raio  $k$  para o caso contínuo:

$$N = 2 \cdot \pi k^2 \cdot \frac{1}{(2\pi/L)^2} = 2 \cdot \pi k^2 \cdot \frac{A}{(2\pi)^2} \quad (3.14)$$

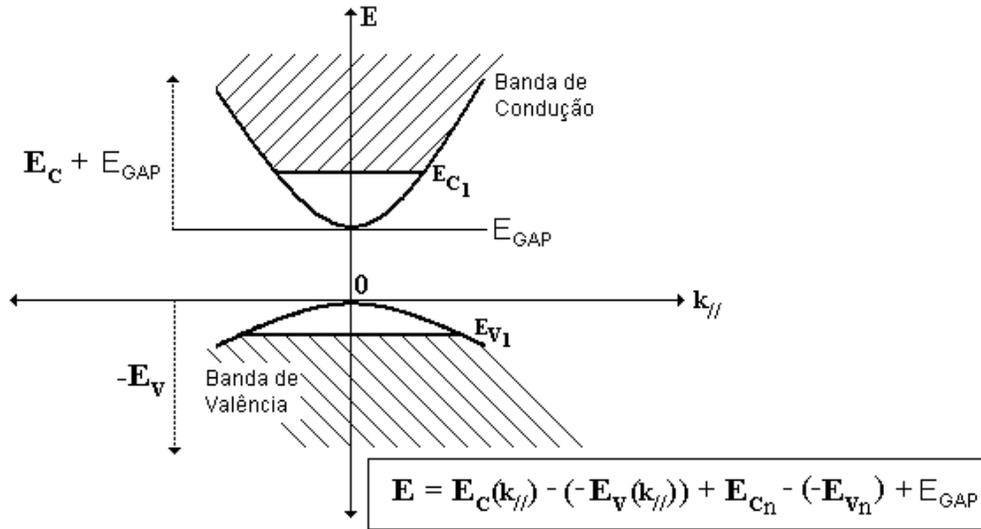
Onde  $A$  é a área da cavidade. O número de estados entre  $k$  e  $k + \Delta k$ , por unidade de área, é dado por:

$$\sigma(k) = \frac{d(N/A)}{dk} = 2 \cdot 2\pi k \cdot \frac{1}{(2\pi)^2} = \frac{k}{\pi} \quad (3.15)$$

Entretanto, estamos interessados na densidade de estados por unidade de volume; portanto:

$$\rho(k) = \frac{1}{a} \frac{d(N/A)}{dk} = \frac{k}{a\pi} \quad (3.16)$$

Onde  $a$  é a espessura do poço. A densidade de estados  $\rho(E_i, k_{//})$  é igual a  $\frac{k_{//}}{a\pi}$  para cada energia  $E_i$  permitida no poço. Sem prejuízo de notação,  $\rho(E_i, k_{//}) = \rho(k_{//})$ . Seja o referencial de energia conforme figura 3.6:



**Figura 3.6** - Referencial de energia adotado no diagrama de bandas para o cálculo do ganho do poço.

A energia mais baixa de transição será a soma da energia de *bandgap* mais as energias do primeiro nível excitado do poço quântico de cada uma das bandas (condução e valência). Portanto, a partir do referencial da figura 3.6, a equação 3.10 pode ser reescrita como:

$$g_{\text{poço}}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) = C(E_f) \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} |M_{\text{poço}}(E_{C_i}, k(x))|^2 \mathcal{F}(k(x)) \delta(x) \frac{dx}{dx/dk} \quad (3.17)$$

$$x(k) = E_{gap} + E_{C_i} + E_{V_i} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_c} - \left( -\frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{hh}} \right) - E_f, \text{ (consideramos o sub-índice do somatório}$$

implícito),  $\frac{dx}{dk} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}}{m_r}$  e  $\mathfrak{S}(k) = \rho(k_{\parallel}) [f_1(E_{V_i}, k_{\parallel}) + f_2(E_{C_i}, k_{\parallel}) - 1]$ . Portanto, obtemos:

$$x(k_0) = 0 \Rightarrow E_{gap} + E_{C_i} + E_{V_i} + \frac{\hbar^2 k^2 (m_c + m_{hh})}{2m_c m_{hh}} - E_f = 0 \Rightarrow k_0 = \left( \frac{2m_r (E_f - E_T)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (3.18)$$

Onde  $E_T = E_{GAP} + E_{C_i} + E_{V_i}$ . A partir do valor encontrado na equação 3.18, aplicamos a função Delta de Dirac na equação 3.17 e obtemos:

$$\begin{aligned} g_{poço}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) &= C(E_f) \sum_i^L |M_{poço}(E_{C_i}, k_0)|^2 \mathfrak{S}(k_0) \frac{m_r}{\hbar^2 k_0} \\ &= C(E_f) \sum_i^L |M_{poço}(E_{C_i}, k_0)|^2 \frac{\rho(k_0) m_r}{\hbar^2 k_0} [f_1(E_{V_i}, k_0) + f_2(E_{C_i}, k_0) - 1] \end{aligned} \quad (3.19)$$

Para finalizar, substituímos todos os termos do cálculo do ganho para poço quântico:

$$\begin{aligned} g_{poço}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) &= \frac{\pi q^2 \hbar}{m_0^2 \varepsilon_0 E_f v_g} \sum_i^L \frac{m_0^2}{16} \frac{E_{gap}(E_{gap} + \Delta)}{m_c \left( \frac{2\Delta}{3} + E_{gap} \right)} \left( 1 + \frac{E_{C_i}}{E_{C_i} + E(k_0)} \right) \frac{m_r}{\hbar^2 a \pi} F(f_1, f_2) \\ &= \frac{q^2 m_r}{16 \hbar a \varepsilon_0 E_f v_g} \frac{E_{gap}(E_{gap} + \Delta)}{m_c \left( \frac{2\Delta}{3} + E_{gap} \right)} \sum_i^L \left( 1 + \frac{E_{C_i}}{E_{C_i} + E(k_0)} \right) [f_1(E_{V_i}, k_0) + f_2(E_{C_i}, k_0) - 1] \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\text{Onde } f_2(E_{C_i}, k_0) = \frac{1}{e^{\left[ \left( \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_c} \right) + E_{C_i} - E_{FC} \right] / kT} + 1} \text{ e } f_1(E_{V_i}, k_0) = \frac{1}{e^{\left[ \left( \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_{hh}} \right) + E_{V_i} - E_{FV} \right] / kT} + 1}$$

### 3.4 Soluções do Fio Quântico

Considere um fio cujo comprimento seja muito maior que o raio deste fio, como mostra a figura 3.7:

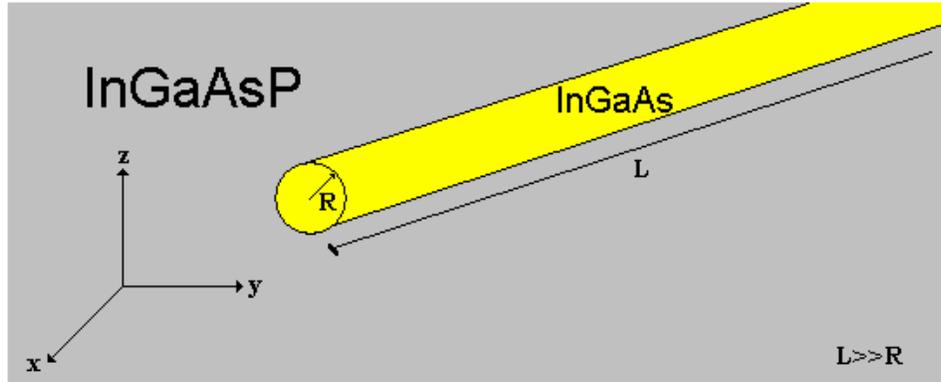


Figura 3.7 - Fio quântico de InGaAs imerso em InGaAsP

As soluções dos valores de energia permitidos no fio quântico podem ser obtidas através das funções de Bessel. Seja a função de onda  $\Psi = \Psi(\rho, \theta)$ . A equação de Schroedinger pode ser reescrita como:

$$\nabla^2 \Psi(\rho, \theta) + k^2 \Psi(\rho, \theta) = 0 \quad (3.21)$$

Onde  $k^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$ . Em coordenadas cilíndricas:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \Psi(\rho, \theta)}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi(\rho, \theta)}{\partial \theta^2} + k^2 \Psi(\rho, \theta) = 0 \quad (3.22)$$

Supomos  $\Psi(\rho, \theta) = P(\rho)\Phi(\theta)$  (soluções separáveis):

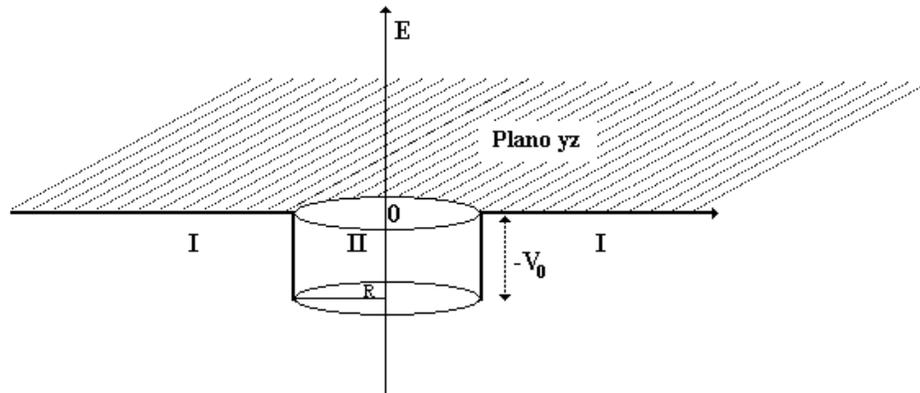
$$\frac{1}{\rho P} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{dP}{d\rho} \right) + \frac{1}{\rho^2 \Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\theta^2} + k^2 = 0 \quad (3.23)$$

Seja  $\Phi(\theta) = Ae^{im\theta} \Rightarrow \frac{d^2 \Phi}{d\theta^2} = -m^2 \Phi$ ; logo obtemos:

$$\rho^2 \frac{d^2 P}{d\rho^2} + \rho \frac{dP}{d\rho} + (\rho^2 k^2 - m^2) P = 0 \quad (3.24)$$

Pela simetria do fio,  $\Phi(\theta) = Ae^{im\theta} = Ae^{im(\theta+2\pi)} = \Phi(\theta+2\pi) \Rightarrow m \in \mathbb{Z}$ .

Seja o fio quântico descrito pela figura 3.8:



**Figura 3.8** - Diagrama bidimensional do poço de energia  $V_0$  de um fio de raio  $R$ .

A figura 3.8 é uma representação bidimensional (seção transversal do fio) do poço de energia do fio. As funções de onda que solucionam a equação 3.24 são dadas por:

$$\begin{aligned} \rho > R &\Rightarrow \Psi_I(\rho) = A'I_\nu(n_I\rho) + AK_\nu(n_I\rho) \\ \rho < R &\Rightarrow \Psi_{II}(\rho) = BJ_\nu(n_{II}\rho) + B'N_\nu(n_{II}\rho) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Onde  $J_\nu(n_{II}\rho)$  é a função de Bessel de primeira ordem,  $N_\nu(n_{II}\rho)$  é a função de Bessel de segunda ordem (função de Neumann),  $I_\nu(n_I\rho)$  e  $K_\nu(n_I\rho)$  são funções de Bessel modificadas,

$n_I = \frac{-2m_I E}{\hbar^2}$  e  $n_{II} = \frac{2m_{II}(E + V_0)}{\hbar^2}$ . Considere  $-V_0 < E < 0$ . Da mesma forma que no poço quântico, usamos a aproximação de massa efetiva ( $m_I \neq m_{II}$ ). Para que as funções de onda expressas em 3.25 sejam finitas:

$$\begin{aligned} \lim_{\rho \rightarrow \infty} I_\nu(n_I\rho) \rightarrow \infty &\Rightarrow A' = 0 \\ \lim_{\rho \rightarrow 0} N_\nu(n_{II}\rho) \rightarrow \infty &\Rightarrow B' = 0 \end{aligned} \quad (3.26)$$

Aplicando as condições de contorno em  $\rho = R$ , para que as soluções sejam contínuas e analíticas neste ponto, obtivemos:

$$\left\{ \begin{aligned} \Psi_I(\rho)|_{\rho=R} &= \Psi_{II}(\rho)|_{\rho=R} \\ \frac{d\Psi_I(\rho)}{d\rho}|_{\rho=R} &= \frac{d\Psi_{II}(\rho)}{d\rho}|_{\rho=R} \end{aligned} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{aligned} AK_\nu(n_I R) &= BJ_\nu(n_{II} R) \\ An_I K'_\nu(n_I R) &= Bn_{II} J'_\nu(n_{II} R) \end{aligned} \right. \quad (3.27)$$

Pelas relações de recorrência das funções de Bessel:

$$\begin{aligned}\frac{J_{\nu-1}(x) - J_{\nu+1}(x)}{2} &= J'_\nu(x) \\ \frac{K_{\nu-1}(x) + K_{\nu+1}(x)}{2} &= -K'_\nu(x)\end{aligned}\quad (3.28)$$

A partir das equações 3.27 e 3.28, obtivemos:

$$\begin{aligned}AK_\nu(n_I R) = BJ_\nu(n_{II} R) &\Rightarrow A = \frac{BJ_\nu(n_{II} R)}{K_\nu(n_I R)} \\ -\left(\frac{BJ_\nu(n_{II} R)}{K_\nu(n_I R)}\right)n_I \frac{K_{\nu-1}(n_I R) + K_{\nu+1}(n_I R)}{2} &= Bn_{II} \frac{J_{\nu-1}(n_{II} R) - J_{\nu+1}(n_{II} R)}{2}\end{aligned}\quad (3.29)$$

Após algumas manipulações, finalmente concluímos que:

$$n_{II} \left( \frac{J_{\nu-1}(n_{II} R) - J_{\nu+1}(n_{II} R)}{J_\nu(n_{II} R)} \right) + n_I \left( \frac{K_{\nu-1}(n_I R) + K_{\nu+1}(n_I R)}{K_\nu(n_I R)} \right) = 0 \quad (3.30)$$

Lembremos que  $n_I, n_{II}$  são funções da energia  $E$ . Dado o raio  $R$  do fio, para cada índice  $\nu$  (que é o próprio valor  $m$  expresso em 3.24), obtemos os valores da energia  $E_n$  que satisfazem a equação 3.30, de modo que o conjunto de soluções pode ser expresso por  $E_{m,n}$ .

### 3.5 Cálculo de Ganho do Fio Quântico

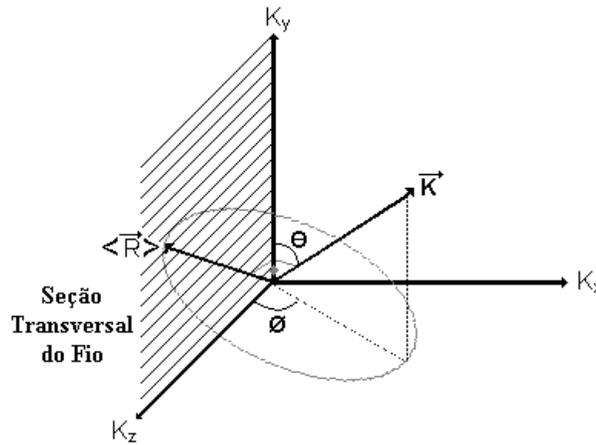
Os passos para se calcular o ganho no caso do fio quântico são similares ao caso do poço. Considere um fio cujo comprimento seja muito maior que o raio deste fio. O cálculo de ganho para *bulk* pode ser aplicado somente na direção axial do fio (unidimensional). Na seção transversal do fio, o cálculo de ganho é resolvido para cada valor de energia  $E_{m,n}$  permitido, na banda de condução e na banda de valência. A partir destas considerações, podemos reescrever a equação 2.50 (capítulo 2, seção 2.7) para o fio quântico da seguinte forma:

$$\begin{aligned}g_{\text{fio}}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) &= \\ C(E_f) \sum_{j_c, j_v}^{M_C, M_V} \sum_{l_c, l_v}^{N_C, N_V} &\iint \left[ \left| M_{\text{fio}}(E_{C(j,l)_c}, E_{V(j,l)_v}, \vec{k}_C, \vec{k}_V) \right|^2 \cdot F \left[ f_1(E_{V(j,l)_v}, \vec{k}_V), f_2(E_{C(j,l)_c}, \vec{k}_C) \right] \right] \\ &\cdot \delta(E - E_f) \cdot \rho(E_{C(j,l)_c}, \vec{k}_C) \cdot \rho(E_{V(j,l)_v}, \vec{k}_V) \cdot d\vec{k}_C d\vec{k}_V\end{aligned}\quad (3.31)$$

Novamente, consideramos a aproximação de **bandas parabólicas e regra de seleção de  $k$  na direção axial do fio** (capítulo 2, seção 2.8). Consideramos também que as **transições** relacionadas aos níveis discretos de energia do fio entre a banda de condução e valência são permitidas apenas **entre níveis de mesmo número quântico  $M, N$** ; ou seja,  $jc = jv$  e  $lc = lv$ . Desta forma, a equação 3.9 pode ser simplificada:

$$g_{fio}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) = C(E_f) \sum_{j,l} \int \left[ \left| M_{fio}(E_{j,l}, k_{\perp}) \right|^2 \cdot F \left[ f_1(E_{V_{j,l}}, k_{\perp}), f_2(E_{C_{j,l}}, k_{\perp}) \right] \cdot \delta(E - E_f) \cdot \rho(E_{j,l}, k_{\perp}) \cdot dk_{\perp} \right] \quad (3.32)$$

Onde  $k_{\perp} = |k_x^2|$  (direção perpendicular à seção transversal do fio),  $M = \min(M_C, M_V)$  e  $N = \min(N_C, N_V)$ . A matriz de transição para o fio quântico é obtida de maneira análoga ao caso do poço. A diferença consiste na redução de 2D, ou seja, a matriz é calculada no eixo axial do fio, conforme mostra a figura 3.9:



**Figura 3.9** - Espaço K sobre o qual é integrada a matriz de transição do fio. Note que a integração ocorre apenas na direção axial do fio.

Seja a polarização do campo elétrico  $\hat{e} // \hat{x}$ ; Como fixamos os ângulo  $\theta$  e  $\phi$ , o valor de  $\left| \langle \vec{R} \rangle \cdot \hat{e} \right|^2$  na direção axial do fio é assim calculado:

$$\left| \langle \vec{R} \rangle \cdot \hat{e} \right|^2 = \left| R(\cos(\theta)\text{sen}(\phi) + j \cos(\phi)) \right|^2 = |R|^2 \left( \cos^2(\theta)\text{sen}^2(\phi) + \cos^2(\phi) \right) \quad (3.33)$$

Onde  $\theta$  é o ângulo entre o vetor  $\vec{k}$  e  $\vec{k}_y$  e  $\phi$  é o ângulo entre a projeção de  $\vec{k}$  (no plano  $xz$ ) e  $\vec{k}_z$ . Desta vez não temos como decompor a energia total considerada nas três componentes

vetoriais. Isto se deve ao fato de  $E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + E_{m,n} = E(k_\perp) + E_{m,n}$  onde  $E_{m,n}$  são as soluções discretas de energia permitidas no fio, que não podem ser decompostas nas componentes  $k_z$  e  $k_y$ .

Entretanto, a partir da relação  $\frac{E_{m,n}}{E} = \cos^2(\theta) + \sin^2(\theta)\cos^2(\phi) = \cos^2(\theta) + (1 - \cos^2(\theta))(1 - \sin^2(\phi))$  obtemos que

$\frac{E_{m,n}}{E} = \cos^2(\theta)\sin^2(\phi) + \cos^2(\phi)$ . Das equações 3.33 e 2.61 (**capítulo 2, seção 2.8**), a matriz de

transição para fio quântico pode ser reescrita como:

$$\left| M_{\text{fio}}(E_{m,n}, k_\perp) \right|^2 = \frac{m^2 E^2 |R|^2}{e^2 \hbar^2} \frac{E_{m,n}}{E} = \frac{m_0^2}{4} \left( \frac{1}{m_c} - \frac{1}{m_0} \right) \frac{E_{\text{gap}}(E_{\text{gap}} + \Delta)}{\left( \frac{2\Delta}{3} + E_{\text{gap}} \right)} \left( \frac{E_{m,n}}{E_{m,n} + E(k_\perp)} \right) \quad (3.34)$$

Seja  $m_c \ll m_0$ ; se considerarmos transições somente com o mesmo spin, temos de multiplicar a equação 3.34 pelo fator  $1/2$ . Portanto:

$$\left| M_{\text{fio}}(E_{m,n}, k_\perp) \right|^2 = \frac{m_0^2}{8} \frac{E_{\text{gap}}(E_{\text{gap}} + \Delta)}{m_c \left( \frac{2\Delta}{3} + E_{\text{gap}} \right)} \left( \frac{E_{m,n}}{E_{m,n} + E(k_\perp)} \right) \quad (3.35)$$

Na direção axial do fio, calculamos o número de estados unidimensional para o caso contínuo:

$$N = 2 \cdot k \cdot \frac{1}{(2\pi/L)} = 2 \cdot k \cdot \frac{L}{(2\pi)} \quad (3.36)$$

Onde  $L$  é o comprimento da cavidade. O número de estados entre  $k$  e  $k + \Delta k$ , por unidade de comprimento, é dado por:

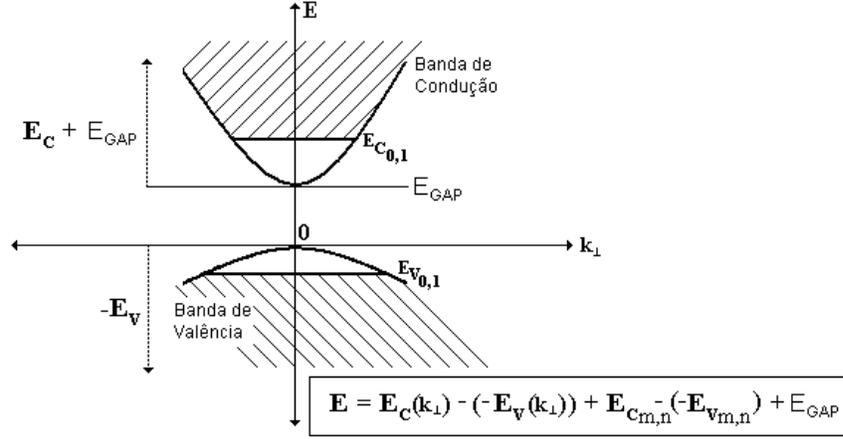
$$\sigma(k) = \frac{d(N/L)}{dk} = 2 \cdot \frac{1}{(2\pi)} = \frac{1}{\pi} \quad (3.37)$$

Entretanto, estamos interessados na densidade de estados por unidade de volume; Portanto:

$$\rho(k) = \frac{1}{\pi R^2} \frac{d(N/L)}{dk} = \frac{1}{\pi^2 R^2} \quad (3.38)$$

Onde  $R$  é o raio do fio. A densidade de estados  $\rho(E_{m,n}, k_{\perp})$  é igual a  $\frac{1}{\pi^2 R^2}$  (constante).

Seja o referencial de energia conforme figura 3.10:



**Figura 3.10** - Referencial de energia adotado no diagrama de bandas para o cálculo do ganho do fio.

A energia mais baixa de transição será a soma da energia de *bandgap* mais as energias do primeiro nível excitado do fio quântico de cada uma das bandas (condução e valência). Portanto, a partir do referencial da figura 3.10, a equação 3.32 pode ser reescrita como:

$$g_{\text{fio}}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) = C(E_f) \frac{1}{\pi^2 R^2} \sum_{j,l} \int_{-\infty}^{\infty} |M_{\text{fio}}(E_{C_{j,l}}, k(x))|^2 \mathfrak{F}(k(x)) \delta(x) \frac{dx}{dx/dk} \quad (3.39)$$

$$x(k) = E_{\text{gap}} + E_{C_{j,l}} + E_{V_{j,l}} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_c} - \left( -\frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{hh}} \right) - E_f, \quad (\text{consideramos o sub-índice do}$$

somatório implícito),  $\frac{dx}{dk} = \frac{\hbar^2 k_{\perp}}{m_r}$  e  $\mathfrak{F}(k) = f_1(E_{V_{j,l}}, k_{\perp}) + f_2(E_{C_{j,l}}, k_{\perp}) - 1$ . Portanto, obtemos:

$$x(k_0) = 0 \Rightarrow E_{\text{gap}} + E_{C_{j,l}} + E_{V_{j,l}} + \frac{\hbar^2 k^2 (m_c + m_{hh})}{2m_c m_{hh}} - E_f = 0 \Rightarrow k_0 = \left( \frac{2m_r (E_f - E_T)}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (3.40)$$

Onde  $E_T = E_{\text{GAP}} + E_{C_{j,l}} + E_{V_{j,l}}$ . A partir do valor encontrado na equação 3.40, aplicamos a função Delta de Dirac na equação 3.39 e obtemos:

$$\begin{aligned}
g_{\text{fio}}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) &= C(E_f) \frac{1}{\pi^2 R^2} \sum_{j,l}^{M,N} \left| M_{\text{fio}}(E_{C_{j,l}}, k_0) \right|^2 \mathfrak{F}(k_0) \frac{m_r}{\hbar^2 k_0} \\
&= C(E_f) \frac{1}{\pi^2 R^2} \sum_{j,l}^{M,N} \left| M_{\text{fio}}(E_{C_{j,l}}, k_0) \right|^2 \frac{m_r}{\hbar^2 k_0} \left[ f_1(E_{V_{j,l}}, k_0) + f_2(E_{C_{j,l}}, k_0) - 1 \right]
\end{aligned} \tag{3.41}$$

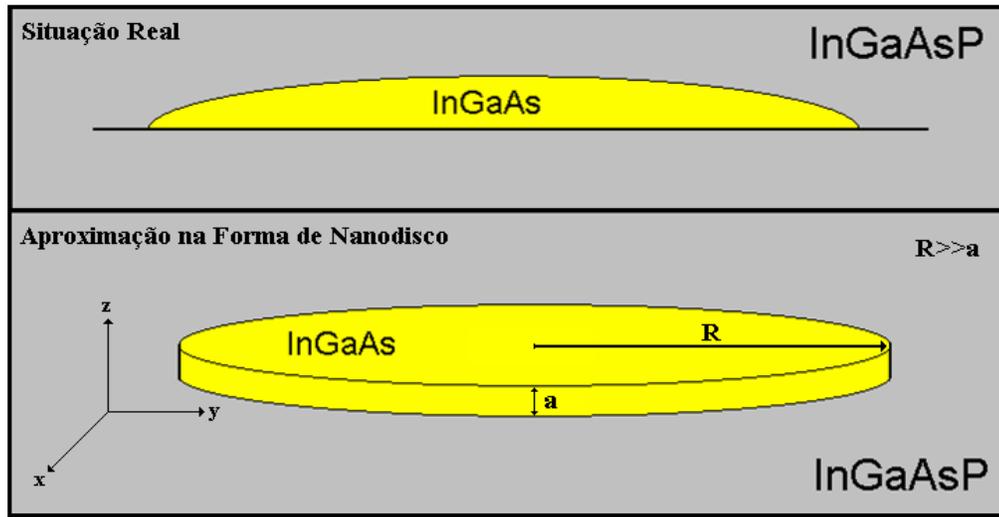
Para finalizar, substituímos todos os termos do cálculo do ganho para fio quântico:

$$\begin{aligned}
g_{\text{fio}}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) &= \\
&\frac{\pi q^2 \hbar}{m_0^2 \varepsilon_0 E_f v_g} \frac{1}{\pi^2 R^2} \sum_{j,l}^{M,N} \frac{m_0^2}{8} \frac{E_{\text{gap}}(E_{\text{gap}} + \Delta)}{m_c \left( \frac{2\Delta}{3} + E_{\text{gap}} \right)} \left( \frac{E_{j,l}}{E_{j,l} + E(k_0)} \right) \frac{m_r}{\hbar^2 \left( \frac{2m_r(E_f - E_T)}{\hbar^2} \right)^{1/2}} F(f_1, f_2) = \\
&\frac{q^2 m_r}{8\hbar \pi R^2 \varepsilon_0 E_f v_g} \frac{E_{\text{gap}}(E_{\text{gap}} + \Delta)}{m_c \left( \frac{2\Delta}{3} + E_{\text{gap}} \right)} \sum_{j,l}^{M,N} \left( \frac{E_{j,l}}{E_{j,l} + E(k_0)} \right) \frac{1}{\left( \frac{2m_r(E_f - E_T)}{\hbar^2} \right)^{1/2}} \left[ f_1(E_{V_{j,l}}, k_0) + f_2(E_{C_{j,l}}, k_0) - 1 \right]
\end{aligned} \tag{3.42}$$

$$\text{Onde } f_2(E_{C_{j,l}}, k_0) = \frac{1}{e^{\left[ \left( \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_c} \right) + E_{C_{j,l}} - E_{FC} \right] / kT} + 1} \text{ e } f_1(E_{V_{j,l}}, k_0) = \frac{1}{e^{\left[ \left( \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_{hh}} \right) + E_{V_{j,l}} - E_{FV} \right] / kT} + 1}$$

### 3.6 Soluções do Ponto Quântico

Seja um ponto quântico representado pela figura 3.11:



**Figura 3.11** - Ponto quântico de InGaAs imerso em InGaAsP. Note que, a partir da situação real, aproximamos o formato ao de um nanodisco.

A aproximação do ponto quântico como nanodisco e a suposição de seu raio muito maior que a espessura do nanodisco ( $R \gg a$ ) nos permite resolver a equação de Schroedinger em duas etapas: primeiro, resolvemos a equação de Schroedinger na direção axial do nanodisco; depois inserimos este resultado na solução bidimensional do disco. Seja a equação de Schroedinger aplicada ao ponto quântico:

$$\nabla^2 \Psi(\rho, \theta, z) + k^2 \Psi(\rho, \theta, z) = 0 \quad (3.43)$$

Onde  $k^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2}$ . Em coordenadas cilíndricas:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \Psi(\rho, \theta, z)}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi(\rho, \theta, z)}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 \Psi(\rho, \theta, z)}{\partial z^2} + k^2 \Psi(\rho, \theta, z) = 0 \quad (3.44)$$

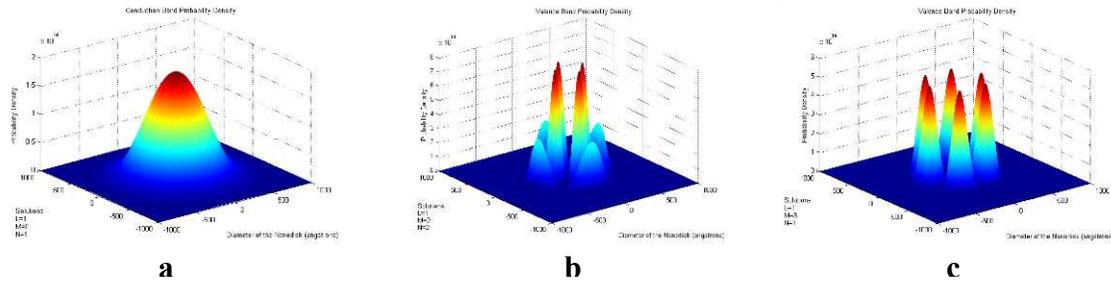
Supomos  $\Psi(\rho, \theta) = P(\rho)\Phi(\theta)Z(z)$  (soluções separáveis):

$$\frac{1}{\rho P} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{dP}{d\rho} \right) + \frac{1}{\rho^2 \Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\theta^2} + \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} + k^2 = 0 \quad (3.45)$$

$Z$  é a função unidimensional que resolve a equação de Schroedinger na direção axial do disco; seja  $Z = Ae^{-il}$  onde  $l$  são as soluções discretas obtidas em um poço finito (**seção 3.2**) de espessura  $a$ . Seja  $\Phi(\theta) = Ae^{im\theta} \Rightarrow \frac{d^2\Phi}{d\theta^2} = -m^2\Phi$ ;  $m \in Z$ ; logo obtemos:

$$\rho^2 \frac{d^2P}{d\rho^2} + \rho \frac{dP}{d\rho} + (\rho^2 s^2 - m^2)P = 0 \quad (3.46)$$

Onde  $s^2 = k^2 - l^2$ . A solução de 3.46 (análoga à solução desenvolvida na **seção 3.4**) nos conduz as funções de Bessel expressas em 3.25, em que  $n_I = \frac{-2m_I E}{\hbar^2}$  e  $n_{II} = \frac{2m_{II}(E + V_0)}{\hbar^2} - l^2$ . Entretanto, lembremos que existe um novo número quântico  $L$  associado ao conjunto de soluções expressas por  $E_{m,n}$ ; portanto, o conjunto global de soluções do ponto quântico é expresso por  $E_{l,m,n}$ . Visualizamos, na figura 3.12, as funções densidade de probabilidade para alguns auto-estados do ponto quântico, gerados por rotinas numéricas em *Matlab*:



**Figura 3.12** – Funções de densidade de probabilidade para alguns auto-estados do nanodisco baseado no sistema InGaAs/InGaAsP, simuladas para o nanodisco de raio 50 nm e espessura 5 nm. Os auto-estados são: (a) Banda de condução  $L=1$ ,  $m=0$ ,  $n=1$ ; (b) Banda de valência  $L=1$ ,  $m=2$ ,  $n=2$ ; (c) Banda de valência  $L=1$ ,  $m=3$ ,  $n=1$ .

O plano em destaque (azul) representa o plano que contém a seção transversal (perpendicular ao eixo  $\hat{z}$  da figura 3.11) do nanodisco. A origem deste plano representa o centro do nanodisco. Note a simetria da função em torno da origem: a circunferência imaginária que delimita a extensão da função sobre o plano é a própria circunferência do nanodisco, de raio  $R$ . Observe que, conforme o número quântico  $m$  aumenta (como observamos em **b** e **c**), o número de picos das funções aumentam por um fator proporcional a 2; conforme o número quântico  $n$  aumenta (como observamos em **b**), ocorre um padrão de difração de picos cujos máximos, naturalmente, diminuem à medida que se afastam dos máximos centrais. Note que o número quântico  $L$  (nos

três casos) é igual a 1; a espessura do nanodisco utilizada nesta simulação permitiu somente a existência de um único nível de energia na direção axial do nanodisco.

### 3.7 Cálculo de Ganho do Ponto Quântico

Os passos para se calcular o ganho no caso do ponto quântico diferem em relação aos casos anteriores. O ponto quântico pode ser visto como um átomo construído de modo artificial: apenas os níveis de energia permitidos no ponto quântico admitem portadores, não havendo, portanto, integração sobre o vetor de onda  $k$ . Considere um ponto no formato de nanodisco cujo raio seja muito maior que a espessura deste nanodisco. A equação 2.50 (**capítulo 2, seção 2.7**) para o ponto quântico pode ser reescrita da seguinte forma:

$$g_{\text{ponto}}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) = C(E_f) \sum_{ic, iv}^{L_C, L_V} \sum_{jc, jv}^{M_C, M_V} \sum_{kc, kv}^{N_C, N_V} \left[ \left| M_{\text{ponto}}(E_{C(i,j,k)c}, E_{V(i,j,k)v}) \right|^2 \cdot F[f_1(E_{V(i,j,k)v}), f_2(E_{C(i,j,k)c})] \right] \cdot \delta(E - E_f) \cdot \rho(E_{C(i,j,k)c}) \cdot \rho(E_{V(i,j,k)v}) \quad (3.47)$$

Consideramos que as **transições** relacionadas aos níveis discretos de energia do ponto entre a banda de condução e valência são permitidas apenas **entre níveis de mesmo número quântico**  $L, M, N$ ; ou seja,  $ic = iv$ ,  $jc = jv$  e  $kc = kv$ . Desta forma, a equação 3.47 pode ser simplificada:

$$g_{\text{ponto}}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) = C(E_f) \sum_{i,j,k}^{L,M,N} \left[ \left| M_{\text{ponto}}(E_{C_{i,j,k}}, E_{V_{i,j,k}}) \right|^2 \cdot F[f_1(E_{V_{i,j,k}}), f_2(E_{C_{i,j,k}})] \right] \cdot \delta(E - E_f) \cdot \rho(E_{i,j,k}) \quad (3.48)$$

Onde,  $L = \min(L_C, L_V)$ ,  $M = \min(M_C, M_V)$  e  $N = \min(N_C, N_V)$ . A matriz de transição no caso do ponto quântico difere dos demais casos, pois como não há integração no espaço  $\mathbf{k}$ , **não utilizamos** o “método  $k \cdot p$ ” da **teoria de Kane**. Ou seja, o único parâmetro que guarda as propriedades da estrutura cristalina das poucas células unitárias no ponto quântico e vizinhança é a massa efetiva. Recapitulando o conceito de matriz de transição, a equação 2.48 (**capítulo 2, seção 2.6**) pode ser reescrita como:

$$|M_{12}|^2 = \left| \frac{imE}{\hbar} \langle \varphi_1 | \hat{e} \cdot \vec{X} | \varphi_2 \rangle \right|^2 = \frac{m^2 E^2}{\hbar^2} \left| \langle \varphi_1 | \hat{e} \cdot \vec{X} | \varphi_2 \rangle \right|^2 \quad (3.49)$$

A matriz de transição de ponto quântico pode ser assim calculada:

$$\begin{aligned}
|M_{\text{ponto}}(E_{C_{l,m,n}}, E_{V_{l,m,n}})|^2 &= \frac{m^2 E^2}{\hbar^2} \left| \langle \Psi_{C_{l,m,n}}(E_{C_{l,m,n}}) | \hat{e} \cdot \vec{X} | \Psi_{V_{l,m,n}}(E_{V_{l,m,n}}) \rangle \right|^2 \\
&= \frac{m^2 E^2}{\hbar^2} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{C_{l,m,n}}^* \hat{e} \cdot \vec{X} \Psi_{V_{l,m,n}}|^2 d^3 \vec{X}}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{C_{l,m,n}}^* \Psi_{V_{l,m,n}}|^2 d^3 \vec{X}}
\end{aligned} \tag{3.50}$$

Onde  $\Psi_{C_{l,m,n}}$  é a função de onda da banda de condução e  $\Psi_{V_{l,m,n}}$  é a função de onda da banda de valência; A partir das seções 3.2, 3.4 e 3.6, podemos representar as funções de onda no ponto quântico:

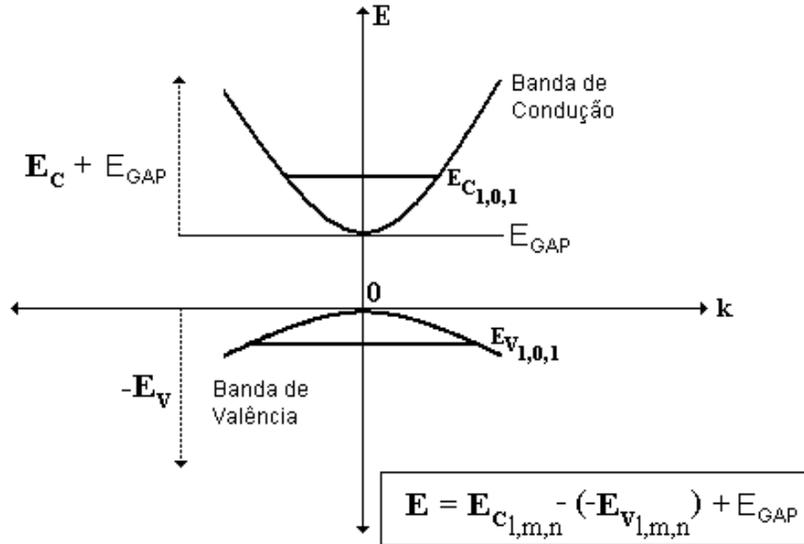
$$\begin{aligned}
z \leq |a/2|, \rho < R &\Rightarrow \Psi_{l,m,n}(\rho, \theta, z) = J_m(n_{II}\rho) \cos(m\theta) \left( \begin{aligned} &\left( \frac{\eta + ik_l}{2ik_l} \right) e^{-(\eta+ik_l)a/2} e^{ik_l z} \\ &+ \left( \frac{\eta - ik_l}{2ik_l} \right) e^{-(\eta-ik_l)a/2} e^{-ik_l z} \end{aligned} \right) \\
z \leq |a/2|, \rho > R &\Rightarrow \Psi_{l,m,n}(\rho, \theta, z) = \frac{J_m(n_{II}R)}{K_m(n_I R)} K_m(n_I \rho) \cos(m\theta) \left( \begin{aligned} &\left( \frac{\eta + ik_l}{2ik_l} \right) e^{-(\eta+ik_l)a/2} e^{ik_l z} \\ &+ \left( \frac{\eta - ik_l}{2ik_l} \right) e^{-(\eta-ik_l)a/2} e^{-ik_l z} \end{aligned} \right) \\
z < -a/2, \rho < R &\Rightarrow \Psi_{l,m,n}(\rho, \theta, z) = J_m(n_{II}\rho) \cos(m\theta) e^{\eta z} \\
z < -a/2, \rho > R &\Rightarrow \Psi_{l,m,n}(\rho, \theta, z) = \frac{J_m(n_{II}R)}{K_m(n_I R)} K_m(n_I \rho) \cos(m\theta) e^{\eta z} \\
z > a/2, \rho < R &\Rightarrow \Psi_{l,m,n}(\rho, \theta, z) = J_m(n_{II}\rho) \cos(m\theta) \left( \frac{\eta^2 + k_l^2}{2k_l \eta} \right) \text{sen}(k_l a) e^{-\eta z} \\
z > a/2, \rho > R &\Rightarrow \Psi_{l,m,n}(\rho, \theta, z) = \frac{J_m(n_{II}R)}{K_m(n_I R)} K_m(n_I \rho) \cos(m\theta) \left( \frac{\eta^2 + k_l^2}{2k_l \eta} \right) \text{sen}(k_l a) e^{-\eta z}
\end{aligned} \tag{3.51}$$

Seja a polarização do campo elétrico  $\hat{e} // \hat{x}$ ; A equação 3.50 é resolvida através de uma rotina computacional utilizando o aplicativo **MatLab**. A densidade de estados no caso de pontos quânticos é dada por:

$$\rho_{\text{ponto}} = 2 \cdot N_{\text{ponto}} \tag{3.52}$$

Onde  $N_{\text{ponto}}$  é a densidade volumétrica de pontos e o fator 2 vem da possibilidade de cada estado ter dois spins diferentes. A literatura científica reporta densidade superficial de pontos da

ordem de  $1 \times 10^{14} \text{ m}^{-3}$  [Leonard *et al*, 1994]; extrapolamos este valor para a densidade volumétrica da ordem de  $1 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$ . Estes valores serão utilizados nos capítulos subseqüentes. Sem prejuízo de notação,  $\rho(E_{i,j,k}) = \rho_{\text{ponto}}$ . Seja o referencial de energia conforme figura 3.13:



**Figura 3.13** - Referencial de energia adotado no diagrama de bandas para o cálculo do ganho do ponto. Note que não há mais um contínuo de estados de energia; existem somente estados discretos.

A energia mais baixa de transição será a soma da energia de *bandgap* mais as energias do primeiro nível excitado do ponto quântico de cada uma das bandas (condução e valência). Não há integração sobre o vetor de onda  $k$ ; as transições ocorrem somente entre estados discretos. Portanto, a função Delta de Dirac não se aplica a equação 3.48, que pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
 g_{\text{ponto}}(E_f, E_{FC}, E_{FV}) &= C(E_f) \sum_{i,j,k}^{L,M,N} \left[ \left| M_{\text{ponto}}(E_{C_{i,j,k}}, E_{V_{i,j,k}}) \right|^2 \cdot F[f_1(E_{V_{i,j,k}}), f_2(E_{C_{i,j,k}})] \cdot \rho_{\text{ponto}} \right] \\
 &= \frac{\pi q^2 \hbar}{m_0^2 \epsilon_0 E_f v_g} \sum_{i,j,k}^{L,M,N} \left[ \left| M_{\text{ponto}}(E_{C_{i,j,k}}, E_{V_{i,j,k}}) \right|^2 \cdot [f_1(E_{V_{i,j,k}}) + f_2(E_{C_{i,j,k}}) - 1] \cdot \rho_{\text{ponto}} \right]
 \end{aligned} \tag{3.53}$$

$$\text{Onde } f_2(E_{C_{i,j,k}}) = \frac{1}{e^{(E_{C_{i,j,k}} - E_{FC})/kT} + 1} \text{ e } f_1(E_{V_{i,j,k}}) = \frac{1}{e^{(E_{V_{i,j,k}} - E_{FV})/kT} + 1}$$

Finalizamos, portanto, o cálculo de ganho para *bulk*, poço, fio e ponto. No capítulo seguinte, desenvolvemos toda a ferramenta computacional, através de rotinas computacionais em **MatLab**, para simular o cálculo do espectro de ganho para os quatro casos sob diferentes níveis de excitação, ou seja densidade de elétrons e lacunas.

## Capítulo 4

---

### Curvas Espectrais de Ganho

---

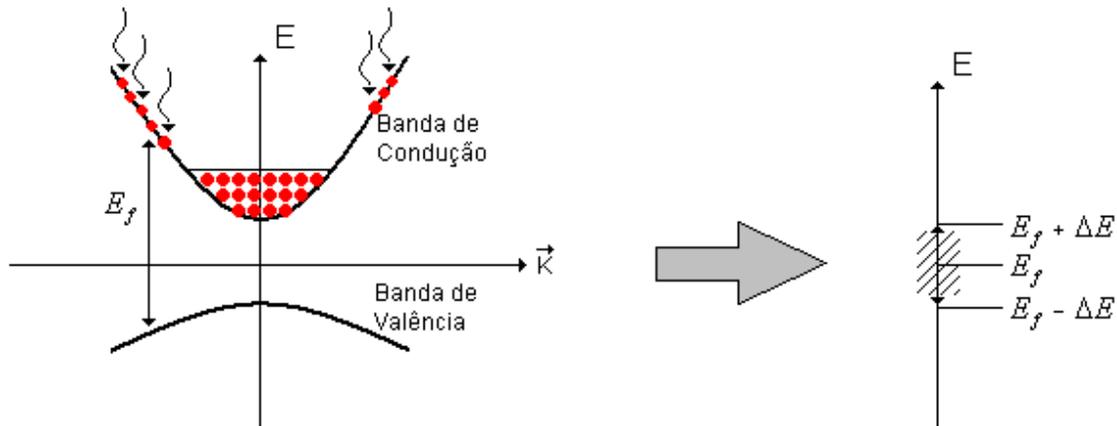
#### 4.1 Introdução

Após desenvolvermos o cálculo de ganho para os quatro casos, neste capítulo apresentamos a simulação computacional destes resultados. Com o intuito de tornar mais realístico nosso modelo teórico, na **seção 4.2** consideramos o espalhamento intrabanda dos portadores que leva a um alargamento nas transições. Na **seção 4.3** calculamos os quase-níveis de Fermi para os quatro casos abordados. Na **seção 4.4** apresentamos os resultados teóricos e comparamos estes resultados. Por fim, na **seção 4.5** consideramos a não-homogeneidade das dimensões dos pontos quânticos e suas implicações.

#### 4.2 Espalhamento Intrabanda

O conceito de energia de quase-nível de Fermi está relacionado à situação em que não há equilíbrio entre as taxas de transição estimulada e espontânea; o tempo de interação entre os próprios elétrons (ou lacunas) é muito menor, da ordem de fração de picosegundos, em comparação com o tempo de interação entre elétrons e lacunas (da ordem de nanosegundos). Esta diferença permite que os elétrons (ou lacunas) estabeleçam uma situação de quase equilíbrio que pode ser descrito pela estatística de Fermi-Dirac dada pela equação 2.3 (**capítulo 2, seção 2.2**) com níveis de Fermi diferenciados para cada sistema (elétron ou lacuna), denominados quase-níveis de Fermi de condução (ou valência). A situação de não-equilíbrio acontece quando injetamos portadores em uma estrutura semicondutora: os elétrons (ou lacunas), quando injetados, estão com energia em geral distinta da situação de quase-equilíbrio. Para que ambos estabeleçam cada qual o seu próprio quase equilíbrio térmico, é necessário que eles termalizem entre si e isto ocorre através do espalhamento entre os portadores em cada uma de suas bandas, ou seja, através de espalhamento intrabanda. A interação entre elétrons (ou lacunas) não é instantânea. O tempo de interação entre elétrons (ou lacunas) é da ordem de picossegundos [Yamada *et al*, 1980]; por conseguinte, a energia do elétron (ou lacuna) que ocupa um

determinado estado não é exata, mas existe uma incerteza associada. Isto também se reflete na energia de transição. A figura 4.1 ilustra de maneira qualitativa este conceito:



**Figura 4.1** - Ilustração do processo de termalização e a incerteza de energia resultante deste processo associada a uma transição qualquer.

Considerando a hipótese bastante plausível que os elétrons e lacunas estabeleçam o quase-equilíbrio com uma dependência exponencial com o tempo, o espectro terá associada uma largura de linha Lorentziana dada que esta curva é a transformada de Fourier da função exponencial. Seja uma distribuição Lorentziana que considera o espalhamento intrabanda da seguinte forma:

$$Dist.Lorentz = \frac{1}{1 + \left( \frac{E - E_f}{\Delta E} \right)^2} \quad (4.1)$$

Onde  $\Delta E = \frac{\hbar}{\Delta t}$  é a relação de incerteza e  $\Delta t \approx 1ps$  é o tempo de transição intrabanda.

Consideramos a integral da expressão do ganho sobre esta distribuição para o intervalo  $E_f - \Delta \varepsilon \leq \varepsilon \leq E_f + \Delta \varepsilon$  em torno do valor central  $E_f$ , em que  $\Delta \varepsilon \cong 10\Delta E$ . Esta distribuição Lorentziana é imposta sobre o ganho com a convolução do ganho espectral e a Lorentziana. O cálculo de ganho modificado pelo espalhamento intrabanda é dado por:

$$g'(E_f, E_{FC}, E_{FV}) = \frac{\int_{E_f - \Delta E}^{E_f - \Delta E} g(E_f, E_{FC}, E_{FV}) \frac{1}{1 + \left(\frac{\varepsilon - E_f}{\Delta E}\right)^2} d\varepsilon}{\int_{E_f - \Delta E}^{E_f - \Delta E} \frac{1}{1 + \left(\frac{\varepsilon - E_f}{\Delta E}\right)^2} d\varepsilon} \quad (4.2)$$

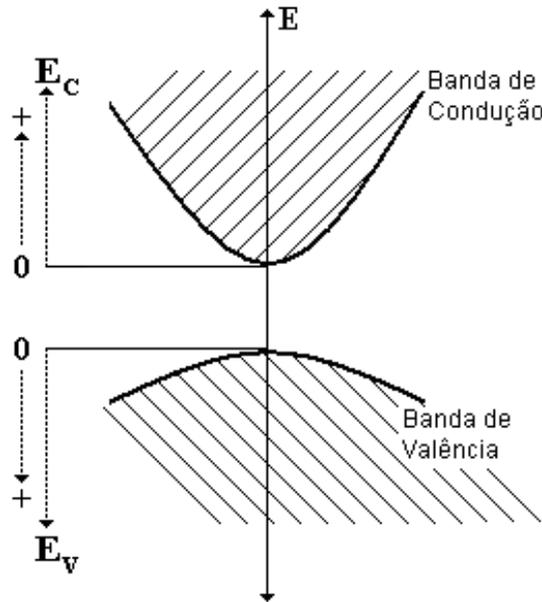
Onde o ganho  $g(E_f, E_{FC}, E_{FV})$  refere-se às equações 2.68 (**capítulo 2, seção 2.8**), 3.20 (**capítulo 3, seção 3.3**), 3.42 (**capítulo 3, seção 3.5**) e 3.53 (**capítulo 3, seção 3.7**). No cálculo de ganho do *bulk*, o efeito do espalhamento intrabanda não é tão perceptível nas curvas espectrais de ganho, como veremos adiante; isto se deve ao fato dos estados de energia das bandas de condução e valência serem contínuos; no caso das nanoestruturas, a presença de níveis discretos de energia torna visível o efeito do espalhamento intrabanda sobre suas respectivas curvas espectrais de ganho. Deste ponto em diante, por motivo de simplificação de notação, considere que o ganho  $g(E_f, E_{FC}, E_{FV})$  é o ganho calculado que leva em consideração o espalhamento de intrabanda.

### 4.3 Quase-Níveis de Fermi

As expressões de ganho, nos quatro casos considerados, são funções da energia do fóton ( $E_f$ ) e das energias dos quase-níveis de Fermi da banda de condução ( $E_{FC}$ ) e da banda de valência ( $E_{FV}$ ). A energia do fóton está relacionada com a absorção ou emissão de fótons entre dois estados considerados; ao supormos **transições verticais** impusemos transições entre um estado na banda de condução e outro na banda de valência. As energias dos quase-níveis de Fermi, conforme a equação 2.4 (**capítulo 2, seção 2.2**), resolvem as integrais cujos resultados são os valores dados de concentrações de portadores. Seja  $\rho_C(E) = \rho_V(E) = \rho(E)$  a densidade de estados presentes no semicondutor. Podemos reescrever a equação 2.4 da seguinte forma:

$$N = \int \rho(k) f(k) dk = \int \rho(E) f(E) \frac{dk}{dE} dE \quad (4.3)$$

Onde  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . Logo  $k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2} \Rightarrow \frac{dk}{dE} = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \frac{E^{-1/2}}{2}$ . O cálculo das energias dos quase-níveis de Fermi difere para cada caso considerado. Seja o referencial de energia conforme figura 4.2:



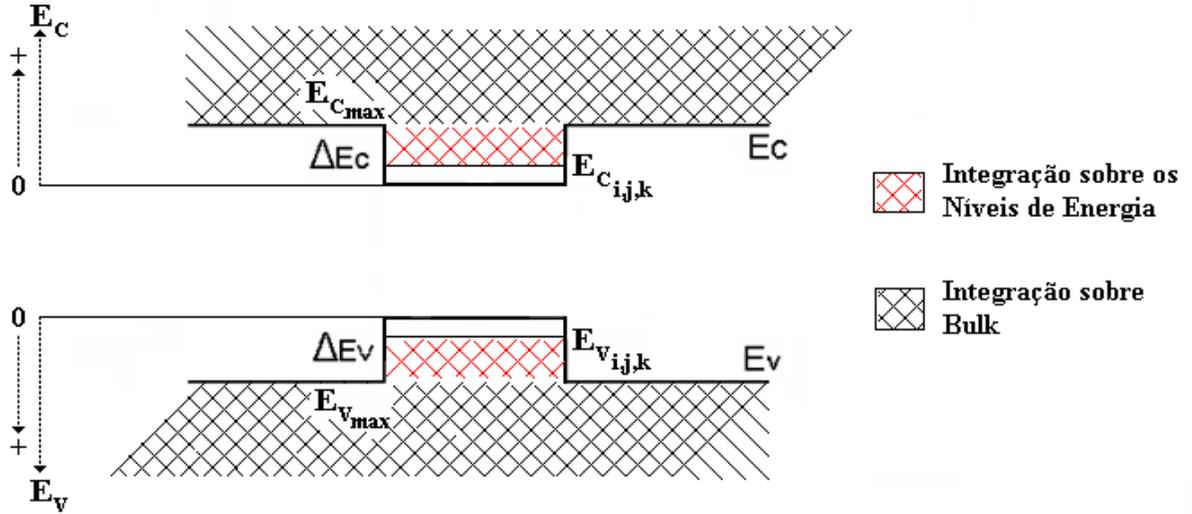
**Figura 4.2** - Referencial de energia adotado para o cálculo da energia dos quase-níveis de Fermi de bulk.

Para **bulk**, a equação 4.3 pode ser reescrita como:

$$\rho_{(bulk)}(k) = \frac{k^2}{\pi^2} \Rightarrow \begin{cases} N_e = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty E_C^{1/2} \left(\frac{1}{e^{(E_C - E_{Fc})/kT} + 1}\right) dE_C \\ N_b = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty E_V^{1/2} \left(\frac{1}{e^{(E_V - E_{Fv})/kT} + 1}\right) dE_V \end{cases} \quad (4.4)$$

Os valores de energia sobre os quais se integram as probabilidades de Fermi são sempre positivos no referencial da figura 4.2, mas os valores de energia dos quase-níveis de Fermi que satisfazem as igualdades não são positivos necessariamente. As equações 4.5 e 4.6 são integradas para cada nível de energia permitido no poço e fio quântico, respectivamente. O valor de energia a partir do qual se integram as probabilidades de Fermi são os valores permitidos  $E_i$  ou  $E_{i,j}$  (**capítulo 3, seções 3.2 e 3.4**). O valor máximo a ser integrado corresponde ao valor da descontinuidade do poço de energia ( $E_{C_{max}}$  ou  $E_{V_{max}}$ ); no caso do ponto quântico, não há integral, apenas o somatório sobre todos os valores de energia permitidos  $E_{i,j,k}$  (**capítulo 3,**

seção 3.6). Os valores de energia que excedem o valor da descontinuidade do poço são integrados como se fossem *bulk* (neste caso, de InGaAsP), conforme mostra a figura 4.3:



**Figura 4.3** - Referencial de energia adotado para o cálculo da energia dos quase-níveis de Fermi de poço, fio e ponto. As energias que excedem a descontinuidade do poço são integradas como se fossem bulk de InGaAsP.

Para **poço, fio e ponto quânticos**, a equação 4.3 pode ser reescrita como:

**Poço**

$$\rho_{(\text{poço})}(k) = \frac{k}{\pi a} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} N_e = \sum_i^{L_c} \frac{1}{2\pi a} \left( \frac{2m_c}{\hbar^2} \right) \int_{E_{C_i}}^{E_{C_{\max}}} \left( \frac{1}{e^{(E_C - E_{F_c})/kT} + 1} \right) dE_C \\ \quad + \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_{C_{\max}}}^{\infty} E_C^{1/2} \left( \frac{1}{e^{(E_C - E_{F_c})/kT} + 1} \right) dE_C \\ N_b = \sum_i^{L_v} \frac{1}{2\pi a} \left( \frac{2m_{hh}}{\hbar^2} \right) \int_{E_{V_i}}^{E_{V_{\max}}} \left( \frac{1}{e^{(E_V - E_{F_v})/kT} + 1} \right) dE_V \\ \quad + \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_{hh}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_{V_{\max}}}^{\infty} E_V^{1/2} \left( \frac{1}{e^{(E_V - E_{F_v})/kT} + 1} \right) dE_V \end{array} \right. \quad (4.5)$$

Onde  $a$  é a espessura do poço.

**Fio**

$$\rho_{(fio)}(k) = \frac{1}{\pi^2 R^2} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} N_e = \sum_{i,j}^{M_c N_c} \frac{1}{2\pi^2 R^2} \left( \frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_{E_{C_{i,j}}}^{E_{C_{\max}}} E_C^{-1/2} \left( \frac{1}{e^{(E_C - E_{FC})/kT} + 1} \right) dE_C \\ \quad + \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_{C_{\max}}}^{\infty} E_C^{1/2} \left( \frac{1}{e^{(E_C - E_{FC})/kT} + 1} \right) dE_C \\ N_b = \sum_{i,j}^{M_v N_v} \frac{1}{2\pi^2 R^2} \left( \frac{2m_{hh}}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_{E_{V_{i,j}}}^{E_{V_{\max}}} E_V^{-1/2} \left( \frac{1}{e^{(E_V - E_{FV})/kT} + 1} \right) dE_V \\ \quad + \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_{hh}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_{V_{\max}}}^{\infty} E_V^{1/2} \left( \frac{1}{e^{(E_V - E_{FV})/kT} + 1} \right) dE_V \end{array} \right. \quad (4.6)$$

Onde  $R$  é o raio do fio.

**Ponto**

$$\rho_{(ponto)}(k) = 2 \cdot N_{ponto} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} N_e = \sum_{i,j,k}^{L_c, M_c N_c} 2 \cdot N_{ponto} \left( \frac{1}{e^{(E_{C_{i,j,k}} - E_{FC})/kT} + 1} \right) \\ \quad + \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_{C_{\max}}}^{\infty} E_C^{1/2} \left( \frac{1}{e^{(E_C - E_{FC})/kT} + 1} \right) dE_C \\ N_b = \sum_{i,j,k}^{L_v, M_v N_v} 2 \cdot N_{ponto} \left( \frac{1}{e^{(E_{V_{i,j,k}} - E_{FV})/kT} + 1} \right) \\ \quad + \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m_{hh}}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_{V_{\max}}}^{\infty} E_V^{1/2} \left( \frac{1}{e^{(E_V - E_{FV})/kT} + 1} \right) dE_V \end{array} \right. \quad (4.7)$$

Da mesma forma, os valores de energia sobre os quais se integram as probabilidades de Fermi são sempre positivos no referencial da figura 4.3, mas os valores de energia dos quase-níveis de Fermi que satisfazem as igualdades não são positivos necessariamente. As equações 4.4, 4.5, 4.6 e 4.7 são resolvidas através do programa **MatLab**. Seja  $N_e = N_b = N$  a concentração de portadores injetados. Como o referencial de energia das figuras 4.2 e 4.3 diferem do referencial de energia adotado ao longo do **capítulo 3**, para que haja uniformidade de referencial é necessário ajustar os valores de energia dos quase-níveis de Fermi:

$$\begin{aligned} E'_{FC} &= E_{FC} + E_{GAP} \\ E'_{FV} &= -E_{FV} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Os valores de energia dos quase-níveis de Fermi dependem do valor da concentração que fornecemos; portanto, como se trata de um problema inverso em que, dado um valor de

concentração, desejamos calcular os valores de energia do quase-níveis de Fermi que satisfazem as integrais, sem prejuízo de notação,  $E_{FC}(N)$  e  $E_{FV}(N)$  passam a ser funções que dependem da concentração de portadores. As expressões que calculam o ganho, em todos os casos, passam a ser funções que dependem de  $E_f$  e  $N$ . Sem prejuízo de notação:

$$g(E_f, E_{FC}, E_{FC}) \Rightarrow g(E_f, N) \quad (4.9)$$

A curva espectral de ganho descreve, enfim, o comportamento da dependência dos valores de ganho com os valores da energia do fóton  $E_f$ , para um determinado valor de concentração de portadores  $N$ .

#### 4.4 Resultados Teóricos e Estudos Comparativos

A partir destas considerações, simulamos as curvas de ganho para os quatro caso distintos (*bulk*, poço, fio e ponto). Todas as curvas espectrais foram geradas a partir de uma série de programas feitos em **MatLab**, cujo conjunto compreende a solução dos níveis de energia para cada nanoestrutura, o cálculo dos quase-níveis de Fermi a partir do valor de concentração de portadores para cada caso, o cálculo da matriz de transição para o ponto quântico e a simulação das curvas espectrais propriamente ditas, para diferentes valores de concentração de portadores. Os parâmetros necessários para resolvermos o sistema InGaAsP ( $Q = 1.414 \mu\text{m}$ ) / InGaAs ( $Q = 1.69 \mu\text{m}$ ) foram definidos no **capítulo 1**. Entretanto, faz-se necessário listar os parâmetros e seus respectivos valores utilizados nestas simulações:

$T = 300 \text{ K}$  é a temperatura considerada;

$n_{\text{InGaAs}} = 3.455$  (Índice de refração do InGaAs);

$E_{\text{GAP}} = 0.877 \text{ eV}$  (Energia de *Bandgap* do InGaAsP);

$E_{\text{GAP}} = 0.73 \text{ eV}$  (Energia de *Bandgap* do InGaAs);

$\Delta = 0.33 \text{ eV}$  (Energia de *split-off band* do InGaAs);

$m_{cI} = 0.066m_0$  (Massa efetiva do elétron no InGaAsP);

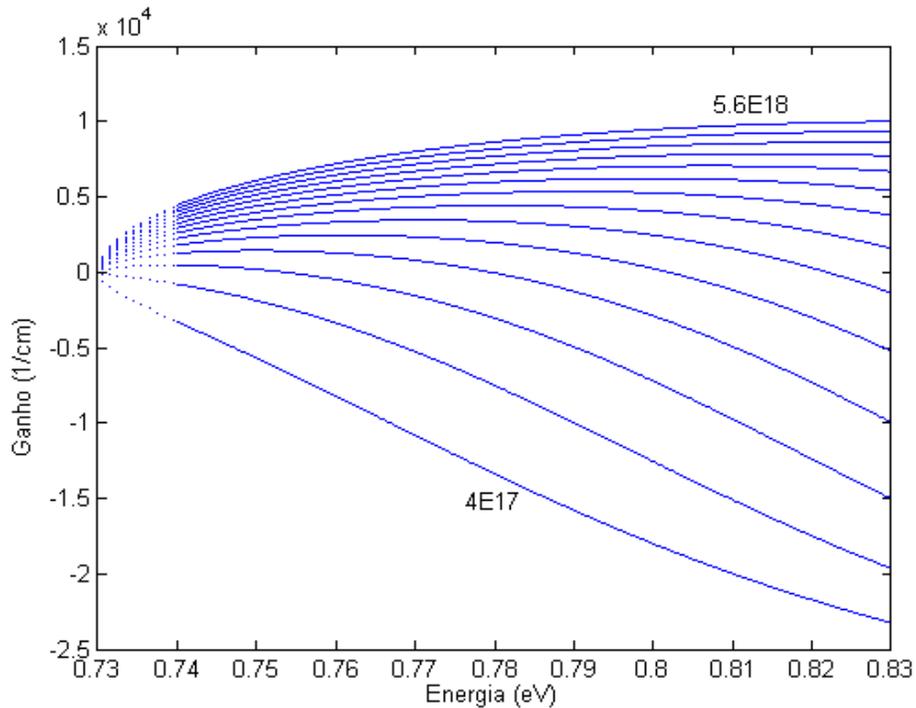
$m_{cII} = 0.054m_0$  (Massa efetiva do elétron no InGaAs);

$m_{hhI} = 0.489m_0$  (Massa efetiva do lacuna pesada no InGaAsP);

$m_{hhI} = 0.447m_0$  (Massa efetiva do lacuna pesada no InGaAs);

$$v_g = \frac{c}{n_{\text{InGaAs}}} = 8.683 \times 10^7 \text{ m/s} \text{ é a velocidade de grupo no meio (no caso, InGaAs)}$$

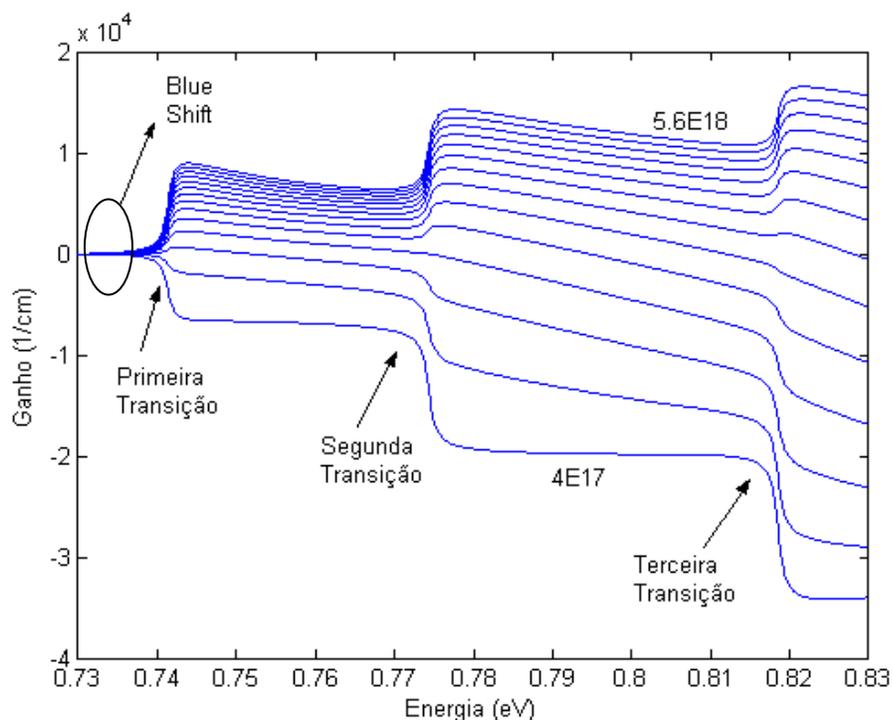
Toda a simulação é resolvida no sistema **MKS**; ao final, convertemos os valores obtidos de ganho na unidade de  $\text{cm}^{-1}$  e os valores de energia em  $\text{eV}$ . Quando necessário, utilizamos, para valores de comprimento de onda, a unidade  $\mu\text{m}$ . O espectro de energia considerado varia de 0.73 eV (que é a energia de *bandgap* do InGaAs) a 0.83 eV. A dependência das curvas espectrais de ganho com a injeção de portadores varia de  $4 \times 10^{17}$  a  $5.6 \times 10^{18}$  (portadores/ $\text{cm}^3$ ) em incrementos de  $4 \times 10^{17}$ , totalizando 14 curvas em ordem crescente; a curva que contém os menores valores de ganho foi obtida para uma densidade de  $4 \times 10^{17}$  portadores/ $\text{cm}^3$  e a curva que contém os maiores valores de ganho,  $5.6 \times 10^{18}$  portadores/ $\text{cm}^3$ , conforme mostra as figuras 4.4, 4.5, 4.6 e 4.7:



**Figura 4.4** - Curvas espectrais de ganho para semicondutor bulk (InGaAs)

As curvas espectrais de ganho para semicondutor *bulk* nos mostram que as curvas são contínuas; ou seja, não há presença de transições nas curvas; não há confinamento dimensional e a densidade de estados é contínua nesta estrutura semicondutora. O ganho aumenta conforme aumentamos a concentração de portadores. Note que as curvas de ganho começam a apresentar valores positivos para concentrações superiores a  $8.0 \times 10^{17}$  portadores/ $\text{cm}^3$ . A amplificação de

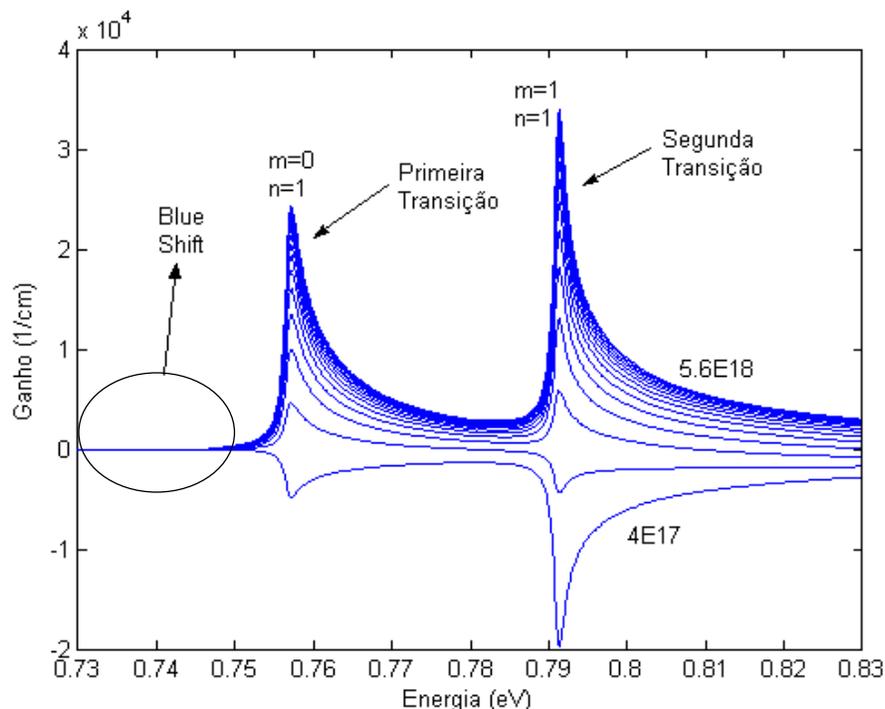
fótons ocorre apenas se o ganho for positivo. Quando os valores de ganho são negativos significa que há absorção de fótons. Salientamos que, para energias inferiores à energia de bandgap do InGaAs ( $E_f < 0.73 \text{ eV}$ ), o semiconductor torna-se transparente; ou seja, não existem transições de portadores que resultem em emissão ou absorção de fótons cuja energia seja menor que 0.73 eV. Note que o máximo valor de ganho de cada curva desloca-se a direita, em relação ao espectro, conforme aumentamos a concentração de portadores.



**Figura 4.5** - Curvas espectrais de ganho para poço quântico de 20 nm de espessura (Sistema InGaAsP/InGaAs)

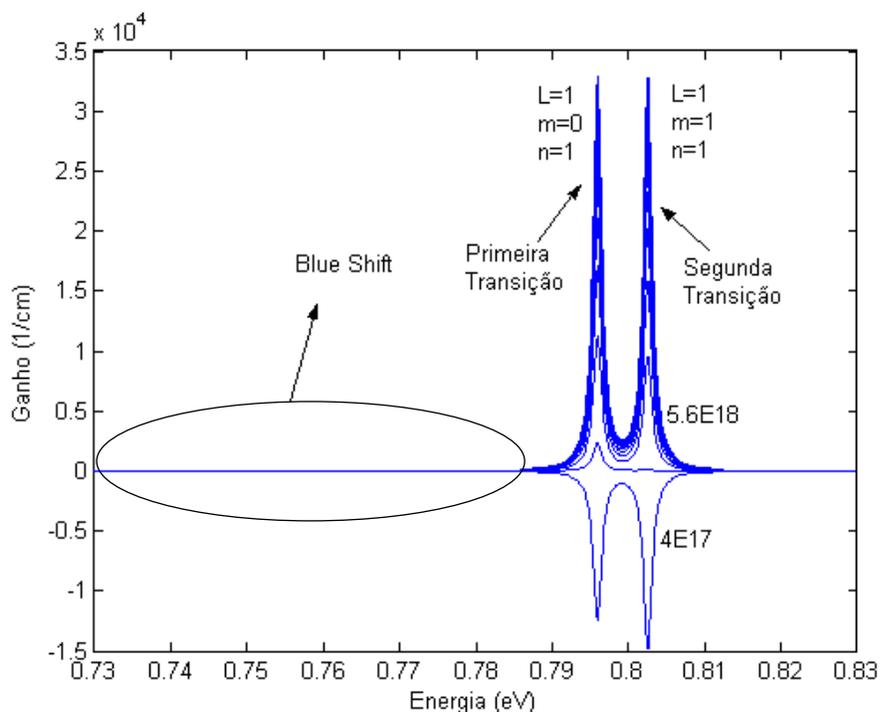
As curvas espectrais de ganho para poço quântico apresentam distorções referentes às transições de energia permitidas no poço. O confinamento em uma dimensão resulta níveis discretos de energia; a densidade de estados, por sua vez, torna-se discreta na direção perpendicular ao plano do poço. No entanto, no plano do poço, a densidade de estados é contínua. Isto explica porque as curvas, após cada transição, decaem suavemente até que haja um novo salto resultante de outra transição. O ganho aumenta conforme aumentamos a concentração de portadores. Note que as curvas de ganho começam a apresentar valores positivos para concentrações superiores a  $8.0 \times 10^{17}$  portadores/cm<sup>3</sup>. Note que, para energias inferiores à energia da primeira transição do poço (assinalada no gráfico acima), o semiconductor torna-se

transparente. Note que o máximo valor de ganho de cada curva ocorre, em relação ao espectro, nas energias das transições permitidas no poço (primeira, segunda ou terceira transição), conforme aumentamos a concentração de portadores.



**Figura 4.6** - Curvas espectrais de ganho para fio quântico de 20 nm de diâmetro (Sistema InGaAsP/InGaAs)

As curvas espectrais de ganho para fio quântico apresentam picos referentes às transições de energia permitidas no fio. O confinamento em duas dimensão resulta níveis discretos de energia; a densidade de estados, por sua vez, torna-se discreta na seção transversal do fio. No entanto, na direção axial do fio, a densidade de estados ainda é contínua. As curvas, após cada transição, decaem acentuadamente até que atinjam um valor constante. Isto é devido à densidade de estados ser ainda contínua na direção axial do fio. Note que o espalhamento intrabanda torna as transições menos abruptas. O ganho aumenta conforme aumentamos a concentração de portadores. Note que as curvas de ganho começam a apresentar valores positivos para concentrações superiores a  $4.0 \times 10^{17}$  portadores/cm<sup>3</sup>. Note que, para energias inferiores à energia da primeira transição do fio (assinalada no gráfico acima), o semiconductor torna-se transparente. Note que o máximo valor de ganho de cada curva ocorre, em relação ao espectro, nas energias das transições permitidas no fio (primeira e segunda transição), conforme aumentamos a concentração de portadores.



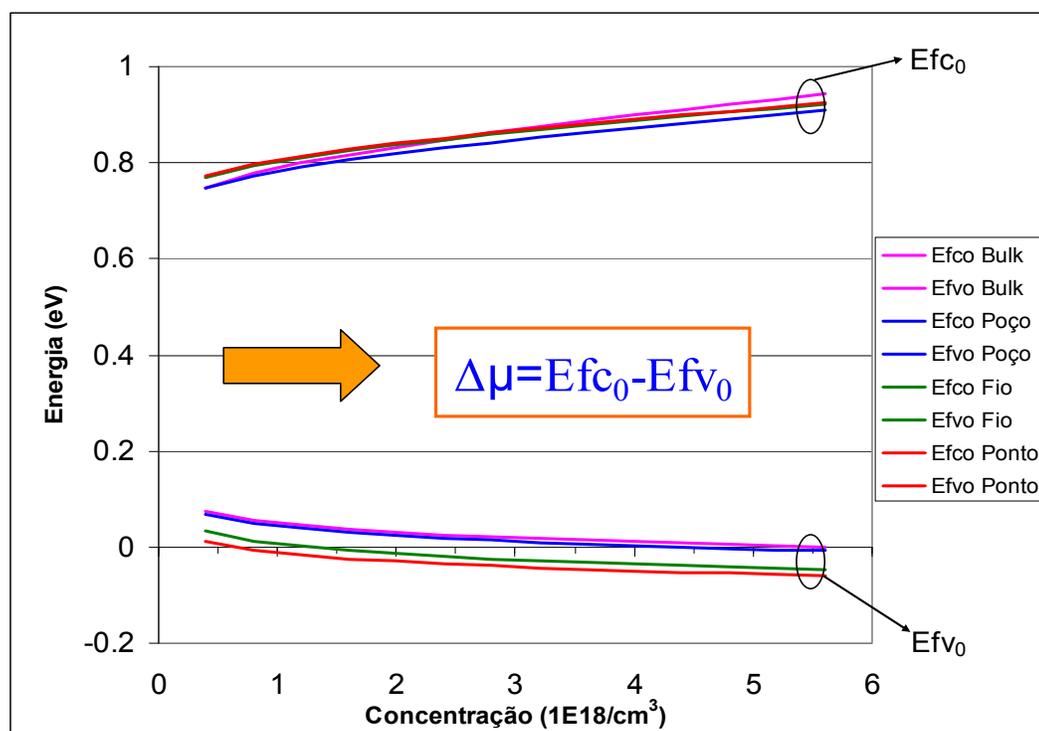
**Figura 4.7** - Curvas espectrais de ganho para ponto quântico (aproximação de nanodisco) de 5 nm de espessura e 50 nm de diâmetro (Sistema InGaAsP/InGaAs)

As curvas espectrais de ganho para ponto quântico apresentam picos referentes às transições de energia permitidas no nanodisco. O confinamento em três dimensões resulta apenas na existência de níveis discretos de energia permitidos; a densidade de estados, por sua vez, é discreta no nanodisco como um todo. Não há densidade contínua de estados. As curvas, após cada transição, decaem abruptamente. Se o espalhamento intrabanda não fosse considerado, as transições seriam funções Delta de Dirac. No caso do ponto, existem somente duas transições de energia permitidas; no entanto, devido ao espalhamento intrabanda, energias adjacentes a estas transições também são permitidas, suavizando o formato das curvas de ganho em torno dos picos. O ganho aumenta conforme aumentamos a concentração de portadores. Note que as curvas de ganho começam a apresentar valores positivos para concentrações superiores a  $4.0 \times 10^{17}$  portadores/cm<sup>3</sup>. Note que, para energias inferiores à energia da primeira transição do ponto (assinalada no gráfico acima), o semiconductor torna-se transparente. O mesmo vale para energias superiores a 0.82 eV. Note que o máximo valor de ganho de cada curva ocorre, em relação ao espectro, nas energias das transições permitidas no fio (primeira e segunda transição), conforme aumentamos a concentração de portadores.

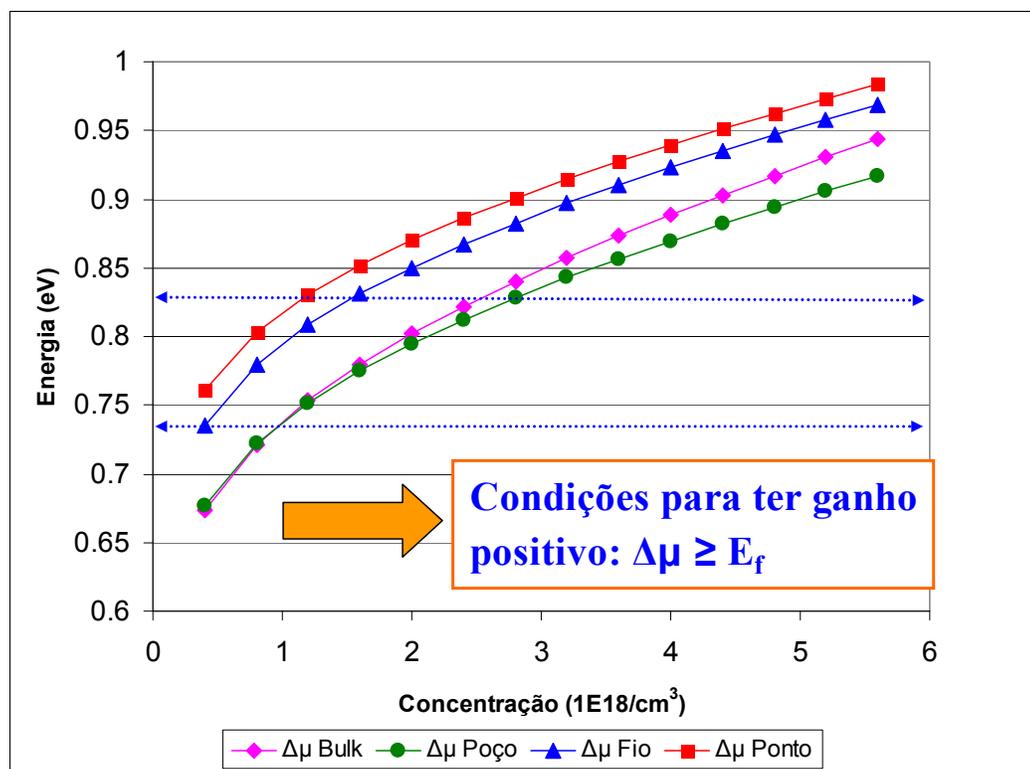
## 4.5 Análise Conjunta

Lembramos que valores negativos de ganho significam absorção; valores positivos significam emissão de luz. Note que, na medida em que confinamos as nanoestruturas, aumenta o desvio para o azul (*blue shift*) das respectivas curvas de ganho; da mesma forma, os valores de ganho tornam-se maiores e ganhos positivos são alcançados com menores densidades de portadores injetados. Note também que, na medida em que se confina as dimensões das nanoestruturas, as curvas de ganho tornam-se confinadas no espectro de energia: as curvas espectrais, quando analisadas desde *bulk* até pontos quânticos, evidenciam um aumento da seletividade no espectro de energia, devido à existência de níveis discretos; estes níveis delimitam uma energia mínima de transição superior a energia de *bandgap* do InGaAs ( $E_{GAP} = 0.73 \text{ eV}$ ), fenômeno que explica o desvio para o azul ou *blue shift*. Observe que os máximos ganhos das curvas espectrais de ganho das nanoestruturas ocorrem, em relação ao espectro, apenas para energias correspondentes às suas respectivas transições permitidas.

Uma análise mais cuidadosa dos dados requer o estudo de outros parâmetros associados às curvas obtidas. As figuras 4.8 e 4.9 mostram as curvas que caracterizam o comportamento dos quase-níveis de Fermi (condução e valência):



**Figura 4.8** - Dependência da energia dos quase-níveis de Fermi com a concentração de portadores (para os quatro casos estudados).



**Figura 4.9** - Dependência de  $\Delta\mu$  com a concentração de portadores (para os quatro casos estudados).

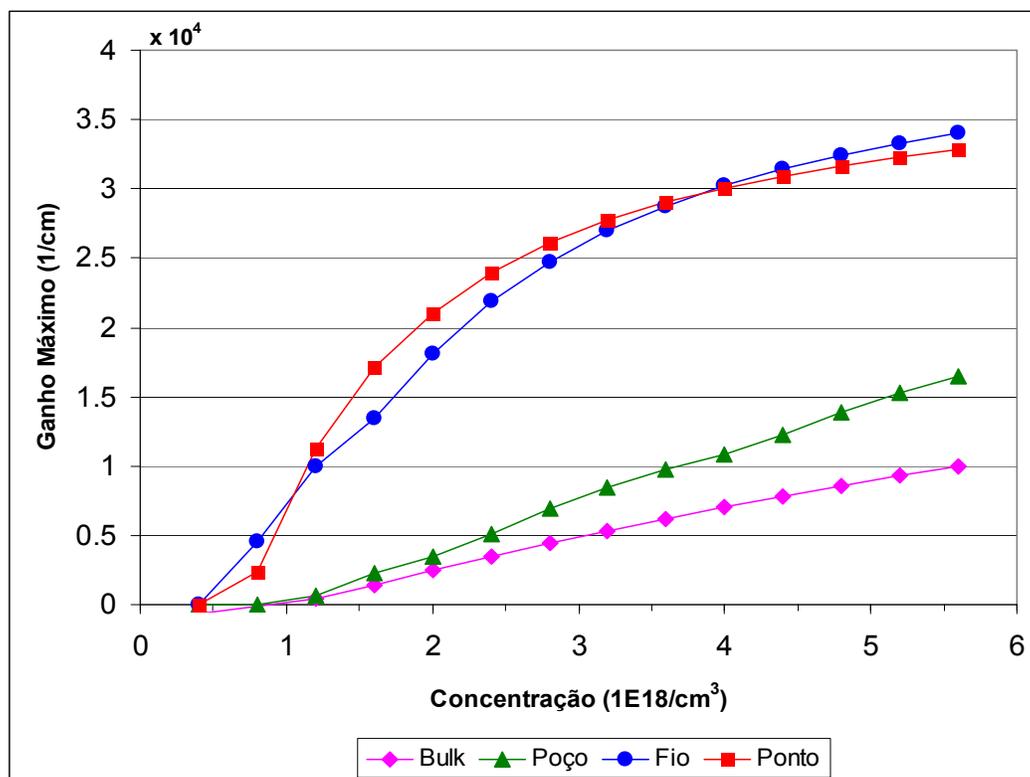
O gráfico da figura 4.8 mostra a dependência da energia (no referencial da equação 4.8) dos quase-níveis de Fermi com a concentração. Observe que as curvas dos quase-níveis de Fermi da banda de valência ( $E_{FV0}$ ) mantêm as mesmas formas espaçadas de maneira regular; o mesmo não ocorre com as curvas dos quase-níveis de Fermi da banda de condução ( $E_{FC0}$ ). No entanto, constatamos em ambos os casos que, quanto maior a concentração, menor a declividade das curvas. Esta tendência, como era de se esperar, sugere uma dificuldade cada vez maior de se alterar os quase níveis de Fermi na medida em que aumentamos a concentração, pois o número de estados a serem preenchidos varia com a raiz quadrada da energia.

O gráfico da figura 4.9 nos apresenta a variação de  $\Delta\mu$  com a concentração. É importante ressaltar que as curvas espectrais de ganho foram plotadas para um intervalo de energia  $0.73\text{ eV} \leq E_f \leq 0.83\text{ eV}$ . Portanto, as linhas azuis tracejadas presentes neste gráfico representam os limites superior e inferior da energia do fóton que utilizamos em nossas simulações. Os valores de concentração para os quais  $\Delta\mu$  esteja abaixo do limite inferior, ou seja  $\Delta\mu < E_f$ , resultam necessariamente curvas de ganho negativas em todo o espectro de energia. Os valores de

concentração para os quais  $\Delta\mu$  esteja acima do limite superior, ou seja  $\Delta\mu > E_f$ , resultam necessariamente curvas de ganho positivas em todo o espectro de energia. Os valores de concentração para os quais  $\Delta\mu$  esteja entre os limites superior e inferior resultam curvas de ganho que começam positivas e tornam-se negativas à medida que percorremos o espectro de energia em ordem crescente.

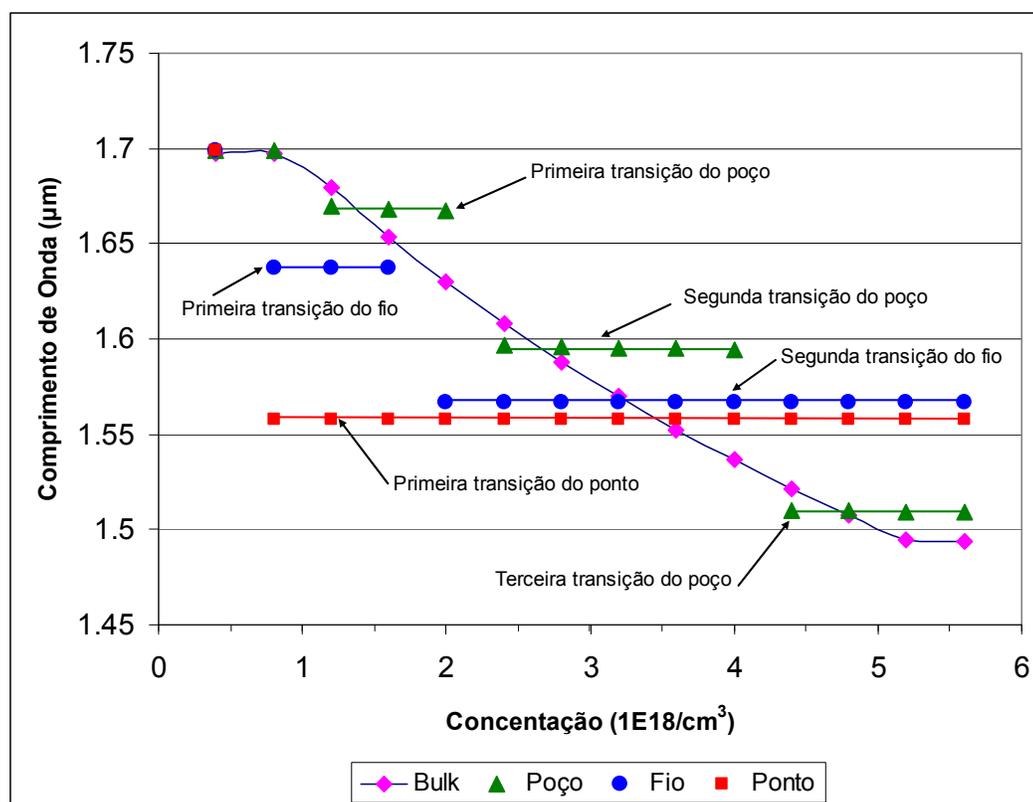
O desvio para o azul também aparece nas curvas da figura 4.9: recordemos que, nas equações 4.5, 4.6 e 4.7, o valor mínimo a partir do qual se integram (ou somam) as probabilidades de Fermi é o menor valor de energia permitido no poço, fio ou ponto. O desvio para o azul está relacionado à energia mínima de transição; no referencial da figura 4.3, quanto maior o valor da energia mínima permitida, maiores são os valores de energia dos quase-níveis de Fermi e, conseqüentemente,  $\Delta\mu$ .

Estudamos os valores máximos de ganho obtidos para cada curva espectral em função da concentração de portadores e da energia (ou comprimento de onda) do fóton associado a estes máximos; realizamos algumas análises provenientes deste estudo, conforme mostram os gráficos das figuras 4.10, 4.11 e 4.12:



**Figura 4.10** - Os ganhos máximos obtidos de cada curva espectral foram plotados em função da concentração de portadores associado a estes valores (para os quatro casos estudados).

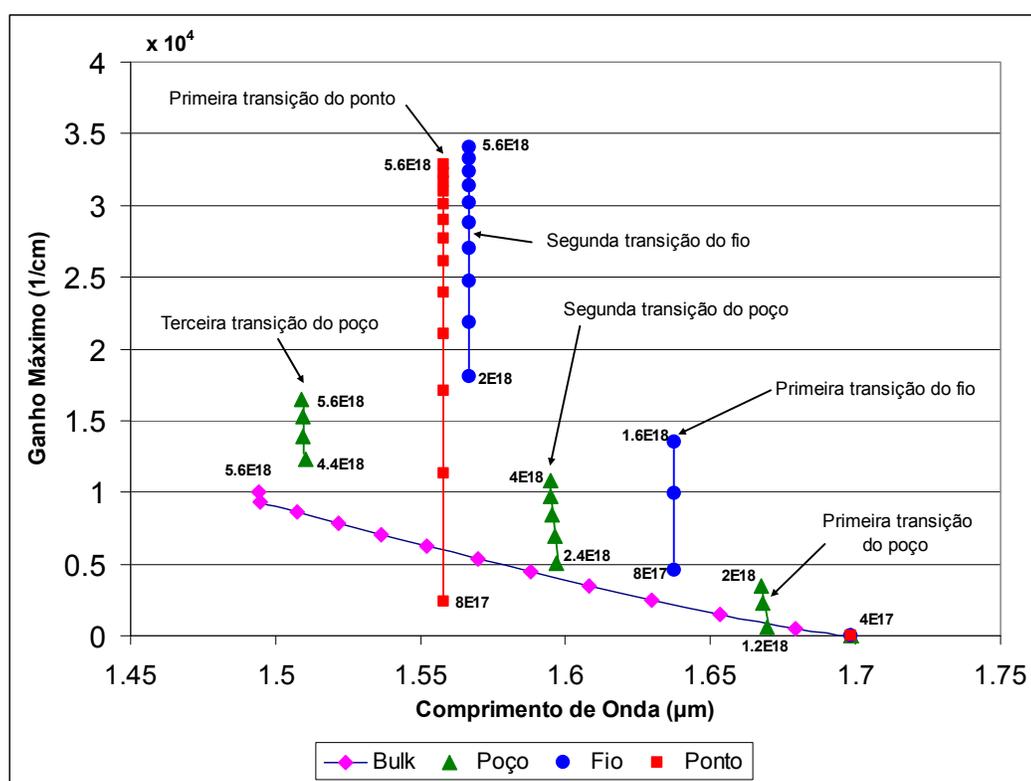
O gráfico da figura 4.10 nos mostra uma melhor performance de fios e pontos em relação à *bulk* e poço no que se refere a maiores valores de ganho. Por sua vez, a performance do poço também é superior em relação ao *bulk*; ou seja, para um mesma concentração de portadores é possível obter maiores valores de ganho à medida que confinamos as dimensões das nanoestruturas. Este resultado mostra-se importante pois implica em correntes menores de limiar no caso de fios e pontos, como veremos no capítulo 5.



**Figura 4.11** - O comprimento de onda associado ao ganho máximo obtido de cada curva espectral foi plotado em função da concentração de portadores correspondente (para os quatro casos estudados).

O gráfico da figura 4.11 evidencia a presença dos níveis discretos das nanoestruturas quando observamos as linhas horizontais; ou seja, o comprimento de onda associado ao ganho máximo das curvas espectrais não varia com a concentração nestas linhas. O poço apresenta três transições possíveis em suas curvas espectrais de ganho. Se as observarmos melhor, veremos que a curvas correspondentes aos dois menores valores de concentração não apresentam máximo ganho, pois os valores de ganho são todos negativos; na ordem crescente de concentração, as três curvas seguintes apresentam máximo ganho na primeira transição; as próximas cinco curvas apresentam máximo ganho na segunda transição e, por fim, as quatro últimas curvas (totalizando

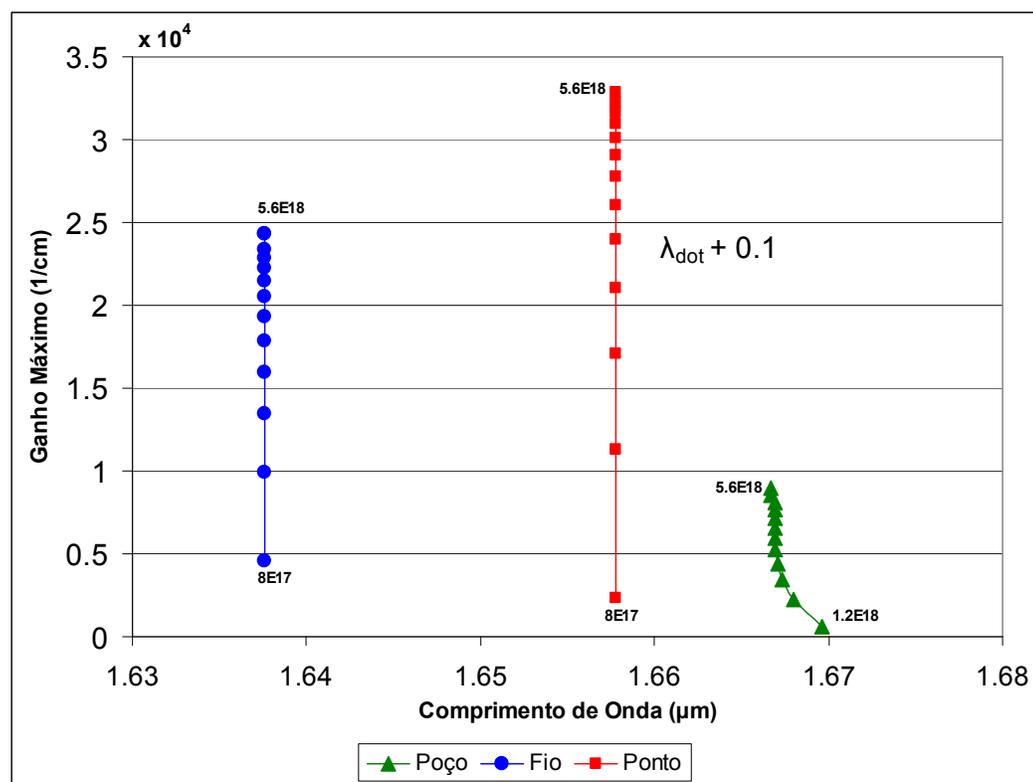
14 curvas) apresentam máximo ganho na terceira transição. Processo semelhante acontece com o fio, que dispõe de duas transições possíveis: a curva correspondente ao menor valor de concentração não apresenta máximo ganho; na ordem crescente de concentração, as três curvas seguintes apresentam máximo ganho na primeira transição e as dez curvas posteriores apresentam máximo ganho na segunda transição. No caso do ponto, excetuando a curva correspondente ao menor valor de concentração (cujos valores de ganho são quase todos negativos), **todas** as demais curvas apresentam máximo ganho na **primeira transição**. No caso do *bulk*, o comprimento de onda associado ao máximo ganho de cada curva variou para todos os valores de concentração simulados.



**Figura 4.12** - Os ganhos máximos obtidos de cada curva espectral foram plotados em função do comprimento de onda associado a estes valores; os valores de concentração correspondentes também são assinalados no gráfico; deste modo, pode-se visualizar a dependência do ganho máximo em função de ambos (para os quatro casos estudados).

No gráfico da figura 4.12 visualizamos os valores de máximo ganho e seus respectivos comprimentos de onda associados. De forma análoga, observamos as transições relativas a cada caso, como explicitado na figura 4.11. Entretanto, convém-nos salientar que a primeira transição em todos os casos tem precedência nos processos de recombinação: quando injetamos portadores no laser de semicondutores, conforme veremos no **capítulo 5**, existe um valor de corrente

injetada no dispositivo laser (que denominamos corrente de limiar) a partir da qual o laser passa a emitir luz; esta emissão (em geral) ocorre para a transição de menor energia permitida nas nanoestruturas, ou seja, a **primeira transição**. Analisemos, a partir das curvas espectrais de ganho obtidas anteriormente, **apenas a primeira transição** de energia de cada nanoestrutura (poço, fio e ponto), conforme mostra o gráfico da figura 4.13:



**Figura 4.13** - Os ganhos máximos obtidos apenas na primeira transição das curvas espectrais (poço, fio e ponto) foram plotado em função do comprimento de onda associado a estes valores.

Limitamos o espectro do comprimento de onda para melhor analisarmos a variação do comprimento de onda com a concentração de portadores; para tanto, somamos 0.1 μm ao comprimento de onda da primeira transição do ponto para estabelecermos comparações. Excluimos de nossa análise as curvas cujos valores de ganho são todos negativos. Consideramos os valores de máximo ganho relativos **apenas** à primeira transição de cada caso (poço, fio e ponto). O poço apresenta uma pequena variação para valores de concentração abaixo de  $2.4 \times 10^{18}$  portadores/cm<sup>3</sup>; para valores superiores de concentração, o comprimento de onda é fixo. No caso do fio e ponto, o comprimento de onda emitido para os valores de máximo ganho das curvas espectrais é fixo. Este comportamento é extremamente desejável pois o comprimento

de onda emitido não depende da concentração de portadores; ou seja, a injeção de portadores exerce apenas a função de amplificar o ganho, sem mudar a característica do comprimento de onda emitido.

Uma conclusão de suma importância a ser apreendida consiste na escolha dos valores das dimensões das nanoestruturas. Lembremos que o ganho foi definido, na equação 4.9, como função da energia do fóton e da concentração. Na medida em que confinamos as dimensões de um semiconductor na escala nanométrica, a variação da concentração de portadores aumenta ou diminui os valores de ganho, sem alterar o espectro das transições. Portanto, podemos escolher o comprimento de onda a ser emitido pelo dispositivo laser a partir do dimensionamento das nanoestruturas. O ponto, sob todos os aspectos, nos mostra uma melhor performance para o desenvolvimento de dispositivos laser onde se deseja obter ganho por injeção de portadores numa região espectral e volume de injeção diminutos. Entretanto, o dimensionamento exato de uma nanoestrutura como o ponto quântico pressupõe um controle rigoroso de muitas variáveis experimentais. Na prática, dispomos de uma distribuição de pontos não homogênea, como veremos a seguir.

#### 4.5 Efeitos da Não-Homogeneidade das Dimensões dos Pontos Quânticos

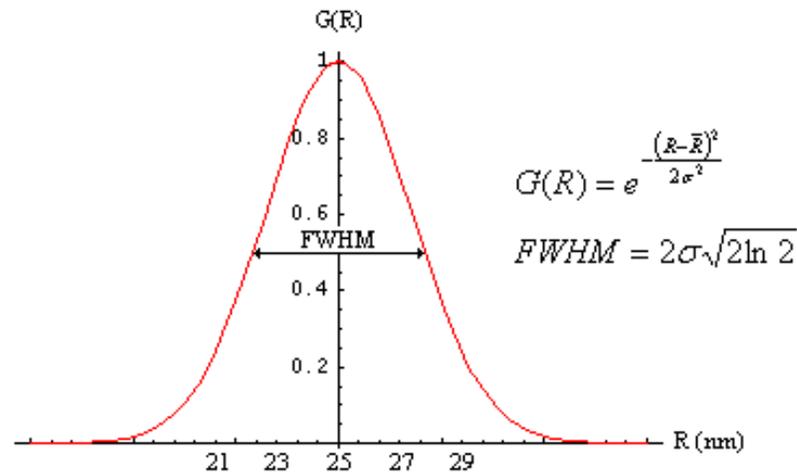
No cálculo de ganho de pontos quânticos, consideramos a homogeneidade das dimensões do ponto: todos os pontos considerados tinham 5 nm de espessura e 50 nm de diâmetro. Considere uma distribuição real de pontos quânticos, cujas dimensões variam em torno de um valor central. Na literatura científica, estudos sobre pontos quânticos [Mendoza-Alvarez J. G. *et al*] reportam uma distribuição simétrica em forma de sino em torno de um valor central. Em nosso modelo, considere que a espessura dos pontos permaneça igual (5 nm); apenas os valores de diâmetro variam em torno de um valor central. Propomos a distribuição Gaussiana para descrever esta variação. A distribuição Gaussiana aplicada aos pontos quânticos em torno do valor central do raio do nanodisco  $\bar{R}$  é dada por:

$$G(R) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(R-\bar{R})^2}{2\sigma^2}} \quad (4.10)$$

Onde  $\sigma$  é o desvio padrão dos pontos em relação ao valor central. O cálculo do ganho para pontos quânticos modificado pela distribuição Gaussiana é dado por:

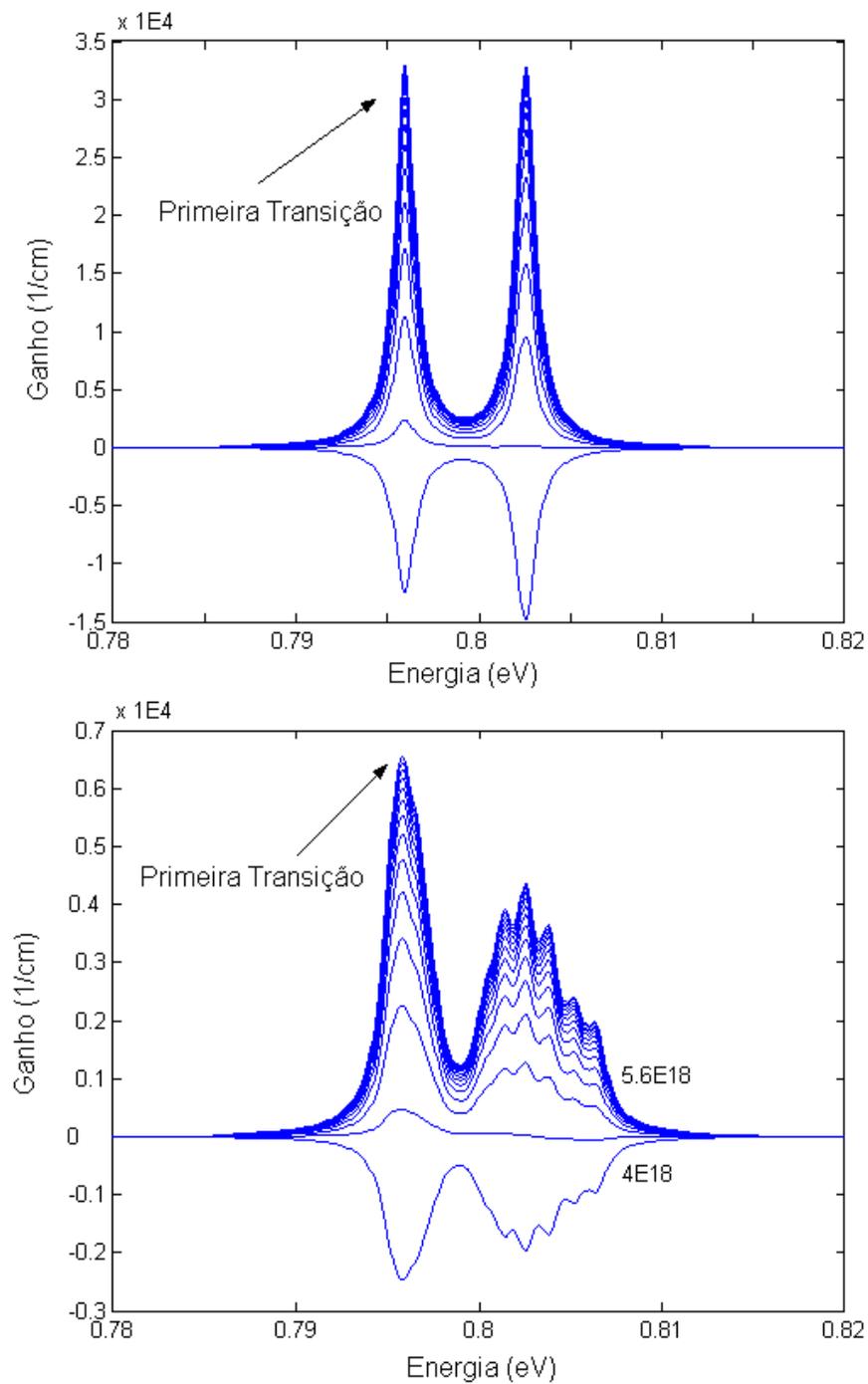
$$g_{\text{ponto Gaussian}}(E_f, N) = \int_0^{\infty} g_{\text{ponto}}(E_f, N) G(R) dr \quad (4.11)$$

Calculamos o ganho da distribuição para o valor central  $\bar{R} = 25 \text{ nm}$  (50 nm de diâmetro); o valor da largura a meia altura (FWHM - *Full-Width Half-Maximum*) é de, aproximadamente, 7 nm, conforme visualizamos na distribuição não-normalizada da figura 4.14:



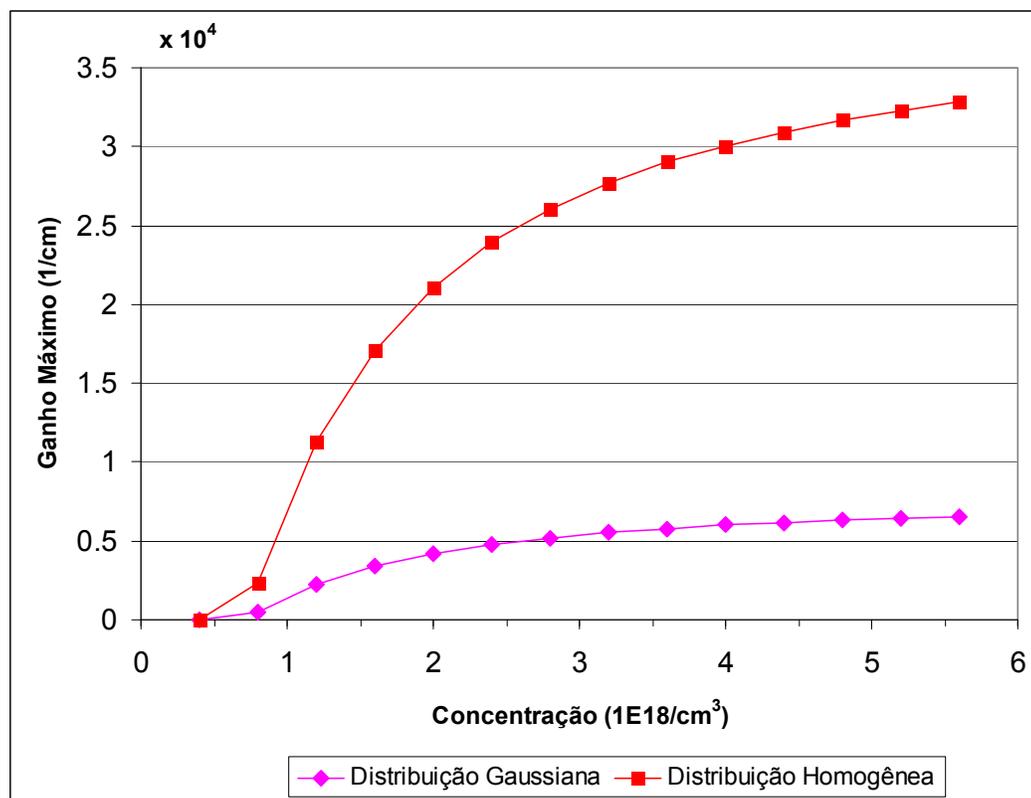
**Figura 4.14** – Distribuição Gaussiana dos valores de raio do nanodisco

No programa desenvolvido em **MatLab** para o cálculo do ganho de pontos quânticos, implementamos sub-rotinas que permitiam os cálculos da matriz de transição, da energia dos quase-níveis de Fermi e das curvas espectrais de ganho para diferentes valores de raio do nanodisco, de acordo com a estatística Gaussiana. O resultado é comparado diretamente com as curvas espectrais de ganho do ponto quântico (obtidas na figura 4.7). Restringimos o espectro de energia para uma melhor visualização das curvas, conforme mostra os gráficos da figura 4.15:

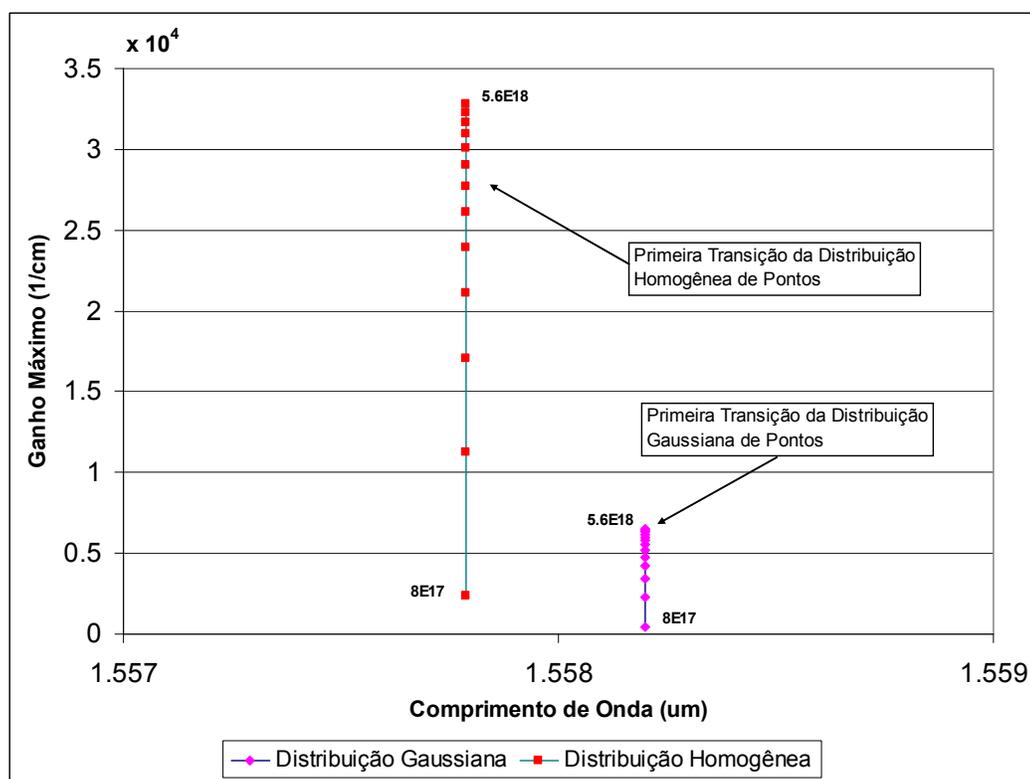


**Figura 4.15** – Curvas espectrais de ganho da distribuição homogênea (figura acima) e distribuição Gaussiana de pontos quânticos (figura abaixo); aproximação de nanodisco de 5 nm de espessura e 50 nm de diâmetro central (Sistema InGaAsP/InGaAs)

Uma análise preliminar nos revela que o valor do ganho diminui sensivelmente quando consideramos a distribuição Gaussiana; também nos mostra a presença de novos níveis de energia pertinentes à variação do raio do nanodisco. Entretanto, notamos que a variação de concentração não altera o espectro de transições, de modo que o máximo ganho para cada curva continua a apresentar um valor fixo de energia (ou comprimento de onda) do fóton. Comparamos os resultados obtidos para ambos os casos, conforme mostram os gráficos das figuras 4.16 e 4.17:



**Figura 4.16** - Os ganhos máximos obtidos das curvas espectrais da figura 4.15 foram plotados em função da concentração de portadores associado a estes valores (distribuições homogênea e Gaussiana).



**Figura 4.17** - Os ganhos máximos obtidos apenas na primeira transição das curvas espectrais (distribuições homogênea e Gaussiana) foram plotado em função do comprimento de onda associado a estes valores.

O gráfico da figura 4.16 mostra-nos de maneira quantitativa a perda da intensidade do ganho quando levamos em consideração o modelo Gaussiano da distribuição de pontos; a perda é de seis vezes em relação aos valores de máximo ganho obtidos para a distribuição homogênea. O gráfico da figura 4.17 demonstra, de fato, que o valor do comprimento de onda permanece inalterado para diferentes valores de concentração; no entanto, nos revela que, para a distribuição Gaussiana, o valor deste comprimento de onda deslocou-se ligeiramente à direita (red shift) em relação ao comprimento de onda da distribuição homogênea de pontos. A variação do raio do nanodisco propiciou a existência de, pelo menos, um nível de energia menor que a energia da primeira transição no caso da distribuição homogênea de pontos. Este resultado nos mostra que, a escolha do comprimento de onda desejado deve ser precedida pelo conhecimento dos parâmetros inerentes à distribuição Gaussiana; por exemplo, o valor da largura a meia altura (FWHM). A partir disto torna-se possível estimar o raio médio do nanodisco para obtermos o valor do comprimento de onda da primeira transição.

Um estudo mais aprofundado dos efeitos da não-homogeneidade das dimensões dos pontos quânticos sobre as propriedades do ganho óptico espectral, na qual levamos em consideração a variação do valor da largura à meia altura (FWHM), foi publicado a partir das análises desenvolvidas nesta seção [Mialichi *et al*, 2008].

Ao longo deste capítulo descrevemos o desenvolvimento das ferramentas computacionais para o cálculo de ganho óptico e concluímos um estudo comparativo do cálculo de ganho óptico em estruturas semicondutoras sob diversos níveis de confinamento dimensional. A seguir, vamos aplicar estes resultados ao funcionamento do laser de semicondutor de faces clivadas, tema do próximo capítulo.

## Capítulo 5

---

### Laser de Semicondutores

---

#### 5.1 Introdução

Este capítulo trata, essencialmente, da descrição do laser de semicondutor propriamente dito, assim como seu funcionamento enquanto dispositivo onde iremos inserir os meios materiais descritos nos capítulos anteriores para a amplificação óptica por emissão estimulada. Na **seção 5.2** introduzimos o conceito de fator de confinamento, etapa preliminar para dimensionar a espessura da região ativa de um laser de heteroestrutura. Na **seção 5.3** apresentamos os modos *Fabry-Perot* existentes em uma cavidade linear. As equações de taxa desenvolvidas na **seção 5.4** nos permitem estudar o comportamento das densidades de fótons e portadores quando uma corrente elétrica é injetada no laser de heteroestrutura. A **seção 5.5** apresenta o conceito de corrente de limiar; Na **seção 5.6**, partindo de nossos cálculos de ganho óptico, a corrente de limiar para bulk, poços, fios e pontos será estudada em função do comprimento do laser.

#### 5.2 Fator de Confinamento

Considere um laser de heteroestrutura conforme a figura 5.1

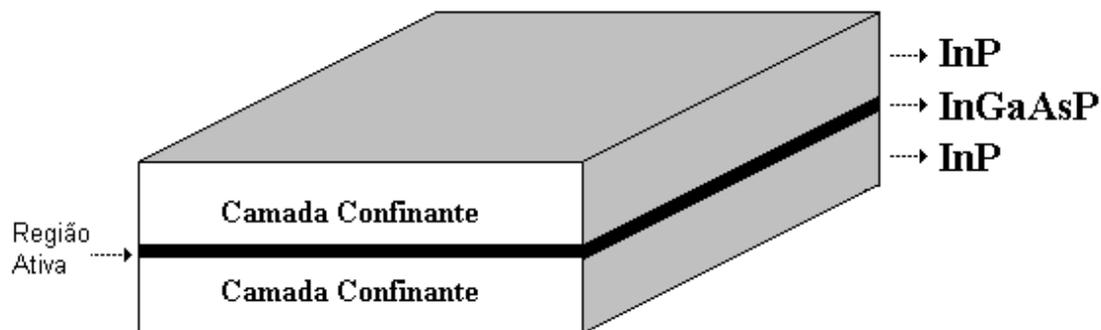


Figura 5.1 - Laser de heteroestrutura.

A região ativa funciona como um guia de onda. Estamos interessados no valor que expressa a fração da intensidade da onda eletromagnética confinada dentro da região ativa, ou seja, dentro

do guia de onda. A esta fração denominamos fator de confinamento. Considere os seguintes parâmetros deste problema na figura 5.2:

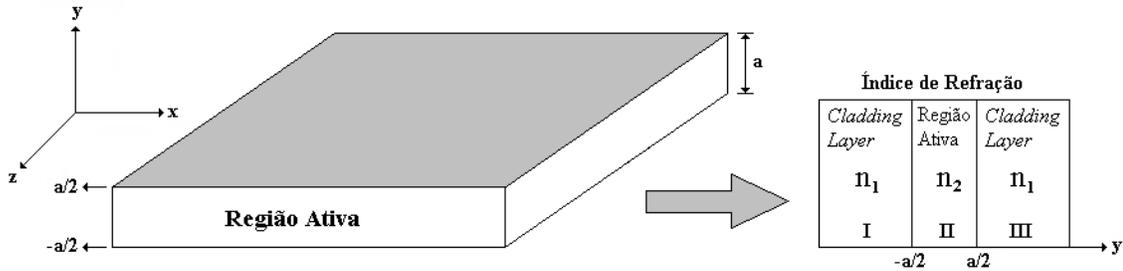


Figura 5.2 - Guia de onda do tipo slab waveguide e seus respectivos parâmetros.

Seja um meio uniforme, não dispersivo, caracterizado por uma constante dielétrica  $\epsilon$  e uma permeabilidade magnética  $\mu$ . As equações de Maxwell no meio [Jackson, 1975] são dadas por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_f \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \\ \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{J} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \end{array} \right. \quad (5.1)$$

Onde  $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$  e  $\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu}$ . Considere um meio ausente de cargas e correntes livres; portanto  $\rho_f = \vec{J}_f = 0$ . A dependência temporal dos campos elétrico e magnético dentro de uma cavidade é harmônica da forma  $e^{-i\omega t}$  [Reitz *et al*, 1980]. As equações de Maxwell podem ser reescritas como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \\ \vec{\nabla} \times \vec{E} = \frac{i\omega}{c} \vec{B} \\ \vec{\nabla} \times \vec{B} = -i\mu\epsilon \frac{\omega}{c} \vec{E} \end{array} \right. \quad (5.2)$$

Usamos a identidade  $\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}$  na equação 5.2 e obtivemos:

$$\begin{aligned}\nabla^2 \vec{E} + \mu\epsilon \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E} &= 0 \\ \nabla^2 \vec{B} + \mu\epsilon \frac{\omega^2}{c^2} \vec{B} &= 0\end{aligned}\tag{5.3}$$

Suponha a propagação da onda na direção  $\hat{z}$ . Sejam os campos elétrico e magnético (que satisfazem a equação 5.3) dados por:

$$\begin{aligned}\vec{E}(x, y, z, t) &= \vec{E}(x, y) e^{\pm ikz - i\omega t} \\ \vec{B}(x, y, z, t) &= \vec{B}(x, y) e^{\pm ikz - i\omega t}\end{aligned}\tag{5.4}$$

Onde  $k$  é o número de onda. Sejam os vetores  $\vec{E}$  e  $\vec{B}$  compostos pela soma de uma parte transversa (ao eixo  $\hat{z}$ ), designada pelo índice  $t$ , e de uma componente paralela ao eixo  $\hat{z}$ ; a mesma decomposição se aplica para os operadores gradiente e laplaciano, o que nos leva às relações:

$$\left\{ \begin{aligned}\vec{E} &= \vec{E}_t + \vec{E}_z \\ \vec{B} &= \vec{B}_t + \vec{B}_z \\ \vec{\nabla} &= \vec{\nabla}_t + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} \\ \nabla^2 &= \nabla_t^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\end{aligned}\right.\tag{5.5}$$

As relações 5.5 aplicadas à equação 5.2 nos conduzem às relações:

$$\left\{ \begin{aligned}\vec{\nabla} \times \vec{E} = \frac{i\omega}{c} \vec{B} &\Rightarrow \left\{ \begin{aligned}\vec{\nabla}_t \times \vec{E}_t &= \frac{i\omega}{c} \vec{B}_z \quad (\text{componente longitudinal}) \text{ (I)} \\ \vec{\nabla}_t \times \vec{E}_z + \hat{z} \times \frac{\partial \vec{E}_t}{\partial z} &= \frac{i\omega}{c} \vec{B}_t \quad (\text{componente transversal}) \text{ (II)}\end{aligned}\right. \\ \vec{\nabla} \times \vec{B} = -i\mu\epsilon \frac{\omega}{c} \vec{E} &\Rightarrow \left\{ \begin{aligned}\vec{\nabla}_t \times \vec{B}_t &= -i\mu\epsilon \frac{\omega}{c} \vec{E}_z \quad (\text{componente longitudinal}) \text{ (III)} \\ \vec{\nabla}_t \times \vec{B}_z + \hat{z} \times \frac{\partial \vec{B}_t}{\partial z} &= -i\mu\epsilon \frac{\omega}{c} \vec{E}_t \quad (\text{componente transversal}) \text{ (IV)}\end{aligned}\right. \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 &\Rightarrow \left\{ \begin{aligned}\vec{\nabla}_t \cdot \vec{E}_t &= -\frac{\partial \vec{E}_z}{\partial z} \text{ (V)}\end{aligned}\right. \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 &\Rightarrow \left\{ \begin{aligned}\vec{\nabla}_t \cdot \vec{B}_t &= -\frac{\partial \vec{B}_z}{\partial z} \text{ (VI)}\end{aligned}\right.\end{aligned}\right.\tag{5.6}$$

As relações 5.5 aplicadas à equação 5.3 resultam:

$$\left[ \nabla_t^2 + \left( \mu\epsilon \frac{\omega^2}{c^2} - k^2 \right) \right] \begin{bmatrix} \vec{\bar{E}} \\ \vec{\bar{B}} \end{bmatrix} = 0 \quad (5.7)$$

As componentes transversais dos campos elétrico e magnético podem ser expressas em termos de  $\vec{\bar{E}}_z$  e  $\vec{\bar{B}}_z$  [Nisbet, 1955]; substituímos o valor de  $\vec{\bar{B}}_t$  da equação II na equação IV (equação 5.6) e obtivemos:

$$\vec{\nabla}_t \times \vec{\bar{B}}_z + \hat{z} \times \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{c}{i\omega} \left( \vec{\nabla}_t \times \vec{\bar{E}}_z + \hat{z} \times \frac{\partial \vec{\bar{E}}_t}{\partial z} \right) \right] = -i\mu\epsilon \frac{\omega}{c} \vec{\bar{E}}_t \quad (5.8)$$

Através da identidade  $\vec{\nabla}(\vec{A} \cdot \vec{C}) = \vec{A} \times (\vec{\nabla} \times \vec{C}) + \vec{C} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) + (\vec{A} \cdot \vec{\nabla})\vec{C} + (\vec{C} \cdot \vec{\nabla})\vec{A}$ , o termo  $\hat{z} \times \vec{\nabla}_t \times \vec{\bar{E}}_z$  pode ser reescrito como:

$$\hat{z} \times \vec{\nabla}_t \times \vec{\bar{E}}_z = \vec{\nabla}_t \vec{E}_z \Rightarrow \hat{z} \times \vec{\nabla}_t \times \frac{\partial \vec{\bar{E}}_z}{\partial z} = \vec{\nabla}_t \frac{\partial \vec{\bar{E}}_z}{\partial z} \quad (5.9)$$

Recordamos que  $\hat{z} \times \left( \hat{z} \times \frac{\partial^2 \vec{\bar{E}}_t}{\partial z^2} \right) = -\frac{\partial^2 \vec{\bar{E}}_t}{\partial z^2} = k^2 \vec{\bar{E}}_t$ . A partir desta consideração e da equação

5.9, a equação 5.8 pode ser reescrita como:

$$\vec{\bar{E}}_t = \frac{1}{\mu\epsilon \frac{\omega^2}{c^2} - k^2} \left[ \vec{\nabla}_t \frac{\partial \vec{\bar{E}}_z}{\partial z} + \frac{i\omega}{c} (\vec{\nabla}_t \times \vec{\bar{B}}_z) \right] \quad (5.10)$$

Analogamente:

$$\vec{\bar{B}}_t = \frac{1}{\mu\epsilon \frac{\omega^2}{c^2} - k^2} \left[ \vec{\nabla}_t \frac{\partial \vec{\bar{B}}_z}{\partial z} + \frac{i\omega}{c} (\vec{\nabla}_t \times \vec{\bar{E}}_z) \right] \quad (5.11)$$

As equações 5.10 e 5.11 nos mostram as componentes transversais em termos das componentes  $\vec{\bar{E}}_z$  e  $\vec{\bar{B}}_z$ . Notemos que  $\vec{\bar{E}}_z$  e  $\vec{\bar{B}}_z$  são soluções da equação de onda bidimensional, também conhecida como equação de Helmholtz [Arfken, 1995] para a onda eletromagnética:

$$\left( \nabla_t^2 + \nu^2 \right) \begin{bmatrix} \vec{\bar{E}}_z \\ \vec{\bar{B}}_z \end{bmatrix} = 0 \quad (5.12)$$

Onde  $\nu^2 = \mu\epsilon \frac{\omega^2}{c^2} - k^2$ . Para que a equação de Helmholtz (5.12) seja válida para o laser de heteroestrutura, considere que os materiais semicondutores que o compõem (**InP** e **InGaAsP**)

satisfaçam as condições prescritas; ou seja, são meios uniformes, não dispersivos ou aproximadamente não dispersivo, ausentes de cargas e correntes livres. Após todo este desenvolvimento, vamos aplicar a equação de Helmholtz nas interfaces entre a região ativa e as camadas confinantes. Vamos usar a aproximação de *slab waveguide*, em que as dimensões  $\hat{x}$  e  $\hat{z}$  são extrapoladas para infinito. Na prática, estas dimensões são muito maiores que a espessura da região ativa. Seja o **modo TE** ( $\vec{E}_z = 0$ ). As equações 5.10 e 5.11 podem ser reescritas como:

$$\begin{aligned}\vec{E}_t &= \frac{i\omega}{c\nu^2} (\vec{\nabla}_t \times \vec{B}_z) \\ \vec{B}_t &= -\frac{ik}{\nu^2} \nabla_t \vec{B}_z\end{aligned}\quad (5.13)$$

Seja  $\vec{B}_z = \Psi(x, y) = X(x)Y(y)$  (soluções separáveis). Como extrapolamos a dimensão  $\hat{x}$  para infinito, o campo magnético é homogêneo nesta direção; não há condições de contorno a serem satisfeitas e podemos supor  $X(x) = C$  (constante). As funções de onda que solucionam a equação de Helmholtz nas regiões I, II e III (figura 5.2) são dadas por:

$$\begin{aligned}y < -a/2 &\Rightarrow \Psi_I(y) = Ae^{\beta y} + A'e^{-\beta y} \\ a/2 \leq y \leq a/2 &\Rightarrow \Psi_{II}(y) = Be^{i\gamma y} + B'e^{-i\gamma y} \\ y > a/2 &\Rightarrow \Psi_{III}(y) = Ce^{\beta y} + C'e^{-\beta y}\end{aligned}\quad (5.14)$$

$$\text{Onde } \gamma^2 = \mu_{II}\varepsilon_{II} \frac{\omega^2}{c^2} - k^2, \quad \beta^2 = -\mu_I\varepsilon_I \frac{\omega^2}{c^2} + k^2. \quad \text{Considere } \mu_I\varepsilon_I \frac{\omega^2}{c^2} < k^2 < \mu_{II}\varepsilon_{II} \frac{\omega^2}{c^2}.$$

Lembremo-nos que as regiões I e III (camadas confinantes) referem-se ao mesmo material; portanto  $\varepsilon_I = \varepsilon_{III}$  e  $\mu_I = \mu_{III}$ . Para que as soluções expressas em 5.14 sejam finitas,  $A' = C = 0$ .

As condições de contorno na superfície implicam:

$$\begin{cases} \vec{B}_z \text{ é contínuo na superfície} & \Rightarrow \Psi_{I,III}(y)|_{y=S} = \Psi_{II}(y)|_{y=S} \\ \vec{B}_t \text{ é contínuo na superfície} & \Rightarrow -\frac{1}{\beta^2} \frac{d\Psi_{I,III}(y)}{dy} \Big|_{y=S} = \frac{1}{\gamma^2} \frac{d\Psi_{II}(y)}{dy} \Big|_{y=S} \end{cases}\quad (5.15)$$

Supomos que a função  $\Psi_{II}$  seja par, ou seja,  $\Psi_{II}(y) = B \cos(\gamma y)$ . Aplicando as condições de contorno em  $y = -a/2$ , para que as soluções sejam contínuas e analíticas neste ponto, obtivemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_I(y)|_{y=-a/2} = \Psi_{II}(y)|_{y=-a/2} \\ -\frac{1}{\beta^2} \frac{d\Psi_I(y)}{dy} \Big|_{y=-a/2} = \frac{1}{\gamma^2} \frac{d\Psi_{II}(y)}{dy} \Big|_{y=-a/2} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} Ae^{-\beta a/2} = B \cos(\gamma a/2) \\ \frac{Ae^{-\beta a/2}}{\beta} = -\frac{B \sin(\gamma a/2)}{\gamma} \end{array} \right. \quad (5.16)$$

Repetimos o procedimento no ponto  $y = a/2$  e obtivemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_{II}(y)|_{y=a/2} = \Psi_{III}(y)|_{y=a/2} \\ \frac{1}{\gamma^2} \frac{d\Psi_{II}(y)}{dy} \Big|_{y=a/2} = -\frac{1}{\beta^2} \frac{d\Psi_{III}(y)}{dy} \Big|_{y=a/2} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} B \cos(\gamma a/2) = C' e^{-\beta a/2} \\ -\frac{B \sin(\gamma a/2)}{\gamma} = \frac{C' e^{-\beta a/2}}{\beta} \end{array} \right. \quad (5.17)$$

Pela simetria das equações 5.16 e 5.17, deduzimos que  $A = C'$ . Renomeamos  $\eta = \frac{\beta a}{2}$  e

$\xi = \frac{\gamma a}{2}$ . Obtemos da equação 5.16 (ou 5.17):

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi \cot(\xi) = -\eta \\ \xi^2 + \eta^2 = (n_{II}^2 - n_I^2) \frac{\omega^2 a^2}{c^2 4} \end{array} \right. \quad (5.18)$$

De forma análoga, ao supormos  $\Psi_{II}$  ímpar, obtemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi \tan(\xi) = \eta \\ \xi^2 + \eta^2 = (n_{II}^2 - n_I^2) \frac{\omega^2 a^2}{c^2 4} \end{array} \right. \quad (5.19)$$

Onde  $n_I^2 = \mu_I \epsilon_I$  e  $n_{II}^2 = \mu_{II} \epsilon_{II}$ . Sejam  $\xi$  e  $\eta$  coordenadas normalizadas tal que  $\xi^2 + \eta^2 = 1$ ;

para que existam soluções, dado um comprimento de onda  $\lambda$ , temos  $a \leq \frac{\lambda}{\pi(n_{II}^2 - n_I^2)^{1/2}}$

(espessura máxima da região ativa). O cálculo do fator de confinamento se dá através da seguinte expressão:

$$\Gamma = \frac{\int_{-a/2}^{a/2} S_z(y) dy}{\int_{-\infty}^{\infty} S_z(y) dy} \quad (5.20)$$

Onde  $S_z$  é o vetor de Pointing na direção  $\hat{z}$ , dado pela expressão:

$$S_z = \frac{c}{8\pi\mu} \Re[\vec{E} \times \vec{B}^*] \cdot \hat{z} = \frac{c E_x B_y^*}{8\pi\mu} \quad (5.21)$$

Como o campo magnético é homogêneo na direção  $\hat{x}$ , consideramos o campo constante; o valor da constante é arbitrário. Seja  $\vec{B} = \vec{B}_t + \vec{B}_z = (0, B_y, B_z)$ . O campo magnético transversal na equação 5.13 pode ser reescrito como:

$$\vec{B}_t = \vec{B}_y = -\frac{ik}{\nu^2} \frac{d\Psi}{dy} \quad (5.22)$$

O campo elétrico transversal na equação 5.13 pode ser expresso em termos do campo magnético transversal:

$$\vec{E}_t = \frac{i\omega}{c\nu^2} (\vec{\nabla}_t \times \vec{B}_z) = -\frac{\omega}{ck} \hat{z} \times \vec{B}_t \quad (5.23)$$

Das equações 5.22 e 5.23, obtemos:

$$\vec{E}_t = \vec{E}_x = -\frac{i\omega}{c\nu^2} \frac{d\Psi}{dy} \quad (5.24)$$

O vetor de Pointing pode ser expresso em termos da função  $\Psi$ :

$$S_z = \frac{k\omega}{8\pi\mu\nu^4} \left| \frac{d\Psi}{dy} \right|^2 \quad (5.25)$$

A equação 5.20 (**fator de confinamento**) pode ser facilmente resolvida se:

$$\Gamma = [1 + \theta]^{-1}, \quad \theta = \frac{\int_{a/2}^{\infty} S_z(y) dy}{\int_0^{a/2} S_z(y) dy} \quad (5.26)$$

Considere apenas o caso em que supomos  $\Psi_{II \text{ par}}$ ; a partir da equação 5.25, obtemos:

$$\theta_{TE} = \frac{\frac{k\omega}{8\pi\mu\beta^4} \int_{a/2}^{\infty} \left| \frac{d\Psi_{III}}{dy} \right|^2 dy}{\frac{k\omega}{8\pi\mu\gamma^4} \int_0^{a/2} \left| \frac{d\Psi_{II \text{ par}}}{dy} \right|^2 dy} = \frac{C'^2 \gamma^2 \int_{a/2}^{\infty} e^{-2\beta y} dy}{B^2 \beta^2 \int_0^{a/2} \text{sen}^2(\gamma y) dy} \quad (5.27)$$

Das condições de contorno 5.17:

$$\frac{B}{C'} = -\frac{\gamma}{\beta} \frac{e^{-\beta a/2}}{\text{sen}(\gamma a/2)} \quad (5.28)$$

Substituindo 5.28 em 5.27, resolvemos as integrais e obtivemos:

$$\theta_{TE} = \frac{\text{sen}^2(\gamma a / 2)}{\beta \left[ -\frac{1}{\gamma} \text{sen}(\gamma a / 2) \cos(\gamma a / 2) + \frac{a}{2} \right]} \quad (5.29)$$

O fator de confinamento para o **modo TM** ( $\vec{B}_z = 0$ ) é resolvido de forma análoga; entretanto, as condições de contorno na superfície (equação 5.15) neste caso implicam:

$$\begin{cases} \vec{E}_z \text{ é contínuo na superfície} & \Rightarrow \Psi_{I,III}(y)|_{y=S} = \Psi_{II}(y)|_{y=S} \\ \vec{D}_t \text{ é contínuo na superfície} & \Rightarrow -\frac{\varepsilon_{I,III}}{\beta^2} \frac{d\Psi_{I,III}(y)}{dy} \Big|_{y=S} = \frac{\varepsilon_{II}}{\gamma^2} \frac{d\Psi_{II}(y)}{dy} \Big|_{y=S} \end{cases} \quad (5.30)$$

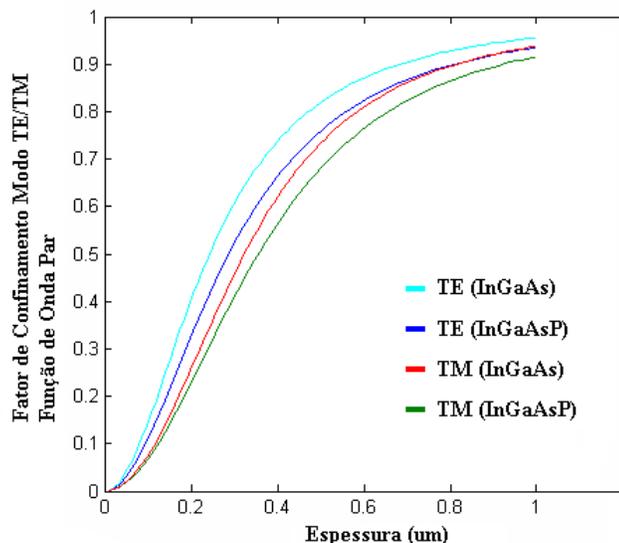
Cujas soluções nos conduz às relações:

$$\begin{cases} \frac{1}{\varepsilon_{II}} \xi \cot(\xi) = \frac{-\eta}{\varepsilon_I} & (\Psi_{II \text{ par}}) \\ \frac{1}{\varepsilon_{II}} \xi \tan(\xi) = \frac{\eta}{\varepsilon_I} & (\Psi_{II \text{ impar}}) \\ \xi^2 + \eta^2 = (n_{II}^2 - n_I^2) \frac{\omega^2 a^2}{c^2 4} \end{cases} \quad (5.31)$$

De forma análoga, obtivemos  $\theta_{TM}$  para o caso em que  $\Psi_{II \text{ par}}$ :

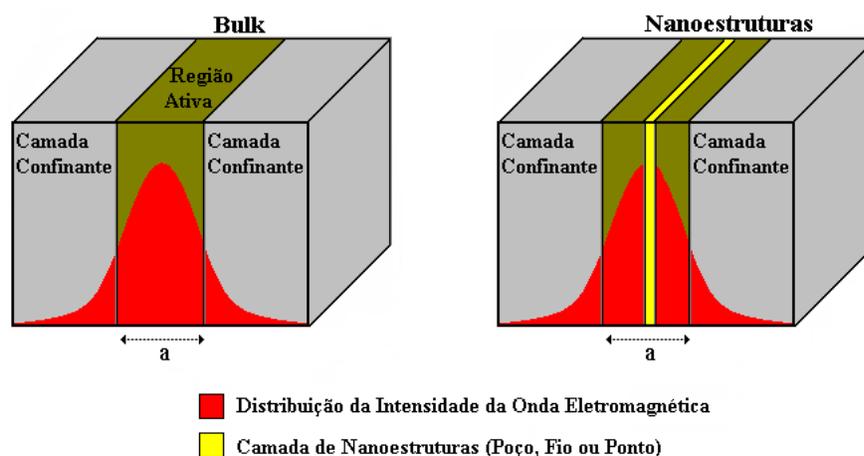
$$\theta_{TM} = \left( \frac{\varepsilon_{II}}{\varepsilon_I} \right)^3 \frac{\text{sen}^2(\gamma a / 2)}{\beta \left[ -\frac{1}{\gamma} \text{sen}(\gamma a / 2) \cos(\gamma a / 2) + \frac{a}{2} \right]} \quad (5.32)$$

Simulamos, através do programa **MatLab**, curvas de fator de confinamento em função da espessura da região ativa; usamos os valores de índice de refração obtidos no capítulo 1, em que  $n_I = 3.146$  (**InP**) e  $n_{II} = 3.368$  (**InGaAsP**), valores considerados a temperatura de 300 K e para o comprimento de onda de 1.55  $\mu\text{m}$ . Se considerarmos uma região ativa toda composta de **InGaAs**,  $n_{II} = 3.455$ . Usamos  $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$  (valor que representa a região de interesse para otimizar transmissão de dados assim como representa a região de transições obtidas nas curvas espectrais de ganho relacionados às nanoestruturas no **capítulo 4**). A figura 5.3 mostra a simulação das curvas de fator de confinamento para ambos os casos (**TE** e **TM**) considerando uma região ativa de InGaAsP ou InGaAs:



**Figura 5.3** - Curvas do fator de confinamento para os modos TE/TM de região ativa de InGaAs ou InGaAsP.

Como podemos observar, os **modos TE** em ambos os casos (InGaAs ou InGaAsP) apresentam maiores valores de fator de confinamento comparados aos seus respectivos **modos TM**. Sem perder a generalidade e também considerando que os cálculos de ganho óptico nos capítulos anteriores foram feitos para o modo TE, consideramos, daqui por diante, apenas o **modo TE** no cálculo do fator de confinamento, conforme será descrito na seção 5.6. Também, lembremos que este fator de confinamento representa a fração da intensidade de onda eletromagnética confinada na região ativa, conforme ilustra a figura 5.4 (*bulk* e região ativa nanoestruturada):



**Figura 5.4** - Representação da distribuição da intensidade da onda eletromagnética no laser de heteroestrutura simples (*bulk*) e nanoestruturado.

Note que o valor máximo de intensidade da onda eletromagnética concentra-se no meio da região ativa. Recordemos que o ganho é a medida da capacidade de amplificar fótons. Logo, multiplicamos o fator de confinamento ao valor de ganho para obtermos o ganho real da região ativa. No caso *bulk*, dada a espessura da região ativa, multiplica-se o correspondente fator de confinamento ao valor de ganho. No caso dos lasers nanoestruturados, as nanoestruturas de InGaAs são inseridas no centro da região ativa. A presença das nanoestruturas não compromete o desenvolvimento anterior, pois representam uma parte muito menor da região ativa e perturbam pouco o valor do índice de refração na região ativa; entretanto, devemos considerar o fator de confinamento proporcional ao volume que ocupam na região ativa.

### 5.3 Cavityde Linear

A região ativa será estudada do ponto de vista de uma cavidade ressonante. Considere o modelo de uma cavidade *Fabry-Perot*, como mostra a figura 5.5;

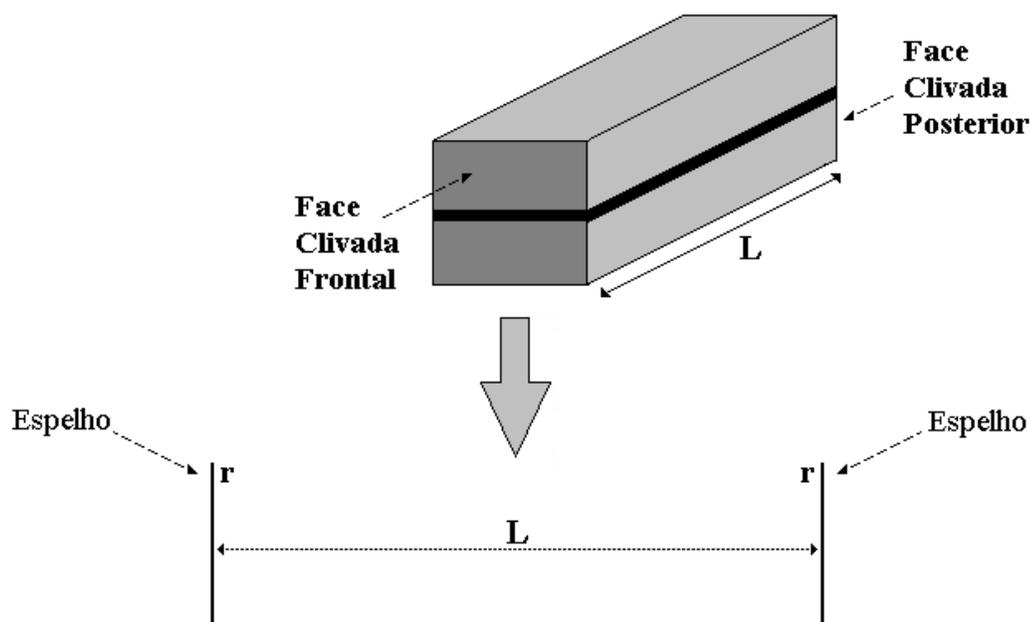


Figura 5.5 - Representação da cavidade linear do laser de heteroestrutura.

Estamos interessados no modelo que descreve a reflexão de ondas e perdas dentro da cavidade. Nosso modelo é unidimensional: apenas as faces clivadas (cuja refletividade é muito maior comparada às outras faces) participam do processo de reflexão de ondas eletromagnéticas.  $L$  é o comprimento da cavidade ressonante e  $r$  é a refletividade do espelho nas faces clivadas

(frontal e posterior). Seja o campo elétrico no interior de uma cavidade descrito da seguinte forma:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{ikx} e^{(g-\alpha_{\text{int}})x/2} = \vec{E}_0 e^{iKx} \quad (5.33)$$

Onde  $g$  é o ganho da cavidade,  $\alpha_{\text{int}}$  é a perda intrínseca da cavidade por espalhamento de luz e  $K = k - i(g - \alpha_{\text{int}})/2$  é a constante de propagação complexa da onda eletromagnética. Considere, em um ponto qualquer dentro da cavidade, uma fonte de luz contínua que se propaga, cujo campo elétrico é descrito pela equação 5.33. Para vários ciclos de propagação, o campo elétrico total neste ponto pode ser determinado através da seguinte soma:

$$\vec{E}_t e^{iKx} = \vec{E}_0 e^{iKx} + \vec{E}_0 e^{iKx} e^{iK2L} r^2 + \vec{E}_0 e^{iKx} e^{iK4L} r^4 + \vec{E}_0 e^{iKx} e^{iK6L} r^6 + \dots \quad (5.34)$$

Cuja amplitude do campo elétrico total pode ser simplificada:

$$E_t = E_0 + E_0 e^{iK2L} r^2 + E_0 e^{iK4L} r^4 + E_0 e^{iK6L} r^6 + \dots = E_0 \sum_{n=0}^{\infty} \left( e^{iK2L+2\ln(r)} \right)^n \quad (5.35)$$

Para que a série da equação 5.35 seja convergente,  $e^{(iK2L+2\ln(r))} < 1 \Rightarrow iKL + \ln(r) < 0$ ; o resultado da série convergente pode ser expresso por:

$$E_t = E_0 \left( 1 - e^{(2iKL+2\ln(r))} \right)^{-1} \quad (5.36)$$

Seja a refletividade  $r = re^{i\phi}$  onde  $\phi$  é a fase do espelho. Lembremos que  $K = k - i(g - \alpha_{\text{int}})/2$ . Substituímos na equação acima e obtivemos:

$$E_t = \frac{E_0}{\left( 1 - e^{L \left( g - \alpha_{\text{int}} + \frac{2}{L} \ln(r) \right)} e^{2i(kL + \phi)} \right)} \quad (5.37)$$

Podemos definir a perda total como a soma da perda intrínseca do material mais a perda devido à refletividade do espelho. Seja  $\alpha_{\text{total}} = \alpha_{\text{int}} + \frac{1}{L} \ln\left(\frac{1}{R}\right)$ , onde  $R=r^2$ . Renomeamos

$\gamma = e^{L \left( g - \alpha_{\text{int}} - \frac{1}{L} \ln\left(\frac{1}{R}\right) \right)} = e^{L(g - \alpha_{\text{total}})}$  e  $\varphi = (kL + \phi)$ . Podemos reescrever a equação 5.37:

$$E_t = \frac{E_0}{(1 - \gamma e^{2i\varphi})} \quad (5.38)$$

Expandimos o termo oscilatório e obtivemos:

$$E_t = \frac{E_0}{(1 - \gamma \cos(2\varphi) - i\gamma \operatorname{sen}(2\varphi))} \quad (5.39)$$

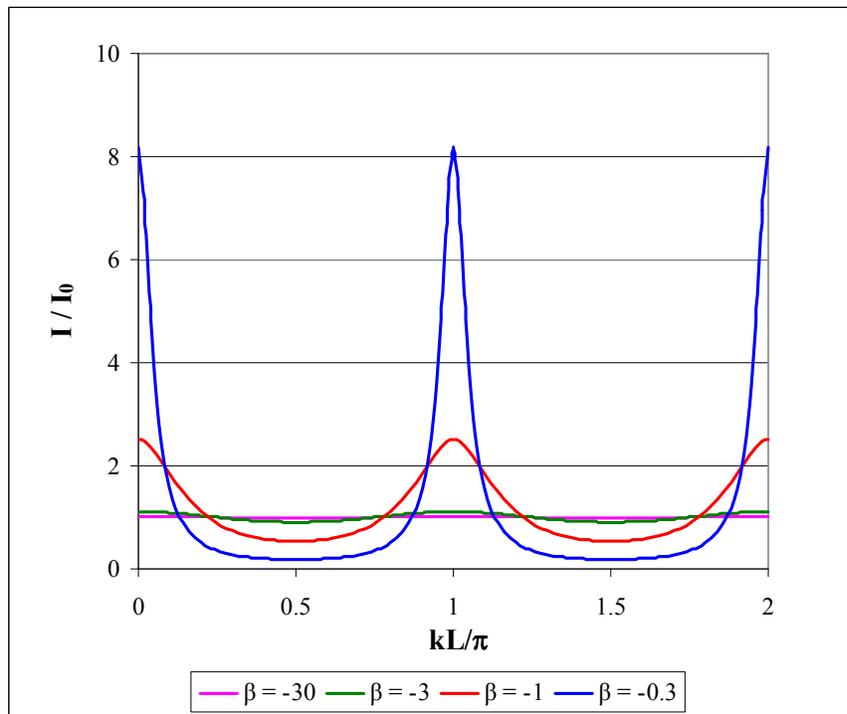
O quadrado do módulo da amplitude do campo elétrico total resulta:

$$|E_t|^2 = \frac{E_0^2}{((1 - \gamma)^2 + 4\gamma \operatorname{sen}^2(\varphi))} \quad (5.40)$$

Substituindo os termos  $\gamma$  e  $\varphi$ , a equação 5.40 pode ser reescrita como a razão entre a intensidade do campo elétrico total e a intensidade do campo elétrico inicial:

$$\frac{I}{I_0} = \frac{E_t^2}{E_0^2} = \frac{1}{\left( (1 - e^{L(g - \alpha_{total})})^2 + 4e^{L(g - \alpha_{total})} \operatorname{sen}^2(kL + \phi) \right)} \quad (5.41)$$

O fenômeno da ressonância ocorre para mínimos do denominador da equação 5.41; ou seja, dados os valores de ganho, perda, fase do espelho, refletividade e comprimento da cavidade ressonante, existem valores de  $k$  para os quais o denominador é mínimo. A amplitude entre os máximos e os mínimos da intensidade do campo aumenta e a largura de linha de cada ressonância diminui conforme diminuimos a diferença entre o ganho e a perda óptica, conforme ilustra o gráfico da figura 5.6:



**Figura 5.6** - Simulação numérica da equação 5.41 para diferentes valores do parâmetro  $\beta$ , cujo valor corresponde a  $\beta=L(g-\alpha_{total})$ . Os valores são arbitrários. Observe que, à medida que o ganho se iguala a perda, a amplitude entre os máximos e os mínimos da intensidade do campo aumenta e a largura de linha de cada ressonância diminui conforme diminuimos a diferença entre o ganho e a perda óptica.

Quando o ganho iguala as perdas, obtemos ressonâncias de largura de linha zero e amplitude infinita. Consideremos este caso, ou seja,  $g - \alpha_{total} = 0$ . Dado o comprimento desta cavidade, simplificamos a equação 5.41:

$$|E_t|^2 = \frac{E_0^2}{4\text{sen}^2(kL + \phi)} \quad (5.42)$$

Seja  $n$  o índice de refração da cavidade; como  $k = \frac{n\omega}{c}$ , as frequências de ressonância são dadas por:

$$kL + \phi = m\pi \Rightarrow \omega_m = \frac{c}{n} \left( \frac{m\pi - \phi}{L} \right) \quad (5.43)$$

Onde  $m \in \mathbb{N}$ . A fase do espelho desloca as frequências de ressonância. As frequências de ressonância também são referidas como modos de *Fabry-Perot* da cavidade. Para simplificar, consideramos a fase do espelho nula. A refletividade do espelho é dada por:

$$R = \left( \frac{n-1}{n+1} \right)^2 \quad (5.44)$$

Se considerarmos o índice de refração do InGaAsP ( $n = 3.368$ ),  $r = 0.294$ . No caso de InGaAs ( $n = 3.455$ ),  $r = 0.303$ . Nos laser nanoestruturados, ambos os materiais compõe a região ativa, com predominância de InGaAsP. Assumimos, por questão de simplicidade, um valor fixo de refletividade  $R = 0.3$ , qualquer que seja o caso abordado.

## 5.4 Equações de Taxa

Seja a equação da continuidade dada por:

$$\frac{d\rho_Q(t)}{dt} = G - R - \oint_S \vec{J}(\vec{r}, t) \cdot \hat{n} dA = G - R - \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) \quad (5.45)$$

Onde  $\rho_Q$  é a densidade de uma quantidade qualquer,  $G$  é o termo constante de geração desta quantidade,  $R$  é o termo constante de perda desta quantidade e  $J$  é o fluxo desta quantidade. Estamos interessados no comportamento das densidades de fótons e portadores no interior de uma cavidade (em nosso caso, no interior da região ativa do laser de heteroestrutura) através da equação da continuidade. O fluxo pode ser escrito como:

$$\vec{J} = \rho_Q \vec{v} \quad (5.46)$$

Onde  $\vec{v}$  é a velocidade. Considere esta velocidade constante. Para desenvolver a equação da continuidade da densidade de fótons, é necessário considerar que há fluxo de fótons somente nas superfícies clivadas (anterior e posterior), conforme mostra a figura 5.7:

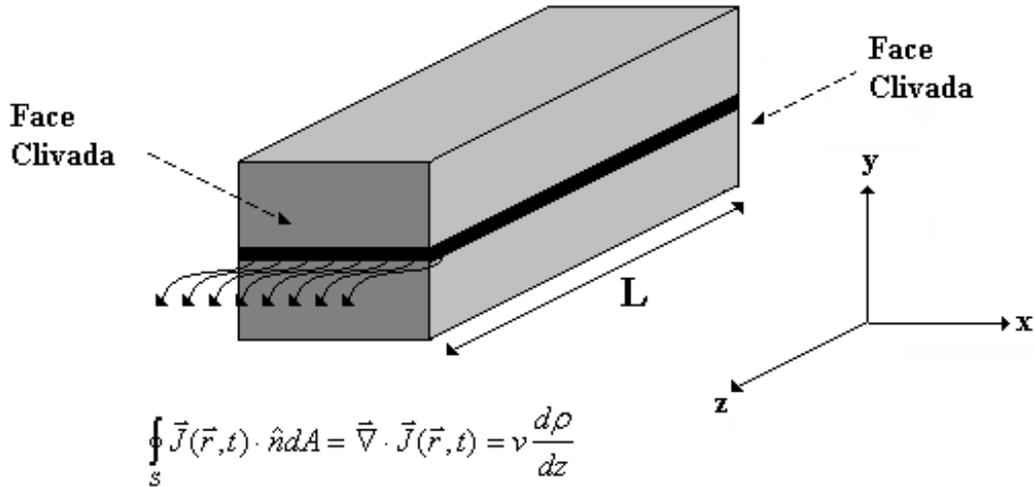


Figura 5.7 - Fluxo de fótons através das faces clivadas da cavidade linear.

Considere a densidade de fótons apenas ao longo do eixo  $\hat{z}$ . Seja  $P_i(z, t) = P_i(t)e^{(g - \alpha_{total})z}$  a densidade de fótons para cada modo *Fabry-Perot* representado pelo índice  $i$ . A equação de taxa da densidade de fótons dentro de uma cavidade é dada por:

$$\frac{dP_i}{dt} = \beta R_{SP} + v_g (g - \alpha_{total}) P_i \quad (5.47)$$

Onde  $\beta$  é o coeficiente de acoplamento de emissão espontânea no modo  $P_i$ ,  $R_{SP}$  é a taxa de emissão espontânea e  $\alpha_{total} = \alpha_{int} + \frac{1}{L} \ln\left(\frac{1}{R}\right)$ ,  $\alpha_{int}$  é a perda intrínseca do material e  $\frac{1}{L} \ln\left(\frac{1}{R}\right)$  é a perda relacionada ao espelho conforme discutido na seção anterior. Salientamos que as perdas de densidade de fótons estão relacionadas à própria função densidade, não havendo, portanto, um termo de perda constante  $R$ , como previsto pela equação da continuidade. Seja a densidade de portadores  $n(\vec{r}, t)$ . Considere que, em uma cavidade semicondutora,  $\vec{J}_n = \vec{J}_{deriva} + \vec{J}_{difusão}$  [Sze, 2002], onde:

$$\begin{aligned} \vec{J}_{deriva} &= \sigma \vec{E} \\ \vec{J}_{difusão} &= \pm q D_n \vec{\nabla} n(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (5.48)$$

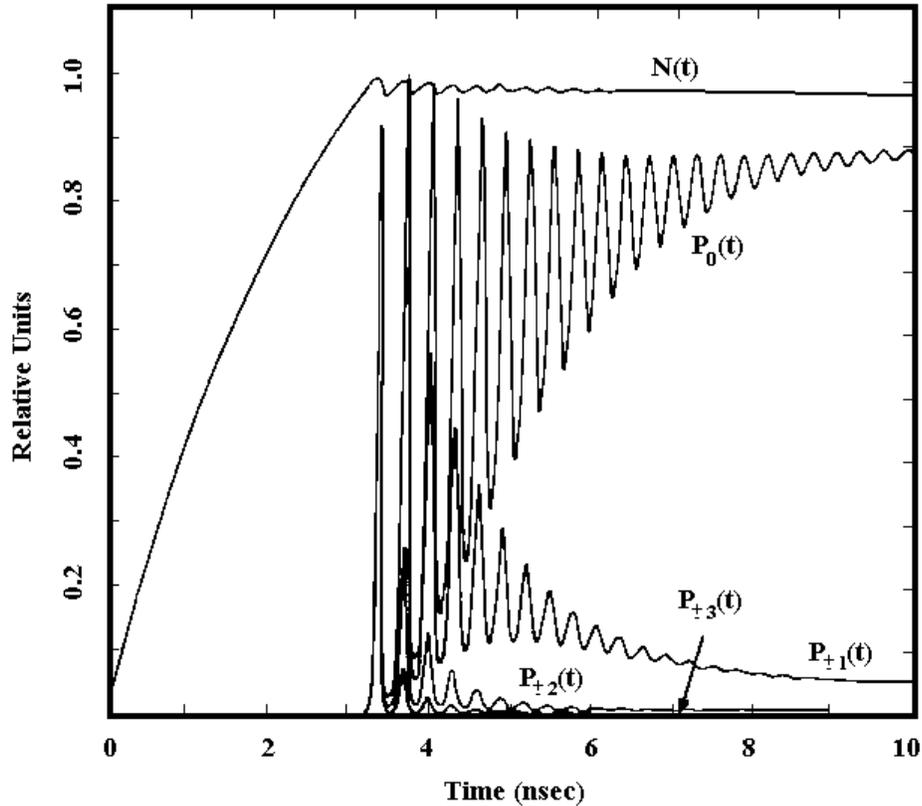
Onde  $\sigma$  é a condutividade,  $D_n$  é o coeficiente de difusão (cujo valor e sinal dependem do tipo de portador considerado) e  $q$  é a carga do elétron. A equação 5.45 aplicada à densidade de portadores resulta:

$$\frac{dn(\vec{r}, t)}{dt} = G - R - (\sigma \vec{\nabla} \cdot \vec{E} \pm qD \nabla^2 n(\vec{r}, t)) \quad (5.49)$$

Na **seção 5.2** assumimos que não há cargas livres ( $\rho_f = 0$ ) nos materiais semicondutores que compõe o laser de heteroestrutura. Portanto,  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \rho_f = 0$ . Considere também que a densidade de portadores não varia de forma significativa na região ativa; logo  $\nabla^2 n(\vec{r}, t) = 0$ . Portanto, a equação de taxa da densidade de portadores pode ser escrita como:

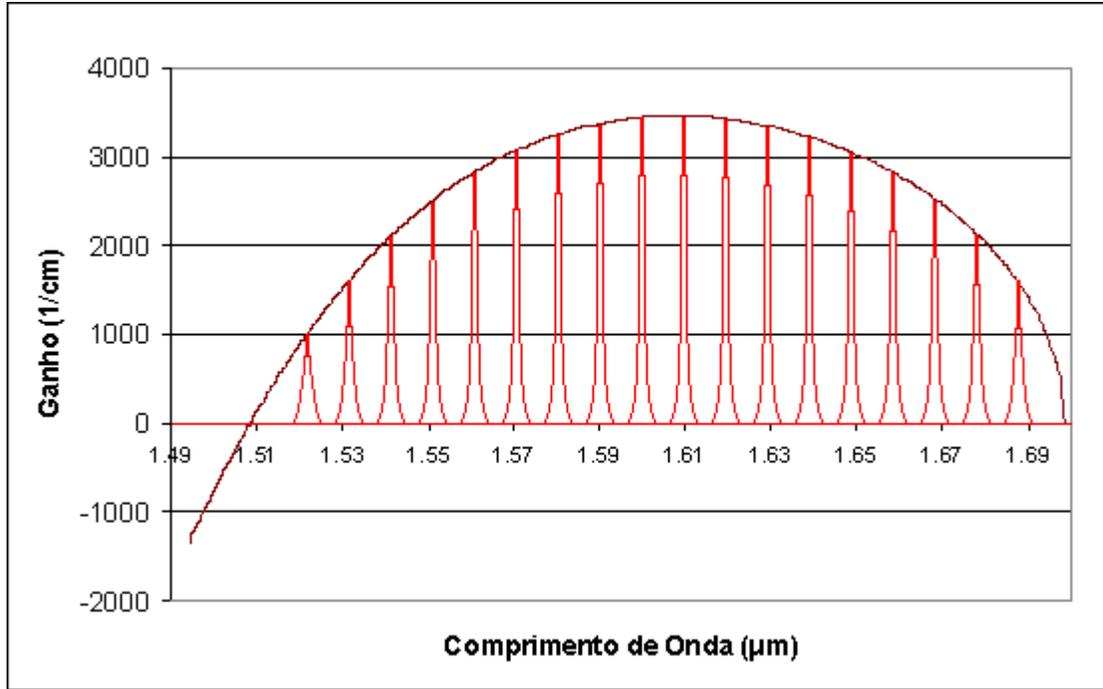
$$\frac{dn}{dt} = \frac{I}{qV} - R_{SP} - R_{\bar{n}Rad} - \sum_i v_g g P_i \quad (5.50)$$

Em que  $\frac{I}{qV}$  é o termo de geração;  $R_{SP}$ ,  $R_{\bar{n}Rad}$  e  $v_g g P_i$  são termos de recombinação (perdas);  $I$  é a corrente injetada no interior da cavidade,  $V$  é o volume da região ativa do laser e  $R_{SP}$  é a taxa de emissão espontânea e  $R_{\bar{n}Rad}$  é a taxa de recombinação não-radiativa. Notem que o último termo representa a contribuição de todas as ressonâncias, ou modos de fótons  $P_i$ , à variação da densidade de portadores na região ativa por absorção ou emissão estimulada. A figura 5.8 reproduz o comportamento normalizado da evolução temporal das equações 5.47 e 5.50:



**Figura 5.8** - Evolução temporal das equações 5.47 e 5.50; no instante  $t=0$ , uma corrente elétrica superior a corrente de limiar é aplicada. As densidades estão em unidades relativas. Figura extraída do livro "Semiconductor Lasers" [Agraval et al, 1993].

A figura ilustra as oscilações de relaxação para a dependência temporal da densidade de portadores  $n(t)$  e para os quatro primeiros modos *Fabry-Perot* da dependência temporal da densidade de fótons para um laser de heteroestrutura de InGaAsP. No instante  $t = 0$ , a corrente salta de  $0 \text{ mA}$  para  $1.5 I_{th}$ , onde  $I_{th}$  é a corrente de limiar (vide próxima seção). O importante a salientar desta ilustração está no fato de ambas as densidades  $n(t)$  e  $P_0(t)$ , depois de decorrido um intervalo de tempo, estabilizarem-se em um valor constante, o qual denominamos estado estacionário. No regime estacionário, a contribuição dos outros modos *Fabry-Perot* ( $P_{\pm 1}(t)$ ,  $P_{\pm 2}(t)$  e  $P_{\pm 3}(t)$ ) tornam-se desprezíveis: durante o regime transiente, as populações de fótons de cada modo competem pela inversão da população de portadores (mecanismo através do qual a luz é gerada devido à recombinação de um par elétron-lacuna). No entanto, o modo que sobressai é aquele cujo valor de energia correspondente apresenta máximo ganho na curva espectral de ganho, conforme mostra a figura 5.9:



**Figura 5.9** – Representação dos modos Fabry-Perot de uma cavidade linear modulados por uma curva de ganho espectral de bulk para uma concentração de  $2.4E18$  portadores/cm<sup>3</sup>.

Sejam as condições do estado estacionário:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} = 0 &\Rightarrow \beta R_{SP} + v_g (g - \alpha_{total}) P = 0 \\ \frac{dn}{dt} = 0 &\Rightarrow \frac{I}{qV} - R_{SP} - R_{\bar{n}Rad} - v_g g P = 0 \end{aligned} \quad (5.51)$$

Supomos que a taxa de recombinação espontânea seja  $R_{SP} = Bn^2$  e a taxa de recombinação não-radioativa seja  $R_{\bar{n}Rad} = Cn^3$ , onde  $B$  é o coeficiente de emissão estimulada e  $C$  é o coeficiente de recombinação não-radiativa Auger [Agraval *et al*, 1993]. A densidade de fótons pode ser reescrita como:

$$\beta B n^2 + v_g (g - \alpha_{total}) P = 0 \Rightarrow P = \frac{\beta B n^2}{v_g (\alpha_{total} - g)} \quad (5.52)$$

A equação de taxa da densidade de portadores, por sua vez, pode ser assim expressa:

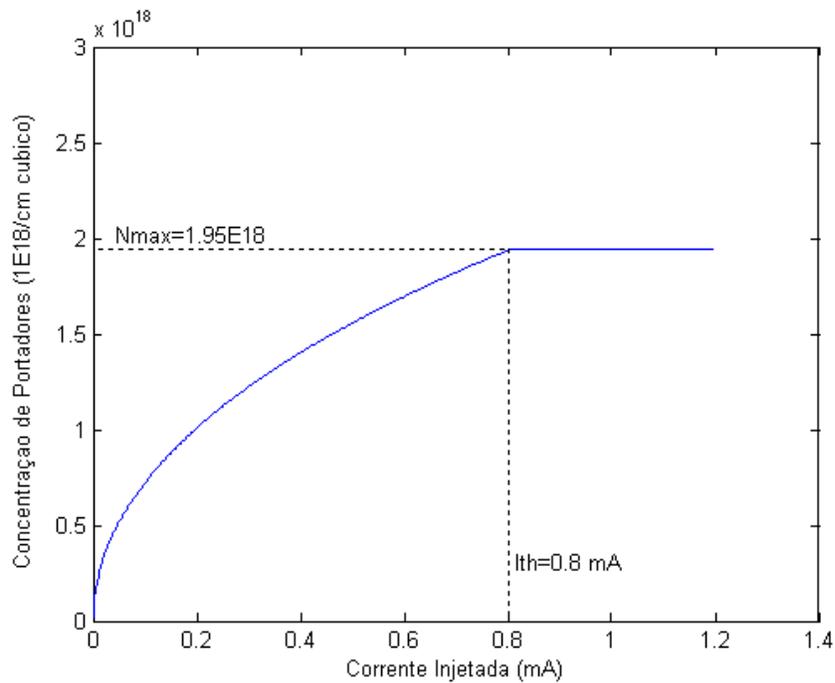
$$\frac{I}{qV} - B n^2 - C n^3 - v_g g P = 0 \Rightarrow \frac{I}{qV} - B n^2 \left( 1 + \frac{\beta g}{(\alpha_{total} - g)} \right) - C n^3 = 0 \quad (5.53)$$

Recordemos que o ganho real é dado pelo fator de confinamento  $\Gamma$  multiplicado pelo ganho  $g(E_f, N)$  obtido das curvas espectrais de ganho apresentadas no **capítulo 4**. Lembramos que

$g(E_f, N)$  é função da concentração (densidade) de portadores. Sem prejuízo de notação,  $g = \Gamma g(E_f, n)$ ; portanto:

$$\frac{I}{qV} - Bn^2 \left( 1 + \frac{\beta \Gamma g(E_f, n)}{(\alpha_{total} - \Gamma g(E_f, n))} \right) - Cn^3 = 0 \quad (5.54)$$

Conhecidos os parâmetros  $(\beta, B, C, \Gamma, g(E_f, N), \alpha_{total}, V)$  da equação 5.54, a solução consiste, para um dado valor de corrente  $I$ , encontrar o valor de  $n$  que satisfaça a equação, resolvida numericamente através do programa *MatLab*. As soluções mostram que, para valores de corrente acima de um determinado valor ( $I_{th}$ ), a densidade de portadores  $n$  não varia, fato que caracteriza, por sua vez, a existência de um valor limite de densidade de portadores, o qual denominamos  $n_{max}$ , como mostra o gráfico da figura 5.10:



**Figura 5.10** - Curva de concentração de portadores em função da corrente injetada. O comprimento da cavidade linear utilizada foi  $10 \mu\text{m}$ . As constantes utilizadas para a simulação numérica da equação 5.54 estão relacionadas na seção 5.6; o ganho utilizado refere-se às curvas espectrais de ganho do bulk.

## 5.5 Corrente de Limiar

O dispositivo laser é caracterizado pela potência da luz que emite, assim como pelo espectro desta luz emitida a partir da corrente injetada neste dispositivo. O mecanismo de injeção de portadores através da passagem de uma corrente elétrica também é denominado de injeção de portadores por bombeio eletrônico. Os aspectos principais do dispositivo laser estão ilustrados na figura 5.11:

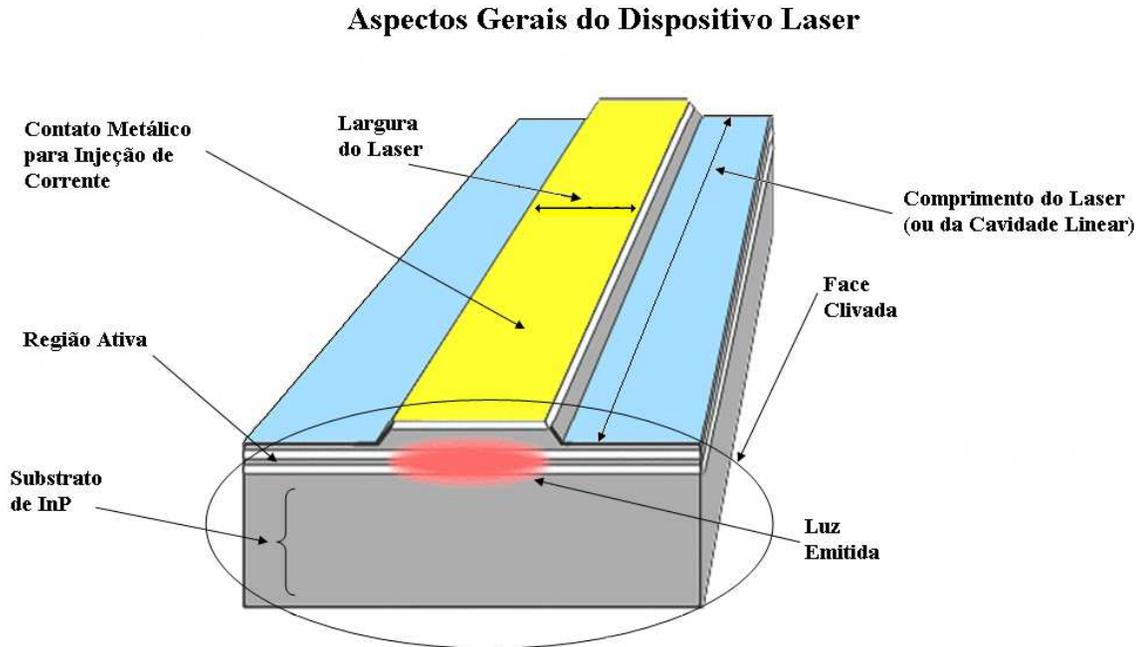


Figura 5.11 - Parâmetros principais do dispositivo laser.

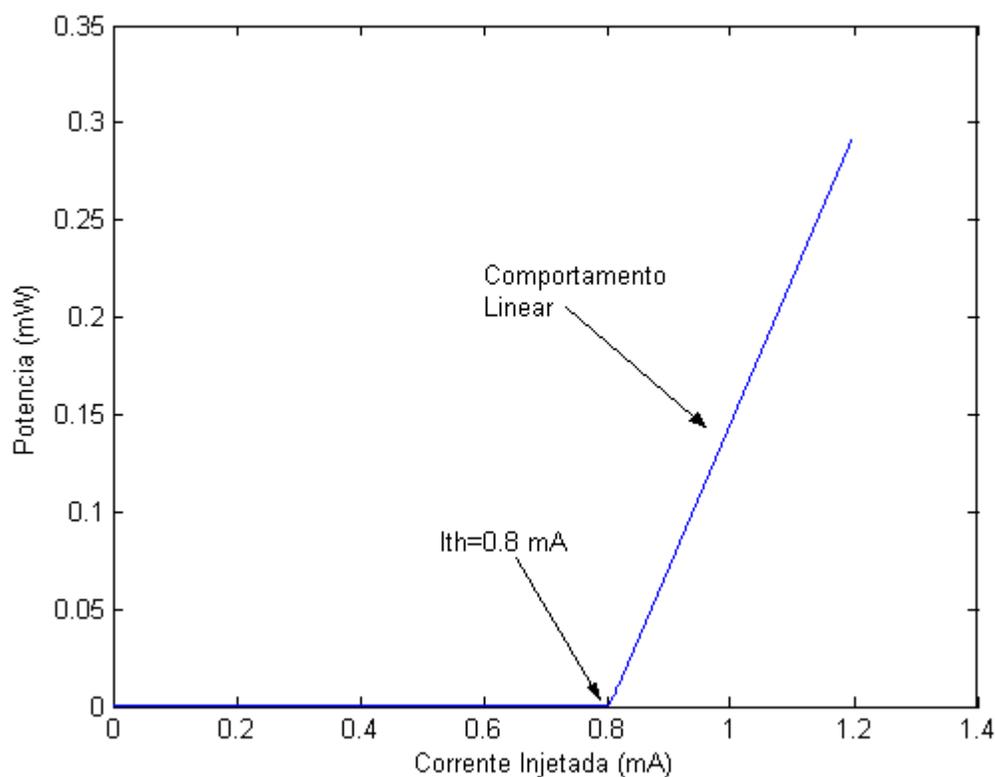
A luz emitida pelo laser é a fração da luz (existente no interior de sua cavidade) que atravessa os espelhos das faces clivadas. A potência desta luz emitida é dada pela seguinte expressão:

$$Pot = \frac{1}{L} \ln\left(\frac{1}{r}\right) \hbar \omega_g P \quad (5.55)$$

Onde  $\omega$  é a frequência do modo. Aplicamos a equação 5.52 e obtivemos:

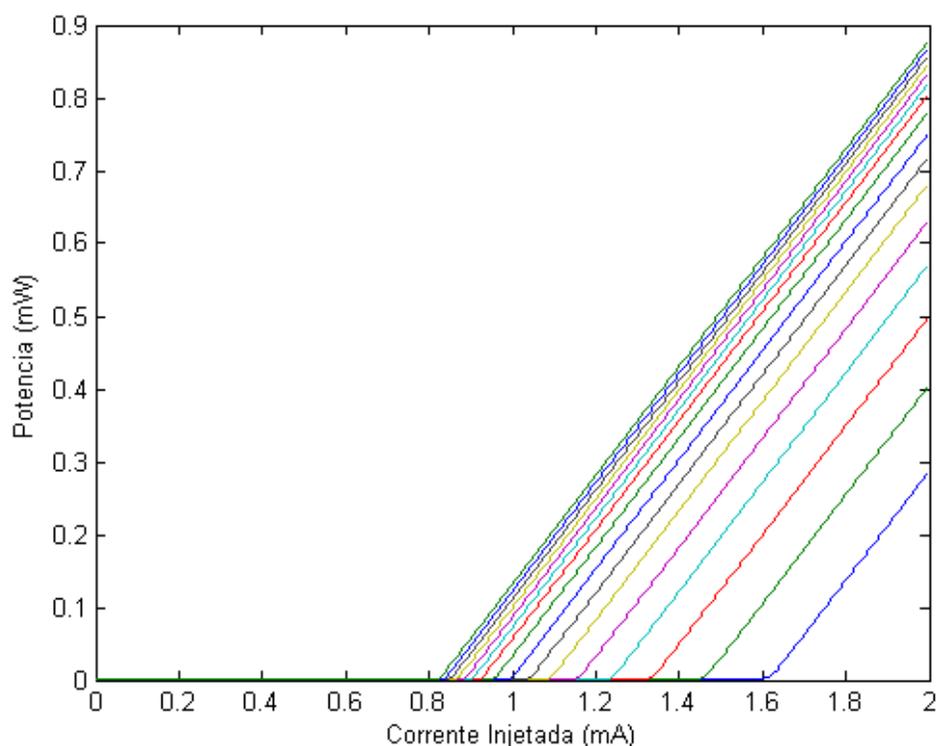
$$Pot = \frac{1}{L} \ln\left(\frac{1}{r}\right) \hbar \omega \frac{\beta B n^2}{(\alpha_{total} - \Gamma g(E_f, n))} \quad (5.56)$$

Lembremos que, para cada valor dado da corrente  $I$ , obtemos (em 5.54) o valor da densidade de portadores  $n$  correspondente. O gráfico da figura 5.12 mostra a equação 5.56 em função dos valores da corrente  $I$  injetada no laser:



**Figura 5.12** - Curva de potência da luz emitida em função da corrente injetada. O comprimento da cavidade linear utilizada foi  $10 \mu\text{m}$ . As constantes utilizadas para a simulação numérica da equação 5.56 estão relacionadas na seção 5.6; o ganho utilizado refere-se às curvas espectrais de ganho do bulk.

Conforme indicado na figura acima, nossas investigações sobre o comportamento das equações de taxa nos conduziram ao conceito de corrente de limiar ( $I_{th}$ ), valor de corrente injetada a partir do qual o valor da potência apresenta um aumento súbito em relação aos valores anteriores. A partir de  $I_{th}$ , a potência apresenta valores cuja dependência é praticamente linear com a corrente injetada. Portanto, podemos definir a corrente de limiar como a corrente que liga o dispositivo laser. Se variarmos o valor do comprimento do laser na equação 5.54 (necessariamente variamos também a equação 5.56), o valor de  $I_{th}$  varia, conforme o gráfico da figura 5.13:

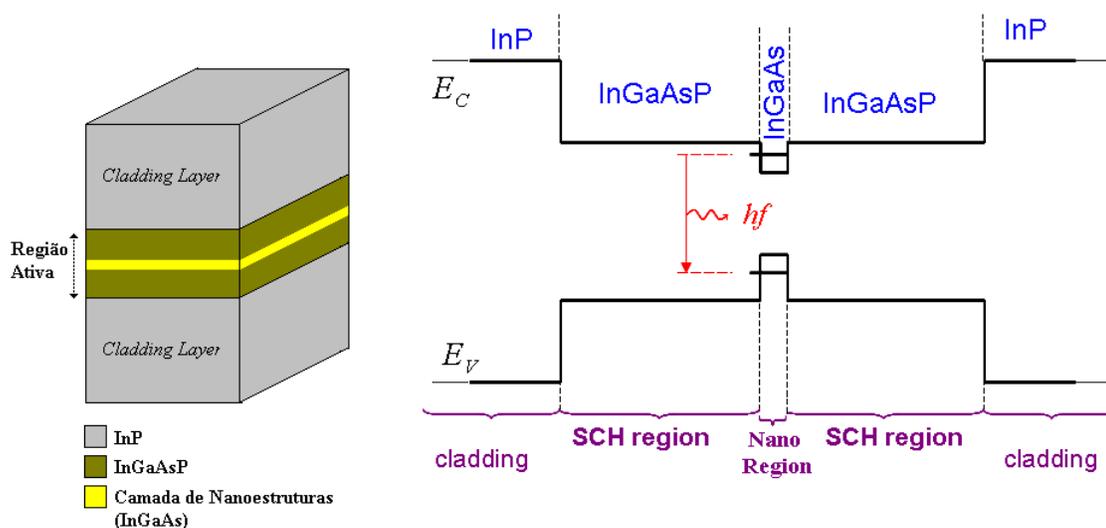


**Figura 5.13** - Curvas de potência da luz emitida em função da corrente injetada para comprimentos de cavidade linear que variam de 4 a 16  $\mu\text{m}$ , totalizando 16 curvas. As constantes utilizadas para a simulação numérica da equação 5.56 estão relacionadas na seção 5.6; o ganho utilizado refere-se às curvas espectrais de ganho do bulk.

Para diversos valores de comprimento da cavidade ressonante, obtivemos curvas de **potência x corrente injetada** nas quais a corrente de limiar se altera na medida em que variamos o comprimento. Note que existe um valor mínimo de corrente de limiar (na figura 5.13, este valor é 0.8 mA), abaixo do qual nenhum dispositivo laser funciona. Nosso interesse consiste em estudar esta variação, a ser abordada na próxima seção.

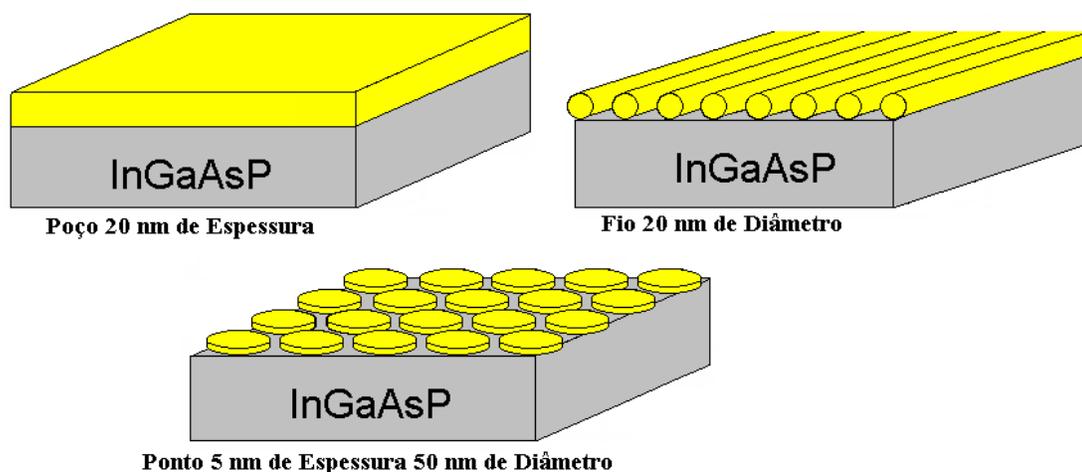
## 5.6 Estudo Comparativo

Estamos interessados no estudo da corrente de limiar quando variamos o comprimento da cavidade linear do laser. Entretanto, para que possamos comparar estes resultados entre os quatro casos abordados, é necessário inserir as nanoestruturas dentro da região ativa de um laser de heteroestrutura, a fim de que obtenhamos os lasers de poço, fio e pontos quânticos, conforme mostram as figuras 5.14 e 5.15:



**Figura 5.14** - Representação das camadas de um laser de região ativa nanoestruturada. Ao lado, o diagrama de energia desta representação. Note como a descontinuidade de energias das bandas privilegia a emissão ou absorção de fótons na camada de nanoestruturas.

Considere uma região ativa de  $3300\text{\AA}$  de espessura. Para critério de comparação, considere que os lasers de semicondutores com região ativa nanoestruturada são compostos apenas de uma camada cuja espessura é da mesma ordem de grandeza. Seja um poço quântico de espessura 20 nm, uma camada de fios quânticos cuja espessura seja o diâmetro do próprio fio (20 nm) e uma camada de pontos quânticos cuja espessura seja a própria espessura do nanodisco (5 nm), conforme mostra a figura 5.15:



**Figura 5.15** - Representação da camada de nanoestruturas (poço, fio e ponto) inseridas na região ativa.

Considere os parâmetros  $\beta = 10^{-5}$ ,  $B = 10^{-10} \text{ cm}^3 / \text{s}$ ,  $C = 10^{-29} \text{ cm}^6 / \text{s}$ ,  $\alpha_{\text{int}} = 20 \text{ cm}^{-1}$  [Agraval *et al*, 1993]. Lembremos que:

O ganho é obtido, para cada caso, a partir de suas respectivas curvas espectrais de ganho apresentadas no **capítulo 4**;

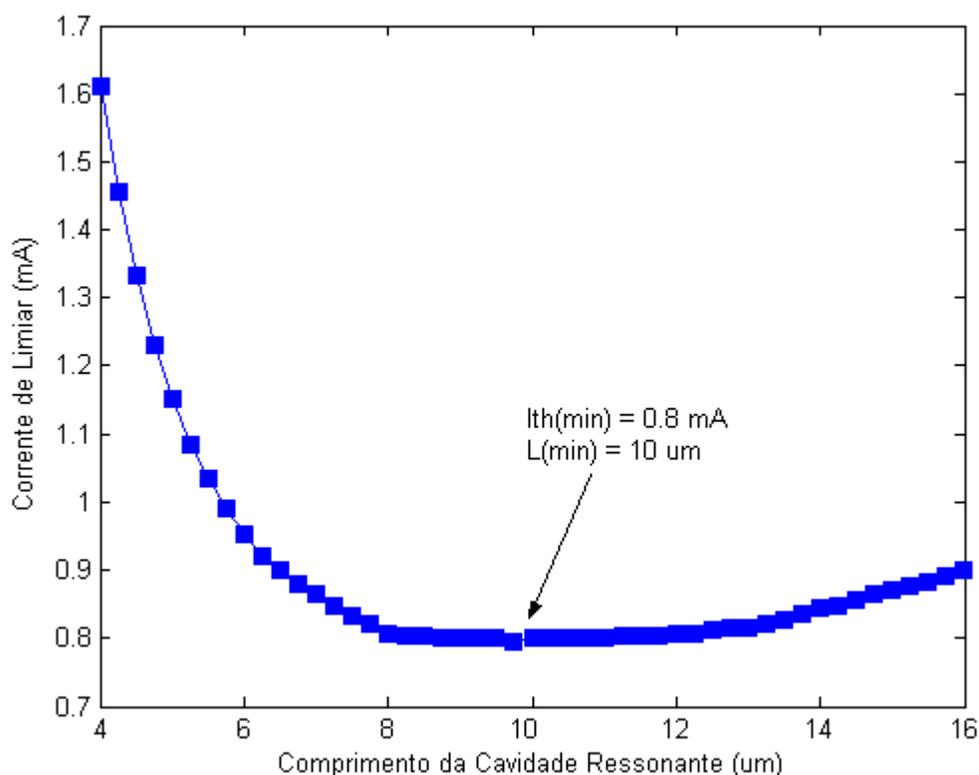
Nos lasers nanoestruturados, o volume considerado na equação 5.54 é dado pelo volume ocupado pelas nanoestruturas. Somente no caso *bulk* o volume considerado é o volume da própria região ativa;

O fator de confinamento para *bulk* (região ativa de **InGaAs**) é 0,60; para o poço é 0,04; para a camada de fios e pontos vale 0,01;

A refletividade, em todos os casos considerados, é igual a 0,3.

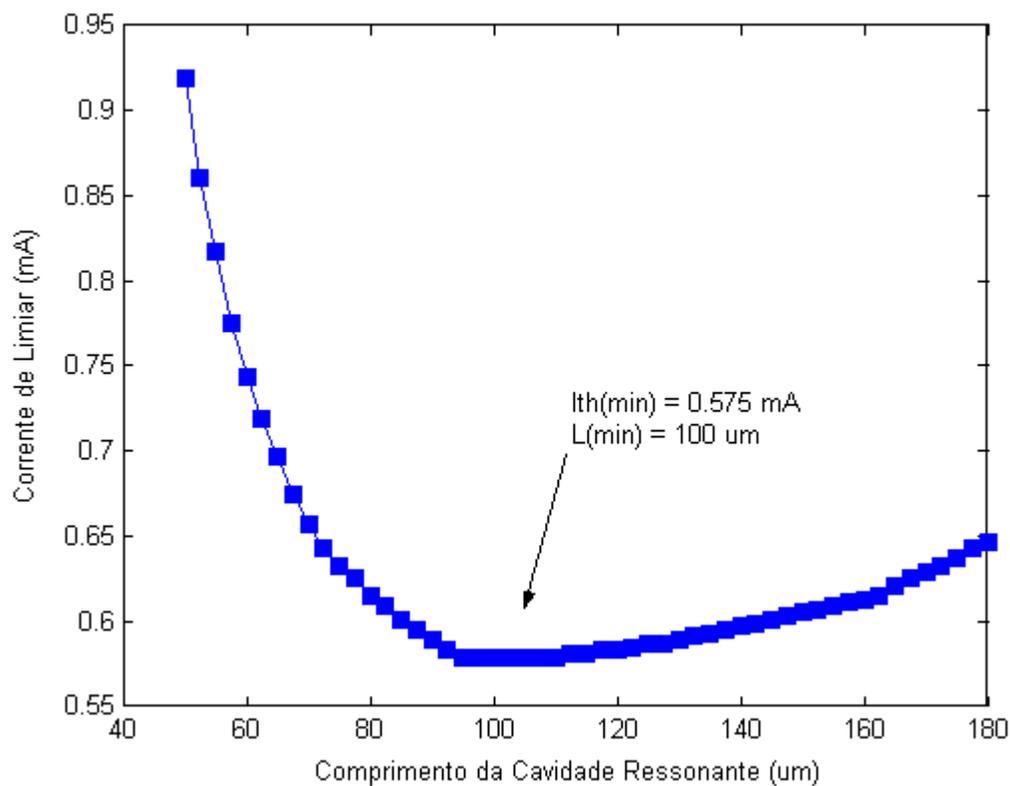
O comprimento de onda associado ao modo ( $\omega$ ) para *bulk* foi 1.65  $\mu\text{m}$ ; para poço, fio e ponto escolhemos o comprimento de onda relativo à primeira transição de cada um deles respectivamente, de acordo com as curvas espectrais de ganho.

A perda total  $\alpha_{\text{total}}$  e o volume  $V$  são funções do comprimento do laser. Para cada valor de comprimento, graficamos a curva **potência x corrente injetada** e encontramos o valor de  $I_{th}$  correspondente. Desta forma foi possível relacionar o valor da corrente de limiar para cada comprimento do laser considerado, através de curvas  $I_{th} \times L$  (comprimento do laser), as quais apresentamos nas figuras 5.16, 5.17, 5.18 e 5.19:



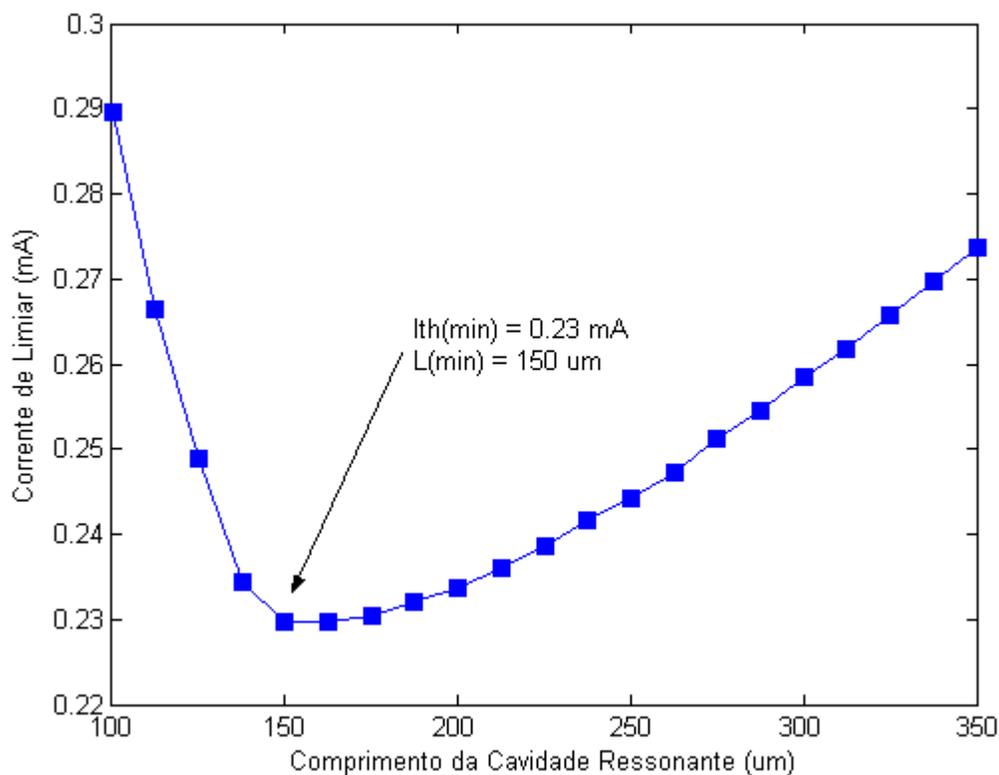
**Figura 5.16** - Curva da corrente de limiar em função do comprimento da cavidade ressonante para o laser de heteroestrutura simples (bulk) de InGaAs.

O gráfico da figura 5.16 nos mostra a curva de corrente de limiar em função do comprimento da cavidade ressonante para *bulk*. A curva possui uma região de mínimo. A corrente mínima é 0.8 mA para o comprimento do laser de 10 µm. Conforme aumentamos o comprimento da cavidade ressonante, a curva tende a um comportamento linear pois a perda nos espelhos tende a zero e o aumento da corrente de limiar é consequência do aumento do volume de injeção, diretamente proporcional ao comprimento da cavidade. Já para valores pequenos de comprimento de cavidade, a corrente de limiar segue um comportamento hiperbólico devido ao termo  $1/L$  de aumento de perda nos espelhos. Este padrão se verifica em todas as demais curvas referentes ao poço, fio e ponto quântico. A literatura científica [Agraval *et al*, 1993] reporta para *bulk* a ocorrência da corrente mínima de limiar para comprimentos de laser da ordem de 10-20 µm.



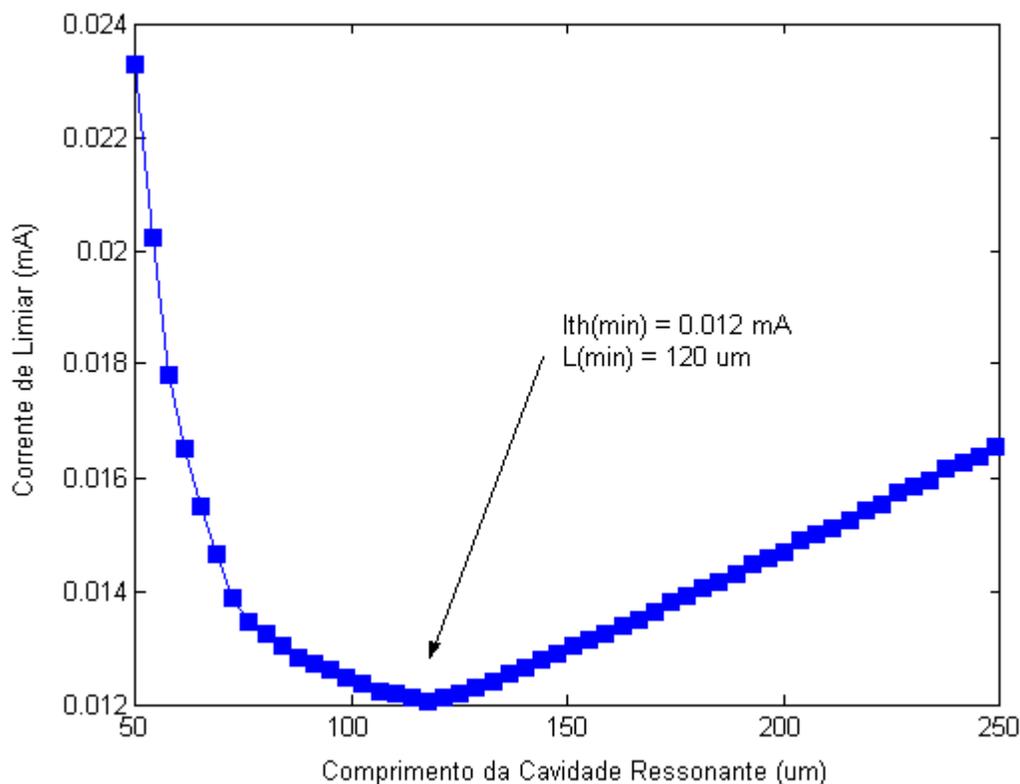
**Figura 5.17** - Curva da corrente de limiar em função do comprimento da cavidade ressonante para o laser de heteroestrutura com região ativa nanoestruturada (poço) – Sistema InGaAs/InGaAsP.

O gráfico da figura 5.17 nos mostra a curva da corrente de limiar em função do comprimento da cavidade ressonante para o poço quântico. A corrente mínima é 0.575 mA para o comprimento do laser de 100 μm. A corrente mínima de limiar do poço quântico é um pouco menor que a corrente mínima de limiar de *bulk*; porém, o comprimento da cavidade ressonante é muito maior. Isto demonstra claramente que a densidade da corrente de limiar é muito maior para *bulk*; ou seja, é necessário bombear uma corrente muito maior para que o dispositivo laser (*bulk*) funcione.



**Figura 5.18** - Curva da corrente de limiar em função do comprimento da cavidade ressonante para o laser de heteroestrutura com região ativa nanoestruturada (fio) – Sistema InGaAs/InGaAsP.

O gráfico da figura 5.18 nos mostra a curva de corrente de limiar em função do comprimento da cavidade ressonante para o fio quântico. A corrente mínima é 0.23 mA para o comprimento do laser de 150 μm; a corrente de limiar diminuiu em relação ao poço. Isto acontece pois o volume ocupado pelos fios é menor em relação ao volume ocupado pelo poço. No entanto, o fator que prepondera é o ganho obtido nas curvas espectrais; para o fio quântico, os valores de ganho superam duas vezes os valores obtidos para o poço quântico. Quanto maior o ganho, menor a corrente a ser bombeada.

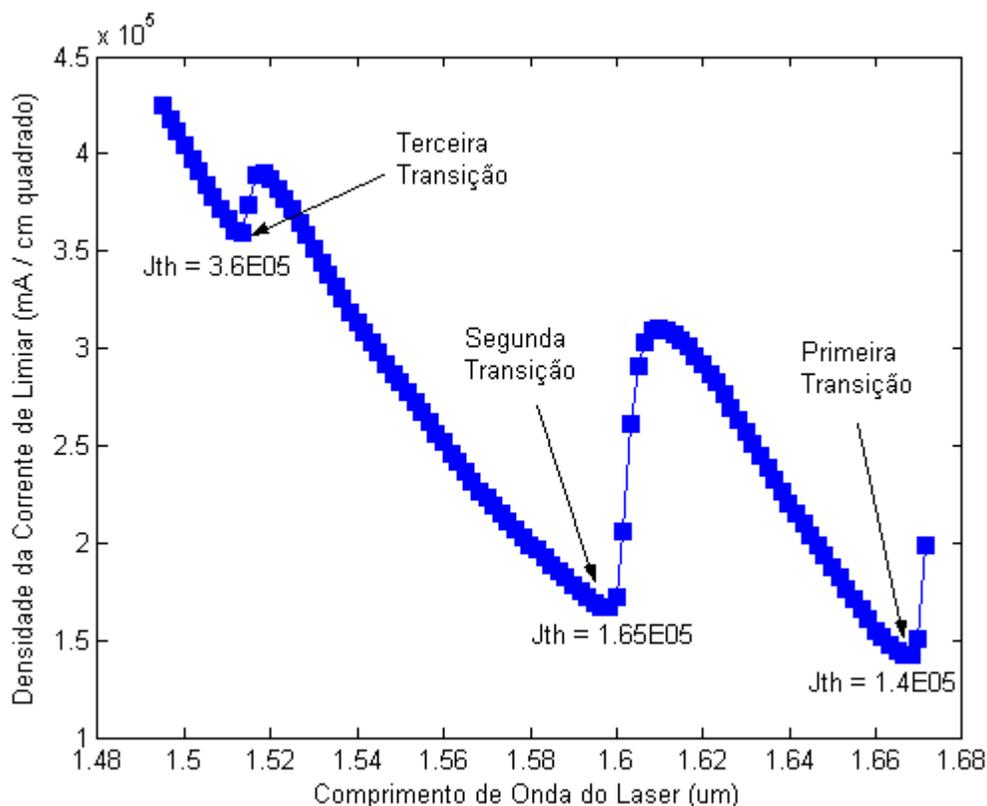


**Figura 5.19** - Curva da corrente de limiar em função do comprimento da cavidade ressonante para o laser de heteroestrutura com região ativa nanoestruturada (ponto) – Sistema InGaAs/InGaAsP.

Por fim, o gráfico da figura 5.19 nos mostra a curva da corrente de limiar em função do comprimento da cavidade ressonante para o ponto quântico. A corrente mínima é 0.012 mA para o comprimento do laser de 120  $\mu\text{m}$ . É a menor corrente de limiar dentre todos os casos apresentados; da mesma forma, o volume a ser bombeado eletronicamente é o menor dentre os três casos de lasers nanoestruturados.

Observamos que o comprimento da cavidade ressonante para o qual ocorre o valor mínimo da corrente de limiar permanece, nos três casos, valores próximos (100 a 150  $\mu\text{m}$ ); a corrente, entretanto, diminui quase duas ordens de grandeza. Através das análises das curvas espectrais de ganho, verificamos que, conforme confinamos as nanoestruturas, os valores de ganho são maiores, o que propicia uma corrente de limiar menor.

No **capítulo 4** havíamos dito que a corrente de limiar ocorre para a primeira transição de cada laser nanoestruturado. O gráfico da figura 5.20 justifica esta afirmação:



**Figura 5.20** - Densidade da corrente de limiar em função do comprimento de onda associado ao modo da cavidade linear.

O gráfico acima nos mostra a densidade da corrente de limiar quando variamos o comprimento de onda do modo (laser de poço quântico). Note que existem três mínimos: o comprimento de onda de cada um deles corresponde ao comprimento de onda das três transições possíveis no poço quântico, conforme apontam as respectivas curvas espectrais de ganho no **capítulo 4**. Observe que a primeira transição está associada ao menor valor da densidade de corrente de limiar. Quando injetamos corrente no laser, desde 0 mA, a densidade de corrente aumenta até que atinja o valor de  $1.4 \times 10^5$  mA/cm<sup>2</sup>; a partir deste valor (que ocorre para a primeira transição) o laser passa a funcionar. O mesmo se sucede com fios e pontos quânticos.

Entretanto, se continuamos a injetar corrente no dispositivo, o laser pode passar a emitir na segunda transição; conforme vimos no **capítulo 4**, quanto maior a energia das transições permitidas no poço, maiores são os valores de máximo ganho quando aumentamos a concentração de portadores. Ou seja, quando injetamos mais corrente, propiciamos maior concentração de portadores o que, por sua vez, propicia maiores ganhos na segunda ou terceira

transições; desta forma o modo *Fabry-Perot* correspondente ao comprimento de onda da segunda transição do poço, por exemplo, passaria a sobreviver na cavidade.

Finalizamos, portanto, toda a análise teórica do modelo proposto para um laser de faces clivadas (ou seja, de cavidade linear) com regiões ativas nanoestruturadas (poço, fio ou ponto quântico) bombeados por injeção eletrônica. Nos capítulos que seguem (6 e 7) descrevemos todo o procedimento experimental que compreende desde a caracterização de amostras até a fabricação de um laser de poços quânticos.

## Capítulo 6

---

# Crescimento Epitaxial de Poços Quânticos e Diodo de InP

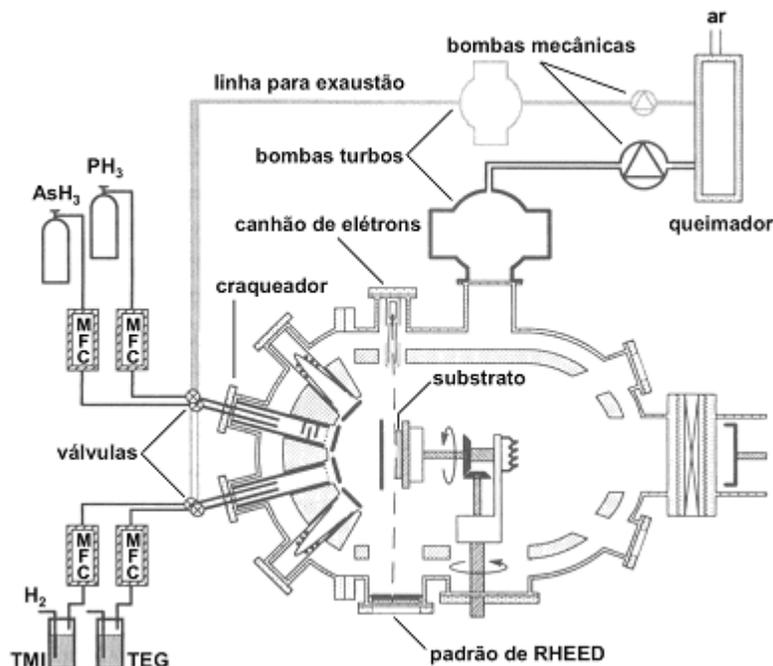
---

### 6.1 Introdução

O objetivo deste capítulo consiste em dimensionar e caracterizar as partes constituintes de um laser de poços quânticos: a **região ativa** que contém uma seqüência de poços quânticos de mesma espessura e as **camadas confinantes** que envolvem a região ativa. As camadas confinantes podem ser estudadas na forma de um **diodo**. Descrevemos, neste capítulo, os procedimentos experimentais que compreendem o crescimento de materiais semicondutores e a caracterização de amostras no sentido de desenvolver as etapas principais envolvidas na fabricação de lasers de semicondutores de poços quânticos; a **seção 6.2** contém uma descrição sucinta do método de crescimento utilizado, denominado Crescimento por Epitaxia de Feixes Químicos, “Chemical Beam Epitaxy” (CBE). Na **seção 6.3** descrevemos os métodos empregados para caracterizar as amostras crescidas. Na **seção 6.4** desenvolvemos o crescimento epitaxial de poços quânticos e por fim, na **seção 6.5**, desenvolvemos um diodo de InP.

### 6.2 Epitaxia de Feixes Químicos (CBE)

Crescimento epitaxial de feixe químico é uma técnica através da qual feixes de diferentes átomos/moléculas provenientes de fontes químicas incidem sobre uma amostra no interior de uma câmara de alto vácuo ( $10^{-9}$  torr), com a finalidade de agregar, em arranjos cristalinos, os elementos químicos sobre a superfície da amostra, que é mantida a uma determinada temperatura adequada para o crescimento. O termo epitaxial, cuja origem grega *epitaxis* é composta pelas palavras *epi*, superfície e *taxis*, arranjo, diz respeito à formação de finas camadas crescidas sobre um substrato cristalino onde a orientação cristalina é transferida à camada. A figura 6.1 apresenta um desenho esquemático de um sistema CBE típico:



**Figura 6.1** - Diagrama esquemático do CBE.

O sistema CBE compreende um conjunto de 3 câmaras de vácuo (introdução, transferência e crescimento), bombas de vácuo (mecânicas e iônicas) e uma série equipamentos de controle e caracterização que monitoram o crescimento. O alto vácuo é necessário para que o livre caminho médio das espécies químicas criadas ou injetadas na câmara de crescimento seja maior que a distância entre injetores e amostra, resultando num comportamento balístico de feixes atômicos. O CBE dispõe de equipamentos que monitoram a temperatura do substrato e das células dos elementos químicos dopantes, os fluxos dos gases, as pressões nas câmaras e uma série de outros parâmetros. A taxa de crescimento, a composição dos fluxos de materiais e a temperatura da amostra são alguns dos parâmetros de controle que são otimizados para obter filmes epitaxiais de alta qualidade. Em nosso sistema, os elementos químicos disponíveis para crescimento de camadas são Índio (In), Gálio (Ga), Fósforo (P) e Arsênio (As). As e P encontram-se, originalmente, nas formas gasosas Arsina ( $AsH_3$ ) e Fosfina ( $PH_3$ ); ambos os gases, ao passarem por um craqueador, quebram suas ligações com o hidrogênio, liberando As e P que são incorporados ao crescimento da camada. In e Ga encontram-se nas formas metalorgânicas trimetil-In (TMI -  $In(CH_3)_3$ ) e trietil-Ga (TEG -  $Ga(C_2H_5)_3$ ) que são introduzidos à câmara por

hidrogênio saturado em seus vapores. A figura 6.2 nos mostra o diagrama das linhas químicas do CBE:

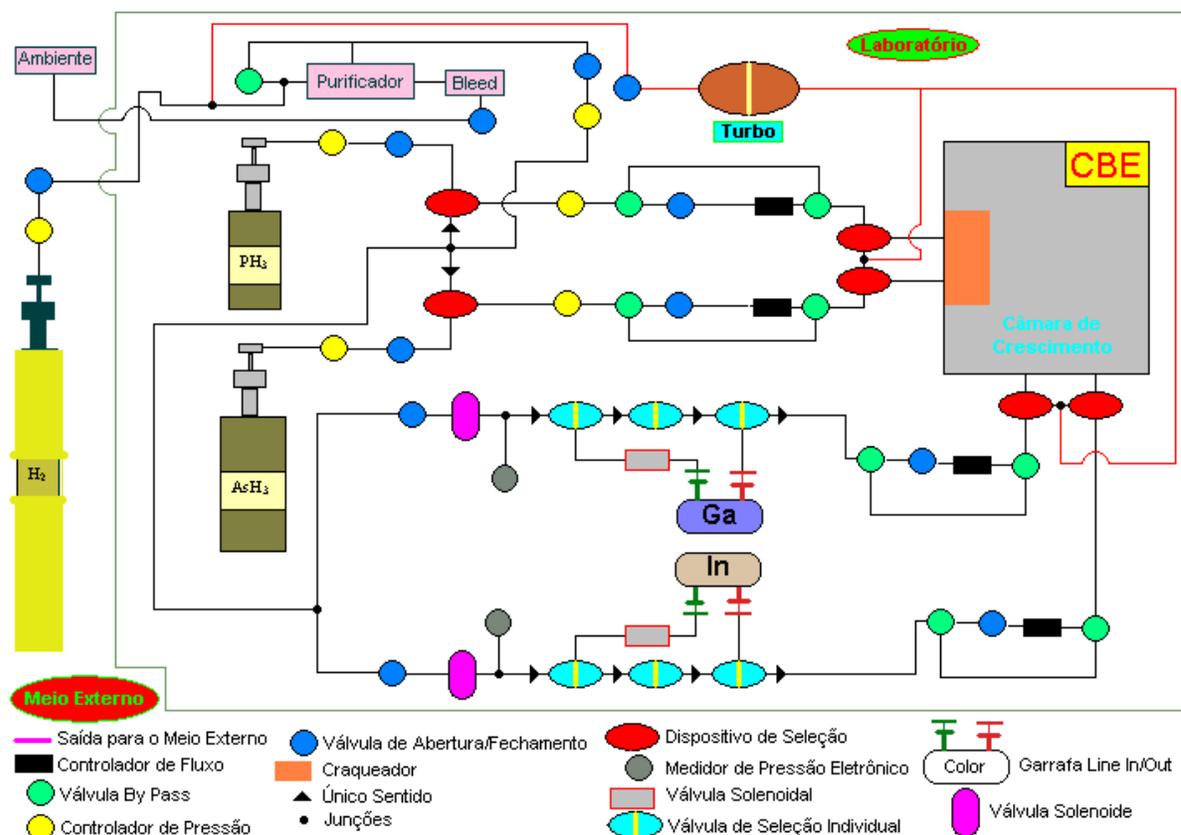


Figura 6.2 - Diagrama de linhas químicas do CBE.

Os elementos químicos disponíveis para a dopagem são Silício (Si) e Berílio (Be). As células de Si e Be (internas à câmara de crescimento) consistem, cada qual, de um cadinho que contém Si ou Be sólidos. O cadinho pode ser aquecido a altas temperaturas, favorecendo o desprendimento e emissão dos átomos destes elementos químicos, que incidem sobre a amostra. Os substratos utilizados em nossos crescimentos são todos de InP (**dopado tipo n** ou **semi-isolante**) cuja orientação cristalina é (100). Inicialmente, a amostra é colocada na câmara de introdução, de onde é transferida para a câmara de transferência e desta para a câmara de crescimento. Os procedimentos desta cadeia de câmaras visam manter o vácuo da câmara principal inalterado. A partir do momento em que a amostra é inserida na câmara de crescimento, iniciamos o processo de desoxidação do substrato (InP), no qual a temperatura do substrato é elevada a 540 °C, a fim de evaporar o óxido do substrato. Durante o aquecimento e desoxidação do substrato, o fluxo de

Fosfina deve ser mantido. Caso contrário, existe uma redução da reposição de P; a rede cristalina da superfície do substrato é destruída, tornando a amostra fosca e inutilizável. A temperatura do substrato que maximiza tanto a taxa de crescimento quanto a taxa de dopagem de InP é 520 °C [Bettini, 2003]. Para os compostos ternários (InGaAs) e quaternários (InGaAsP) que utilizamos, a temperatura que maximiza a taxa de crescimento é 530 °C. Durante o crescimento, podemos observar a formação de monocamadas da composição crescida, através do canhão de feixes de elétrons existente no interior da câmara de crescimento: os feixes incidem quase paralelamente à superfície da amostra. O padrão de difração destes elétrons é observado em uma tela situada no lado oposto ao canhão. Através do padrão observado, podemos inferir o casamento do parâmetro de rede e a qualidade do filme crescido. Este método é denominado difração por reflexão de elétrons de alta energia, *reflected high energy electron diffraction* (RHEED). Após o crescimento da amostra, procedemos ao seu resfriamento, para que possamos transferi-la da câmara de crescimento para a de transferência e, por sua vez, desta para a câmara de introdução, finalizando todo o processo.

### **6.3 Caracterização de Amostras**

A caracterização de amostras é imprescindível para o desenvolvimento das partes constituintes de um laser de poços quânticos. Amostras de diversas finalidades são crescidas para a verificação da composição, dopagem e taxa de crescimento. Após o crescimento das amostras de nosso interesse, necessitamos caracterizá-las com o intuito de determinar se a amostra dispõe das características e propriedades desejadas, assim como determinar se as condições de crescimento inicialmente planejadas foram alcançadas. Dispomos de quatro métodos de caracterização de amostras utilizadas em nosso trabalho: efeito Hall, CxV eletroquímico, raio-X e fotoluminescência.

#### **6.3.1 Efeito Hall**

Efeito Hall é o método utilizado para determinar a concentração de portadores oriundos da presença de elementos químicos dopantes na rede cristalina do semiconductor. Um forte campo magnético incide perpendicularmente à superfície da amostra conforme o esquema da figura 6.3:

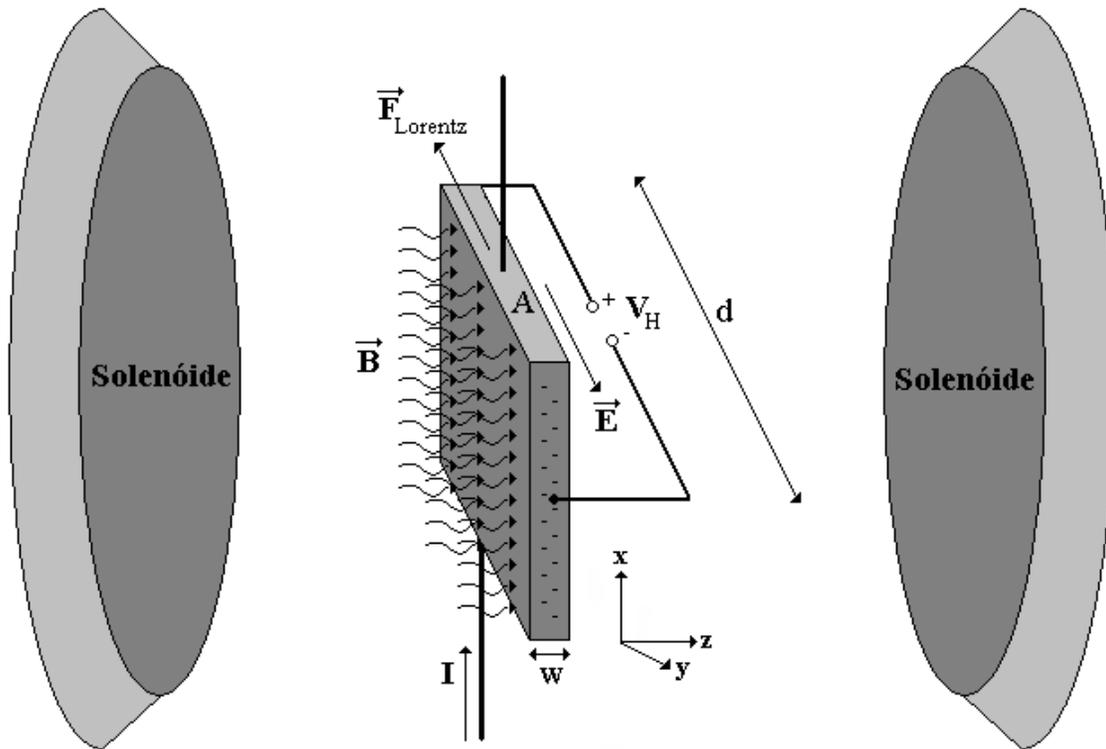


Figura 6.3 - Parâmetros da medida de Efeito Hall.

A amostra é atravessada pela corrente  $I$ . Cargas em movimento sob a ação de um campo magnético sofrem a ação da força de Lorentz que as impele para a lateral da amostra. As cargas acumuladas, no entanto, criam um campo elétrico contrário a este acúmulo. Quando ambas as forças se equilibram ( $F_{magnética} = F_{elétrica}$ ), podemos inferir a seguinte relação:

$$qE_y = qv_x B_z \quad (6.1)$$

Seja  $v_x = \frac{J_n}{qn}$  onde  $J_n$  é a densidade superficial de corrente e  $n$  é a concentração volumétrica de portadores presentes na amostra.  $V_H = E_y d$  é a diferença de potencial medida entre as laterais da amostra e  $w$  é a espessura da amostra. A concentração volumétrica de portadores na amostra pode ser mensurada através da seguinte expressão:

$$n = \frac{IB_z d}{qV_H A} \quad (6.2)$$

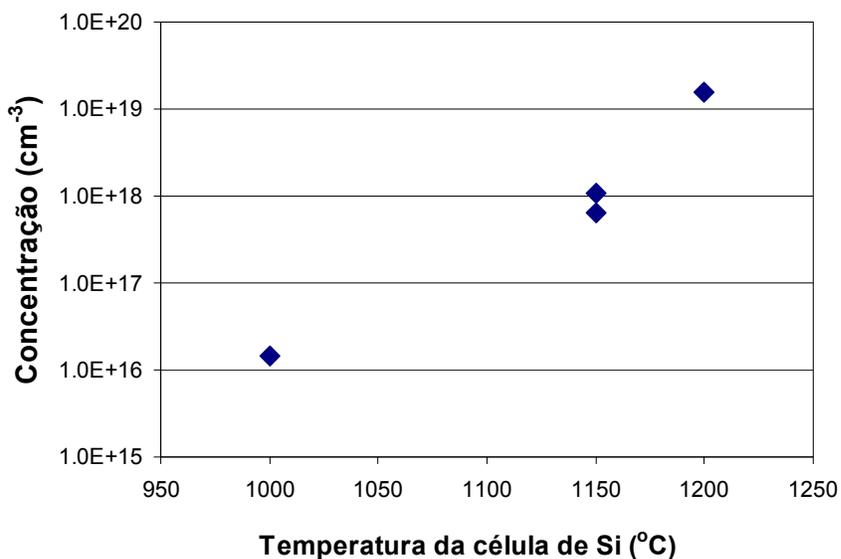
Onde  $A$  é a área da lateral superior da amostra. A equação 6.2 pode ser reescrita em função da espessura da amostra:

$$n = \frac{IB_z}{qV_H w} \quad (6.3)$$

Através dos parâmetros mensuráveis da equação 6.3, podemos determinar a concentração de portadores (elétrons ou lacunas). Os elementos químicos dopantes cuja presença na rede cristalina propicia a doação de elétrons são denominados dopantes **tipo n**; aqueles cuja presença propicia a aceitação de elétrons são denominados **tipo p**. O Si, ao ocupar o lugar do In na rede cristalina de InP, estabelece 4 ligações covalentes com o P, que dispõe de 5 elétrons em seu último nível eletrônico. O elétron excedente é considerado doador. **O Si comporta-se<sup>1</sup> como dopante tipo n para InP(100)**. Por sua vez, o Be, ao ocupar o lugar do In na rede cristalina de InP, estabelece 2 ligações iônicas com o P, que necessita de 3 ligações iônicas para o equilíbrio de sua configuração eletrônica. A ligação faltante é considerada aceitadora. **O Be é dopante tipo p para InP(100)**. Ambos (Si e Be) contribuem apenas com um único portador na rede; portanto, a concentração de portadores pode ser considerada, neste caso, como a concentração de átomos dopantes na rede. Uma aplicação imediata da dopagem de semicondutores trata-se do diodo, dispositivo que consiste da junção abrupta de um mesmo material semicondutor dopado com elementos químicos diferentes (tipo n e tipo p). Nos lasers de semicondutores, as camadas confinantes são dopadas para possibilitar a passagem da corrente elétrica e, conseqüentemente, promover a injeção de portadores na região ativa. O gráfico da figura 6.4 nos mostra a dependência da concentração de Si em InP com a temperatura da célula de Si, através de medidas de efeito Hall. As amostras são camadas de InP(Si) crescidas durante 01 hora (~1µm) sobre substrato de InP semi-isolante.

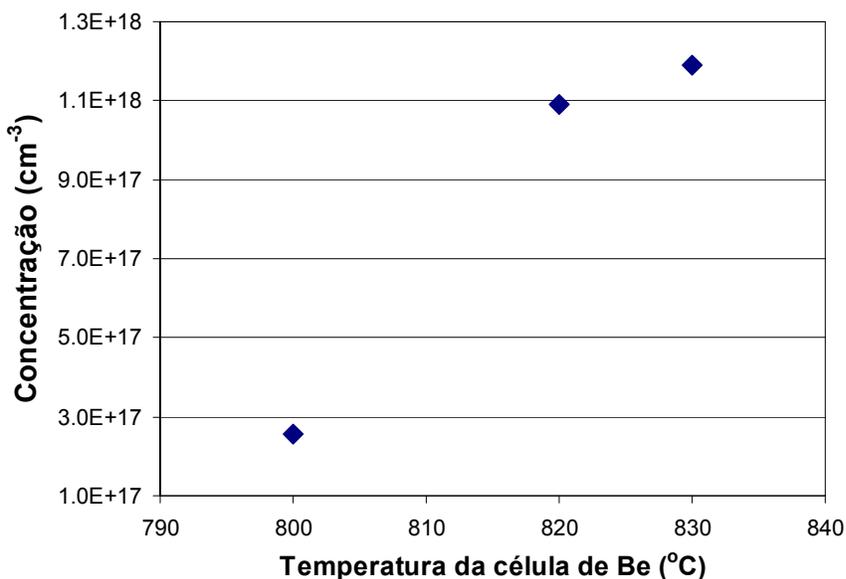
---

<sup>1</sup>O Si é anfótero. Pode ser dopante tipo p se incorporado no lugar do P.



**Figura 6.4** - Curva de calibração da dopagem de Si em InP – Concentração de portadores em função da temperatura da célula de Si – Amostras CBE 2229 (1150oC), CBE 2256 (1000oC), CBE 2257 (1150oC) e CBE 2264 (1200oC).

O gráfico da figura 6.5 nos mostra a dependência da concentração de Be em InP com a temperatura da célula de Be, através de medidas de efeito Hall. As amostras são camadas de InP(Be) crescidas durante 01 hora (~1µm) sobre substrato de InP semi-isolante.

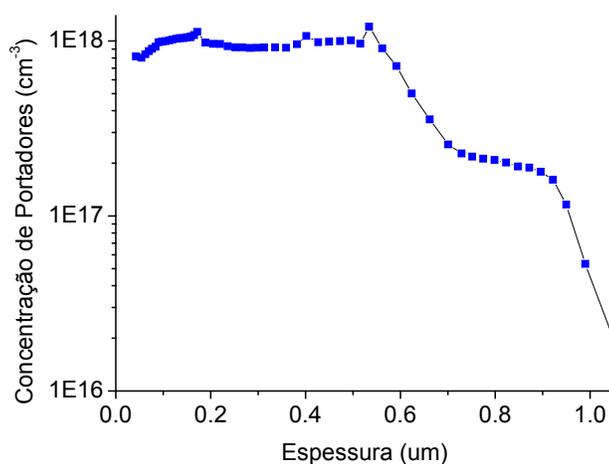


**Figura 6.5** - Curva de calibração da dopagem de Be em InP – Concentração de portadores em função da temperatura da célula de Be – Amostras CBE 2230 (820oC), CBE 2254 (800oC) e CBE 2263 (830oC).

A curva de calibração da figura 6.5 sugere que a concentração de Be começa a saturar para temperaturas superiores a 820°C. Os valores de concentração obtidos para amostras de InP dopados com Be concordam com os valores experimentais correlatos [Cotta *et al*, 1995]. Com o intuito de fabricar o diodo, conforme será visto adiante, faz-se necessário desenvolver camadas de InGaAs altamente dopadas tipo p para o estabelecimento de contatos ôhmicos. Com relação à camada de InGaAs dopada com Be, crescemos uma única amostra, CBE 2255 (800°C), durante 01 hora (~0.8µm) sobre substrato de InP semi-isolante; obtivemos uma concentração de  $1.8 \times 10^{19}$  portadores/cm<sup>3</sup>.

### 6.3.2 Perfilometria de dopagem: CxV eletroquímico

O CxV eletroquímico é o método utilizado para determinar, em uma amostra dopada, o perfil de concentração de dopantes ao longo da camada crescida. Uma pequena parte da superfície de uma amostra é exposta a uma solução corrosiva (cuja taxa de corrosão sobre o material da amostra é conhecida). Através de medidas de capacitância  $\times$  tensão eletrolítica é possível verificar a concentração de portadores ao longo de toda a camada, na medida em que esta é corroída; a leitura dos valores de concentração ao longo de intervalos regulares de tempo nos fornece este perfil da dopagem. A perfilometria de dopagem mostra-se eficaz, particularmente, quando desejamos estimar a espessura de uma camada dopada crescida sobre um substrato semi-isolante, conforme mostra o gráfico da figura 6.6:

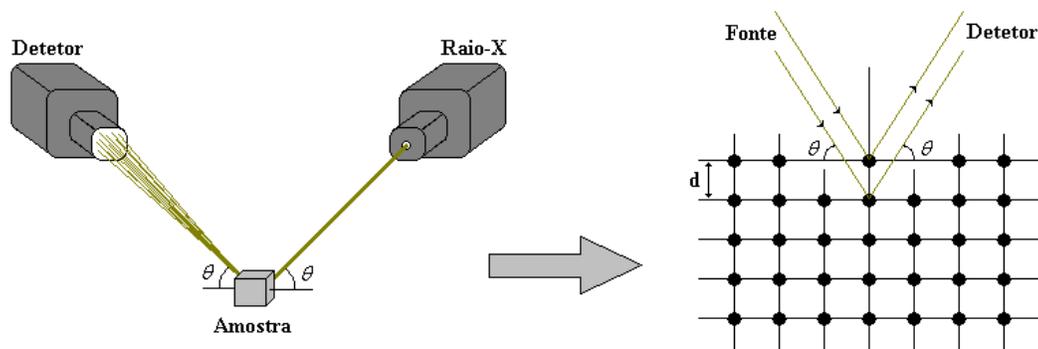


**Figura 6.6** - Perfil da concentração de portadores em função da profundidade da camada através de medidas de capacitância  $\times$  tensão eletrolítica – Amostra CBE 2254.

A amostra mencionada na figura 6.6 consiste de uma camada de InP dopada tipo p (Be), crescida durante 01 hora ( $\sim 1\mu\text{m}$ ) sobre um substrato de InP semi-isolante. A temperatura utilizada na célula de Berílio foi  $800^\circ\text{C}$ , que corresponde, de acordo com a curva da figura 6.5, a uma concentração de  $2.6 \times 10^{17}$  portadores/ $\text{cm}^3$ . Lembremos que o efeito Hall fornece o valor da concentração da camada como um todo; ou seja, um valor médio. Entretanto, observamos no CxV eletroquímico desta amostra que, desde sua superfície até  $0.5 \mu\text{m}$  de profundidade, temos uma concentração de portadores da ordem de  $9 \times 10^{17}$  portadores/ $\text{cm}^3$ ; de  $0.5$  a  $0.7 \mu\text{m}$ , a concentração diminui de forma constante para  $2 \times 10^{17}$  portadores/ $\text{cm}^3$ , devido à difusão do elemento químico dopante, permanecendo neste valor até  $0.9 \mu\text{m}$ ; de  $0.9$  a  $1 \mu\text{m}$ , a concentração diminui, de forma acentuada, indicando o término da camada dopada e o começo do substrato semi-isolante. Através do perfil de concentração da amostra ao longo da profundidade da camada crescida podemos inferir a taxa de crescimento equivalente a  $1 \mu\text{m}/\text{h}$ , valor usual da taxa de crescimento de InP a  $520^\circ\text{C}$ . A dopagem residual estimada para crescimento de InP é de  $8.3 \times 10^{15}$  portadores/ $\text{cm}^3$  (efeito Hall – amostra CBE 2243).

### 6.3.3 Raio-X

Raio-X é o método utilizado para estimar o valor do parâmetro de rede de uma estrutura cristalina a partir de uma fonte monocromática de raios-x, cujo comprimento de onda seja conhecido. O método consiste de uma fonte fixa de raios-x que incidem sobre a amostra que se deseja caracterizar e um detector posicionado de acordo com a figura 6.7:

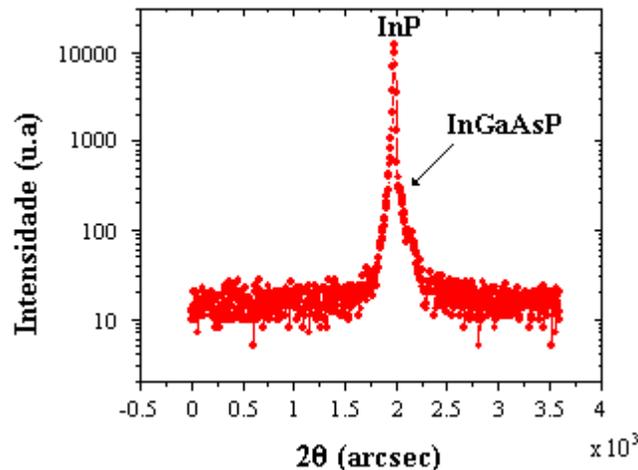


**Figura 6.7** - Diagrama esquemático da medida de Raio-x de uma amostra. Ao lado, representação da interferência dos raios com a rede cristalina da amostra.

A amostra pode ser girada de um ângulo  $\theta$ ; o detector é girado simultaneamente de  $2\theta$ . A varredura do ângulo  $\theta$  proporciona padrões de interferência dos raios difratados pela amostra que são captados pelo detector. A interferência é descrita a partir da lei de Bragg:

$$n\lambda = 2d\sin(\theta) \quad (6.4)$$

Onde  $\lambda$  é o comprimento de onda do raio-x e  $d$  é o parâmetro de rede. Em nosso caso, utilizamos o raio-X para averiguar o casamento do parâmetro de rede entre InP/InGaAs e InP/InGaAs. O pico de máxima intensidade da difração de InP, cujo ângulo é conhecido, é tomado como referência. Realizamos varreduras de 3600 (ou 7200) segundos de arco em torno do ângulo correspondente a este pico, a fim de constatar se há outros picos ou não. A presença de outro pico de menor intensidade evidencia o descasamento do parâmetro de rede entre as estruturas analisadas.

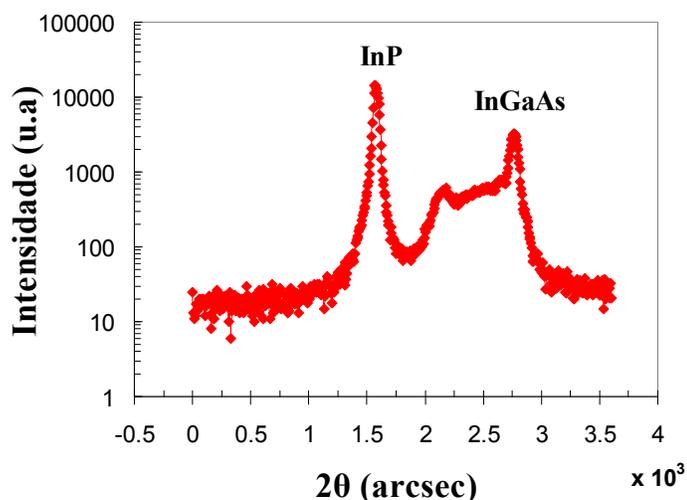


**Figura 6.8** – Medida de raio-x para verificação de casamento de parâmetro de rede (InGaAsP/InP). Varredura de 3600 arcsec em torno do pico central (InP) – Amostra CBE 2118 – Luis Nieto González (SPM/DFA)

A amostra mencionada na figura 6.8 consiste de uma camada de InGaAsP ( $Q = 1.42 \mu\text{m}$ ) crescida sobre substrato de InP durante 30 minutos ( $\sim 0.4 \mu\text{m}$ ). O gráfico desta figura nos mostra que as camadas estão praticamente casadas. Quando há descasamento do parâmetro de rede, situação em que aparecem dois picos distintos no raio-X, é possível mensurar este descasamento, percentualmente, através da seguinte expressão:

$$\frac{\Delta a}{a} = 100 \times \frac{(\phi_Q - \phi_{InP})}{\tan(\phi_Q - \phi_{InP} + \theta_{InP})} \quad (6.5)$$

Onde  $\phi_Q$  é o ângulo (em radianos) do pico descasado,  $\phi_{InP}$  é o ângulo (em radianos) do pico do InP e  $\theta_{InP}$  é o ângulo de Bragg do InP, igual a 0.598 radianos. O gráfico da figura 6.9 ilustra a situação de descasamento do parâmetro de rede:



**Figura 6.9** – Medida de raio-x para verificação de casamento de parâmetro de rede (InGaAs/InP). Varredura de 3600 arcsec em torno do pico central (InP) – Amostra CBE 2239

A amostra mencionada na figura 6.9 consiste de uma camada de InGaAs ( $Q = 1.66 \mu\text{m}$ ) crescida sobre substrato de InP durante 1 hora ( $\sim 0.8 \mu\text{m}$ ). O gráfico desta figura nos mostra que as camadas estão descasadas. O pico de difração do InP está em 1578 arcsec e o pico da camada de InGaAs está em 2778 arcsec; esta diferença de 1200 arcsec implica em um descasamento do parâmetro de rede de 0.86% (menor) em relação ao InP ( $5.8688 \text{ \AA}$ ); ou seja, o parâmetro do InGaAs é igual a  $5.8185 \text{ \AA}$ . Para camadas ultrafinas (por exemplo, poços quânticos de InGaAs) crescidas sobre outro material espesso, o estresse devido ao descasamento entre as estruturas não é suficiente para a deterioração da rede cristalina do material crescido; no entanto, à medida que esta se torna espessa, ocorre a relaxação da rede e a quebra de sua continuidade, comprometendo a qualidade da estrutura como um todo. Como critério experimental, consideramos estruturas casadas quando a diferença entre os picos da difração de raio-X for menor que 150 arcsec.

### 6.3.4 Fotoluminescência

A fotoluminescência é o método através do qual um feixe externo de laser ( $\text{Ar}^+$  ou He-Ne, por exemplo) incide sobre a amostra, excitando-a a ponto de luminescê-la; ou seja, promove a excitação de elétrons no material para níveis de energia mais altos de tal forma que, ao decair para o estado fundamental, este emita luz que exibirá as propriedades dos níveis energéticos do material. Através do espectro desta luz característica, podemos analisar as propriedades e estruturas da amostra. A fotoluminescência pode ser pensada como uma forma de injeção de portadores através de bombeio óptico: os fótons que incidem sobre a amostra geram pares elétrons-lacunas; injeta portadores tal como o mecanismo de bombeio eletrônico, porém em uma escala menor. A energia dos fótons provenientes do feixe externo deve ser necessariamente maior que a energia de *bandgap* da camada a ser caracterizada (*bulk*); no caso de haver nanoestruturas, a energia do fóton deve ser maior que a menor energia permitida de transição. A figura 6.10 ilustra o método:

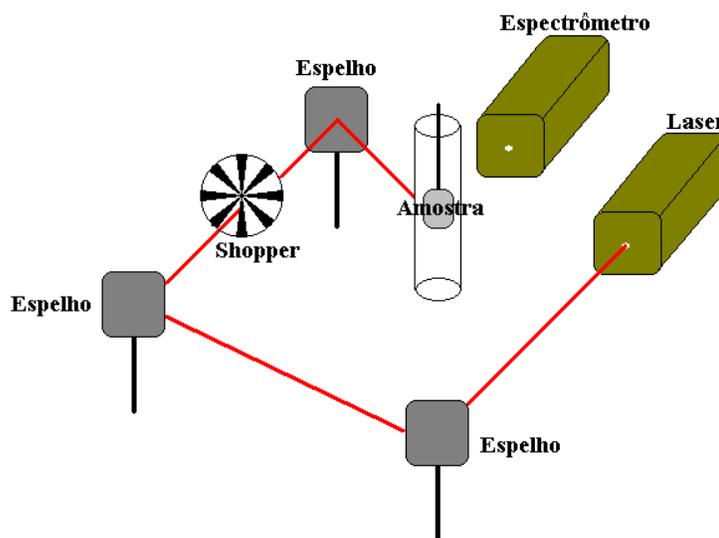
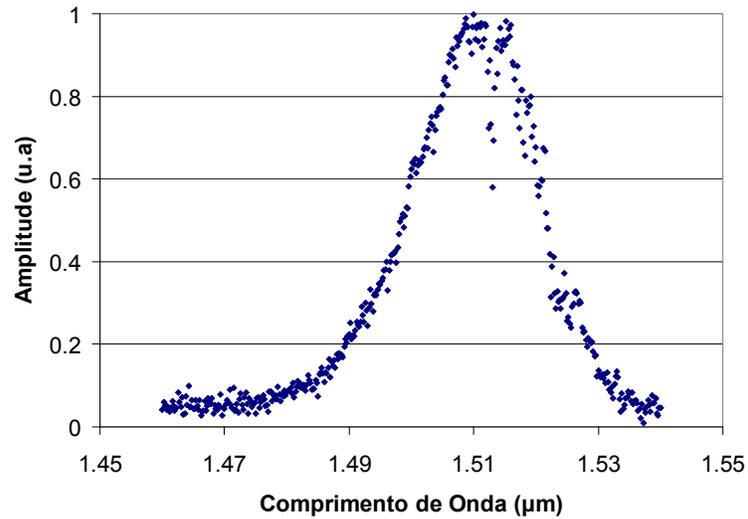


Figura 6.10 - Diagrama esquemático da medida de fotoluminescência.

O feixe de laser é conduzido por um jogo de espelhos de forma que atravesse um modulador de luz (*shopper*); após modulado, o feixe incide sobre a superfície da amostra. A luminescência é captada por um espectrômetro. Através de uma grade de difração, é possível selecionar o comprimento de onda que se deseja medir. Um detector (Ge) é utilizado para a conversão da luminescência em corrente elétrica; o sinal é então conduzido a um pré-amplificador (*lock-in*)

cuja função, além de amplificar o sinal recebido, é selecionar apenas o sinal modulado na mesma frequência do *shopper*. O gráfico da figura 6.11 nos mostra a fotoluminescência de uma amostra que consiste de uma camada de InGaAs crescida durante 01 hora ( $\sim 0.8\mu\text{m}$ ) sobre substrato de InP dopado tipo n:



**Figura 6.11** - Espectro de fotoluminescência. Medida normalizada realizada a 77K. Laser de Ar ( $\lambda=533$  nm). Amostra CBE 2239

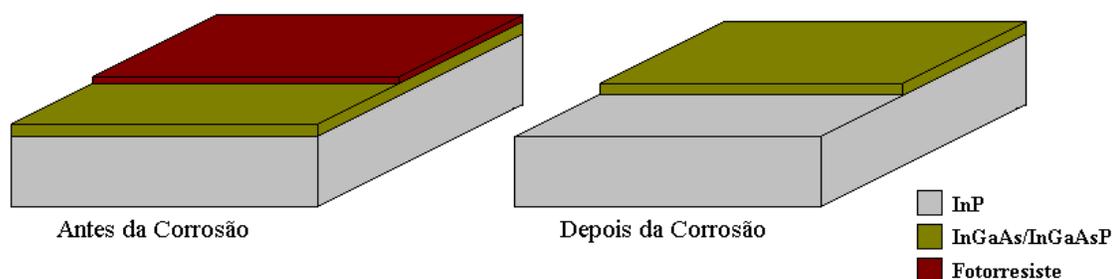
O pico da emissão característica desta fotoluminescência é a própria energia de *bandgap* do InGaAs ( $Q=1.511\mu\text{m}$ ). A largura de linha a meia altura (FWHM - *Full-Width Half-Maximum*) é igual a 13meV. Entretanto, a medida foi realizada a 77K; a medida correspondente à temperatura ambiente é dada pela seguinte expressão:

$$E_{pico(T_f)} = E_{pico(T_i)} - \alpha(T_f - T_i) \quad (6.6)$$

Onde  $T_i$  é a temperatura na qual a medida foi realizada (77K),  $T_f$  é a temperatura na qual desejamos verificar a medida correspondente (300K) e  $\alpha = 3.25 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$  [Lee *et al*, 2000], [Varshni, 1967]. De acordo com a equação 6.6, a energia correspondente à temperatura ambiente é  $Q=1.663 \mu\text{m}$ , valor próximo àquele calculado para a energia de *bandgap* do InGaAs no **capítulo 1** ( $Q=1.694\mu\text{m}$ ). A fotoluminescência da amostra CBE 2118 apontou pico de emissão cuja energia é  $Q=1.274 \mu\text{m}$  que corresponde, à temperatura ambiente, a  $Q=1.414 \mu\text{m}$ , valor que adotamos para a energia de *bandgap* do InGaAsP no **capítulo 1**.

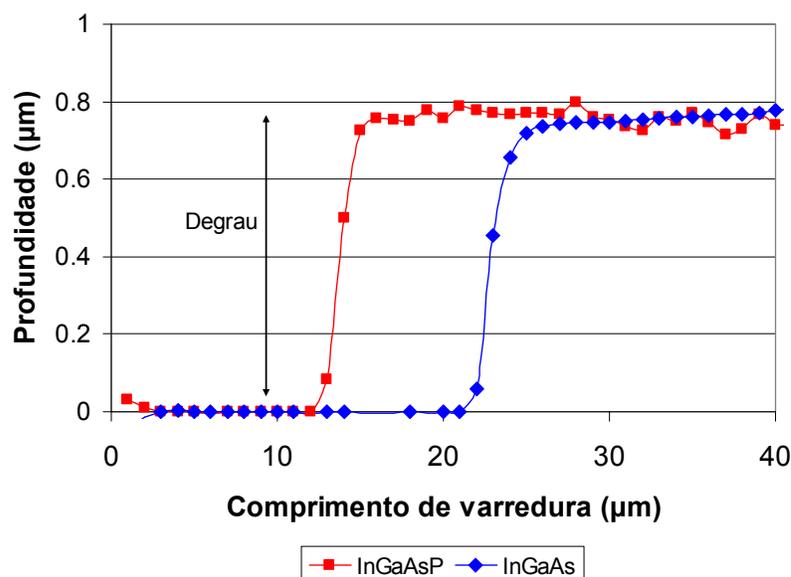
### 6.3.5 Perfilometria

Este método é utilizado para mensurar a espessura das camadas crescidas. Aplicamos fotorresiste sobre parte da superfície da amostra. Em seguida, aquecemos a mesma a uma temperatura de 118 °C para fixar a camada de fotorresiste. O método consiste na corrosão da parte da superfície não protegida pelo fotorresiste através de uma solução seletiva que ataca somente compostos com As; o processo corrosivo cessa quando se atinge o substrato de InP. Removemos a camada de fotorresiste com acetona e analisamos o degrau que se formou na superfície, que corresponde à espessura da camada crescida, conforme mostra a figura 6.12:



**Figura 6.12** – Representação do aspecto de uma amostra antes e depois da corrosão. Fotorresiste 5214. Solução seletiva: 40 partes de H<sub>2</sub>O destilada, 8 partes de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> e 1 parte de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>

O gráfico da figura 6.13 nos mostra as espessuras de camadas de InGaAs e InGaAsP:

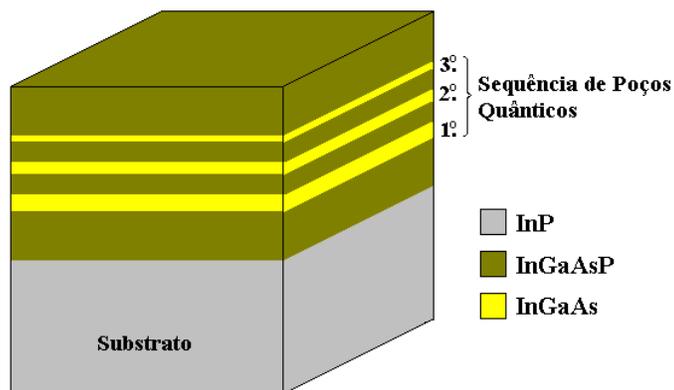


**Figura 6.13** - Medidas de Perfilometria (DekTak) - Profundidade do degrau formado na superfície x comprimento de varredura. Amostras CBE 2239 e CBE 2240

Ambas as amostras mencionadas na figura 6.13 foram crescidas durante 01 hora sobre substrato de InP dopado tipo n. Através do valor da espessura da camada crescida e do tempo de crescimento podemos estimar a taxa de crescimento. Em ambos os casos, a taxa é de  $0.8 \mu\text{m/h}$ . Entretanto, salientamos que a taxa usual de crescimento de ternários e quaternários é de  $1 \mu\text{m/h}$ . De fato, o raio-X da amostra CBE 2239 revelou que existe descasamento de parâmetro de rede, provável causa da redução da taxa de crescimento.

## 6.4 Desenvolvimento de Poços Quânticos

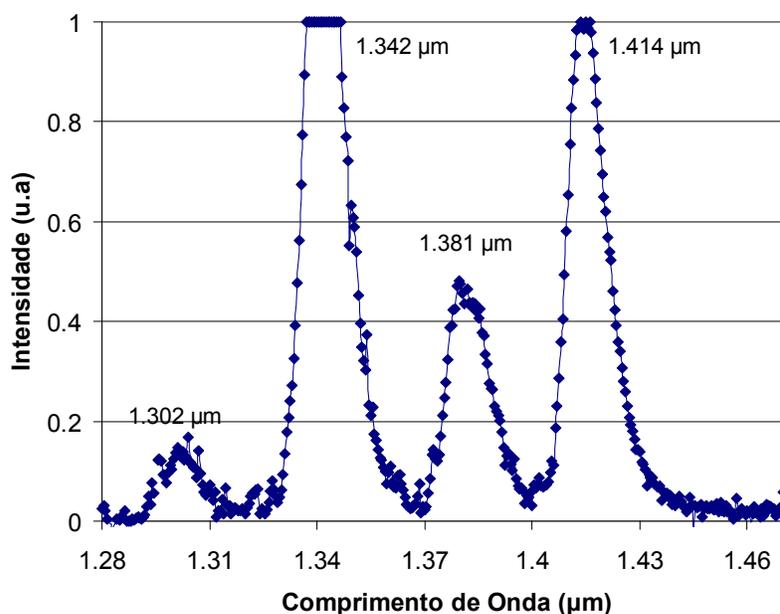
Nosso objetivo neste desenvolvimento é obter poços com boa emissão de fotoluminescência, razoável largura de linha, além de obtermos uma calibração da emissão com o tempo de crescimento, essencial para o dimensionamento de um laser de poços quânticos. O processo consistiu, inicialmente, no crescimento de três camadas ultrafinas de InGaAs de espessuras distintas; através da fotoluminescência destas estruturas, é possível verificar a emissão de cada poço. Quando analisamos uma seqüência de poços quânticos distintos, os mesmos devem ser crescidos em ordem decrescente de espessura, conforme ilustra a figura 6.14, para que os poços subsequentemente mais próximos à superfície sejam transparentes à emissão dos poços mais profundos.



**Figura 6.14** - Representação de camadas de InGaAs crescidas com espessuras distintas para fotoluminescência.

A luminescência característica do 1.º poço (mais espesso), cuja energia de transição é a menor dentre os três poços, é capaz de atravessá-los sem ser absorvida; caso contrário, se os fótons emitidos pelo 1.º poço tivessem energia maior que as energias de transição do 2.º ou 3.º

poços, seriam absorvidos por estes, não sendo possível sua detecção. O gráfico da figura 6.15 nos mostra a fotoluminescência de uma seqüência de poços quânticos de InGaAs:

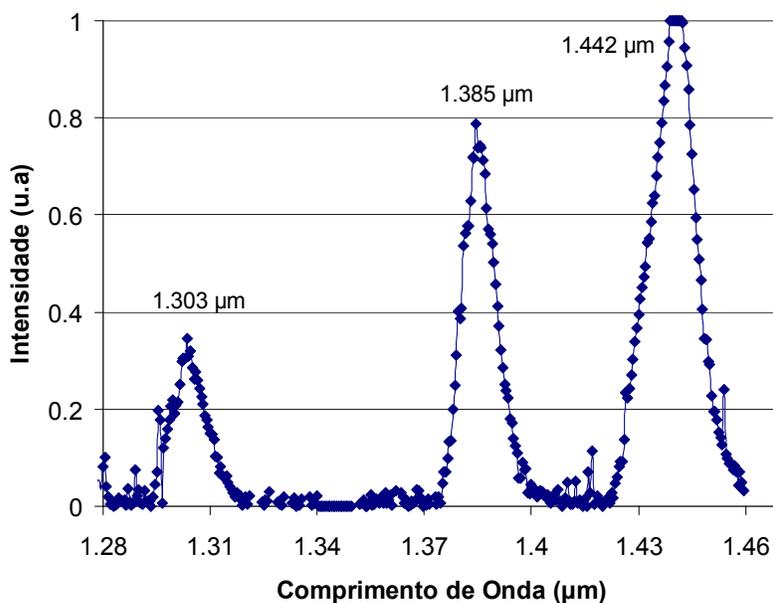


**Figura 6.15** – Espectro de fotoluminescência. Medida normalizada realizada a 4K pelo Grupo de Propriedades Ópticas (GPO/IFGW). Laser de Ar ( $\lambda=533$  nm). Amostra CBE 2197

A amostra mencionada na figura 6.15 consiste de uma seqüência de 3 poços quânticos de InGaAs intercalados por barreiras de InGaAsP: o 1.º poço foi crescido durante 33s; o 2.º poço foi crescido durante 22s e o 3.º poço foi crescido durante 11s. As camadas de InGaAsP que intercalam os poços foram crescidas durante 06 minutos. A última camada de InGaAsP foi crescida durante 10 minutos. O feixe externo do laser de Ar ( $\lambda = 533nm$ ), cuja potência utilizada é da ordem de 300mW, incide sobre a superfície da última camada crescida (InGaAsP), de forma que excita os poços quânticos da amostra através da geração de pares elétron-lacuna. A recombinação dos pares privilegia, de acordo com as curvas de ganho espectral de poço quântico, a emissão de luz no comprimento de onda relativo às transições de energia do poço. Note o pico de emissão da camada de InGaAsP (1.302  $\mu m$  que equivale, a temperatura ambiente, a 1.441  $\mu m$ ) e os picos dos poços (1.342, 1.381 e 1.414  $\mu m$  que equivalem, à temperatura ambiente, respectivamente a 1.498, 1.547 e 1.589  $\mu m$ ). A largura de linha (FWHM) dos picos dos poços é igual ou inferior a 12 meV.

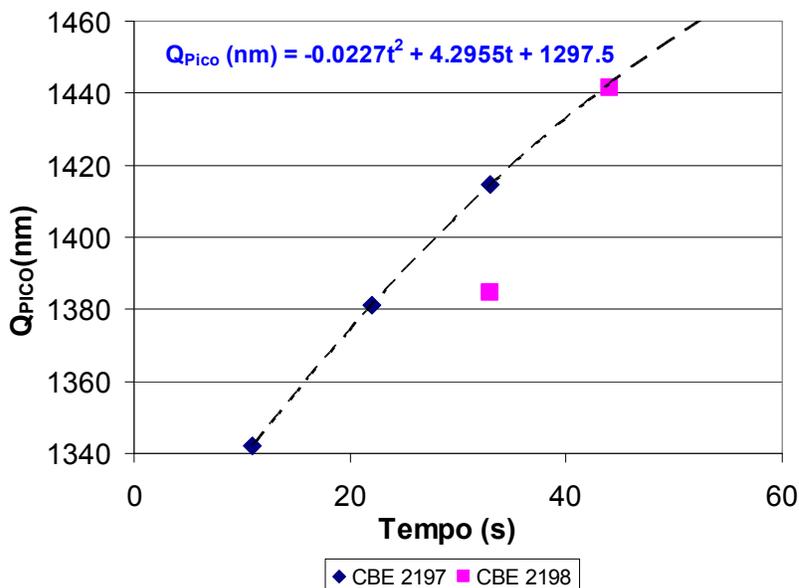
Desenvolvemos outra seqüência de poços quânticos de forma análoga ao que foi descrito; variamos o tempo de crescimento das camadas de InGaAs de modo a obtermos espessuras

diferenciadas dos poços, e assim, novos pontos de calibração. A fotoluminescência desta nova seqüência é mostrada na figura 6.16:



**Figura 6.16** - Espectro de fotoluminescência. Medida normalizada realizada a 4K (GPO/IFGW). Laser de Ar ( $\lambda=533$  nm). Amostra CBE 2198

A amostra mencionada na figura 6.16 consiste de três poços (55s, 44s e 33s) crescidos respectivamente nesta seqüência. Note que o tempo de crescimento das camadas de ambas as amostras (CBE 2197 e CBE 2198) são valores múltiplos. Novamente observamos o pico de emissão da camada de InGaAsP (1.303  $\mu\text{m}$ ). Os picos dos poços (1.385 e 1.442  $\mu\text{m}$ ) equivalem, a temperatura ambiente, respectivamente a 1.552 e 1.624  $\mu\text{m}$ . A emissão do poço mais espesso (55s) não foi observada nesta amostra. A largura de linha (FWHM) dos picos dos poços é igual ou inferior a 9 meV. A dependência, em ambas as amostras, dos picos de fotoluminescência dos poços (4K) com seus respectivos tempos de crescimento é mostrada na figura 6.17:



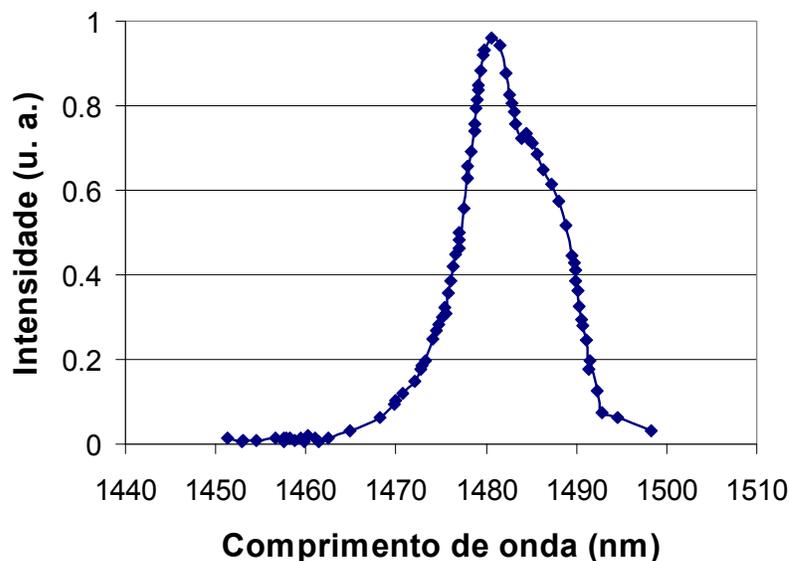
**Figura 6.17** – Picos de emissão da fotoluminescência (4K) de poços quânticos de InGaAs x tempo de crescimento da camada. Amostras CBE 2197 e CBE 2198

A seqüência dos picos da amostra CBE 2197 mostra-se coerente com resultados experimentais correlatos. Ajustamos um polinômio de segundo grau conforme nos mostra o gráfico da figura 6.17. Devido a alguns problemas ocorridos durante o crescimento da amostra CBE 2198, parece-nos correto supor que o pico de emissão do poço de 55s não é observado na fotoluminescência; o pico de emissão do poço de 33s (1.385  $\mu\text{m}$ ) desta mesma amostra não se ajustou à curva proposta. Para verificarmos o ajuste proposto (polinômio de segundo grau), crescemos uma amostra que consiste de uma seqüência de 6 poços quânticos de InGaAs de mesma espessura (40s de crescimento), conforme descreve a tabela 6.1:

**TABELA 6.1.** Diagrama de crescimento de camadas para um seqüência de 6 poços quânticos de InGaAs.

Camada	Material	Espessura Estimada (Å)	Repetições	Tempo de Crescimento (minutos)
4	InGaAsP	400	6	2,4
3	<b>InGaAs</b>	50	6	0,6
2	InGaAsP	500	1	3
1	InP ( <i>buffer</i> )	1600	1	10
0	InP substrato	-	-	-

Esta estrutura, como veremos no **capítulo 7**, corresponde à região ativa do laser de 6 poços quânticos baseado no sistema InGaAs/InGaAsP. A figura 6.18 mostra o espectro de fotoluminescência a 77K para esta amostra:



**Figura 6.18** - Espectro de fotoluminescência. Medida normalizada realizada a 77K. Laser de Ar ( $\lambda=533$  nm). Amostra CBE 2212

Obtivemos altíssima intensidade na emissão em 1480 nm com largura de linha (FWHM) de aproximadamente 7 meV. Considerando a emissão coletiva de 6 poços, este resultado demonstra a qualidade epitaxial da amostra. Observamos também um pequeno ombro à direita do pico que acreditamos poder atribuir ao acúmulo de tensão por descasamento de parâmetro de rede no crescimento. Esta tensão pode ser também responsável pela observada deterioração do padrão de difração “*in situ*” de elétrons rasantes (RHEED) durante o crescimento dos dois últimos poços. O aparecimento de padrão de pontos no RHEED mostrou certa tridimensionalidade no crescimento, o que torna a largura dos poços menos definida. De acordo com a curva polinomial da figura 6.17, o tempo de crescimento de 40s corresponde ao pico de 1433 nm. Entretanto, este valor corresponde ao pico medido a 4K; a medida correspondente à temperatura de 77K, de acordo com a equação 6.6, é igual a 1473 nm, valor muito próximo à emissão em 1480 nm obtido no gráfico da figura 6.18.

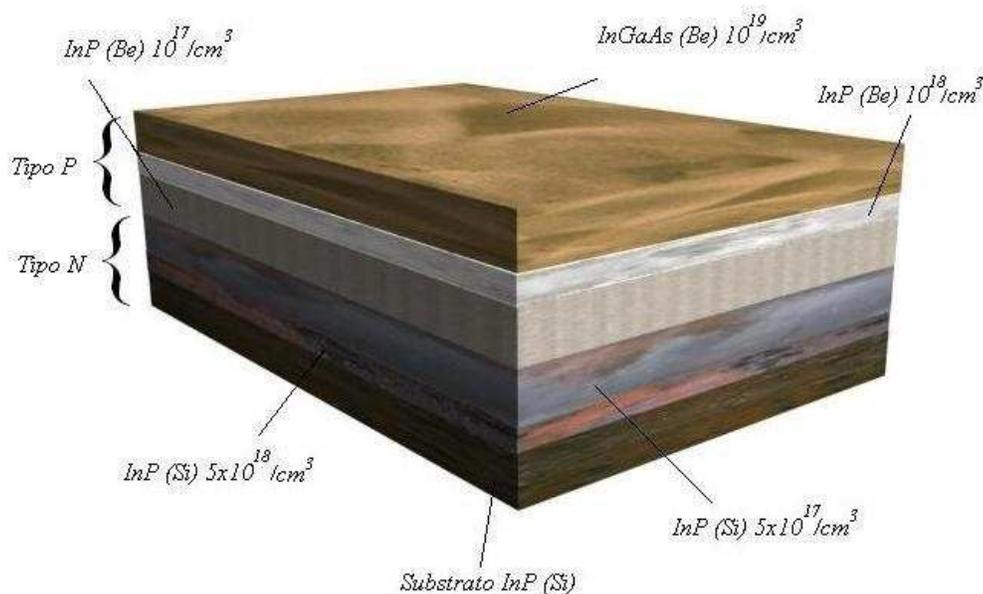
## 6.5 Dopagem e Fabricação de um Diodo de InP

O objetivo deste desenvolvimento é verificar a qualidade de uma junção p-n. A estrutura da amostra crescida para esta finalidade é descrita na tabela 6.2:

**TABELA 6.2.** Diagrama de crescimento de camadas para um diodo de InP. Amostra CBE 2260

Camada	Material	Espessura (Å)	Dopagem		Repetições	Tbe	Tsi	Tempo de Crescimento minutos
			P	N		°C	°C	
5	InGaAs	3000	5,00E+19	-	1	830	-	20
4	InP	1600	5,00E+18	-	1	830	-	10
3	InP	3200	5,00E+17	-	1	800	-	20
2	InP	3200	-	5,00E+17	1	-	1075	20
1	InP	1600	-	5,00E+18	1	-	1200	10
0	InP substrato	-	-	-	-	-	-	-

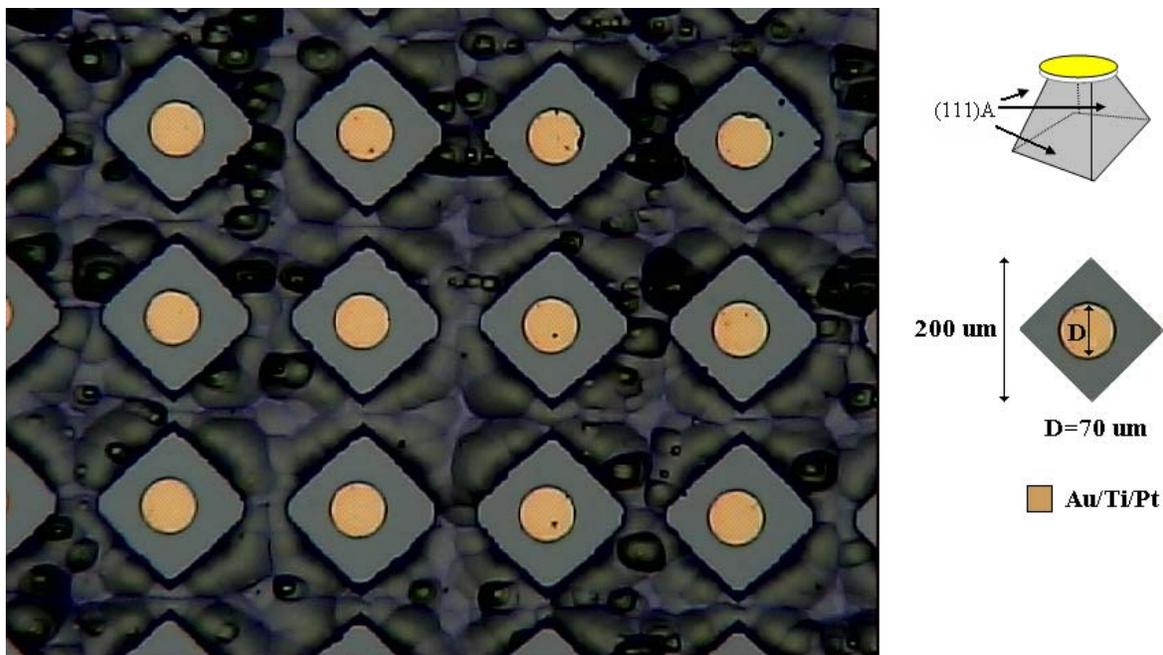
Os valores de dopagens são estimativas da ordem de grandeza que esperamos para cada uma das camadas descritas. A figura 6.19 ilustra a estrutura descrita pela tabela 6.3:



**Figura 6.19** - Representação das camadas de um diodo de InP.

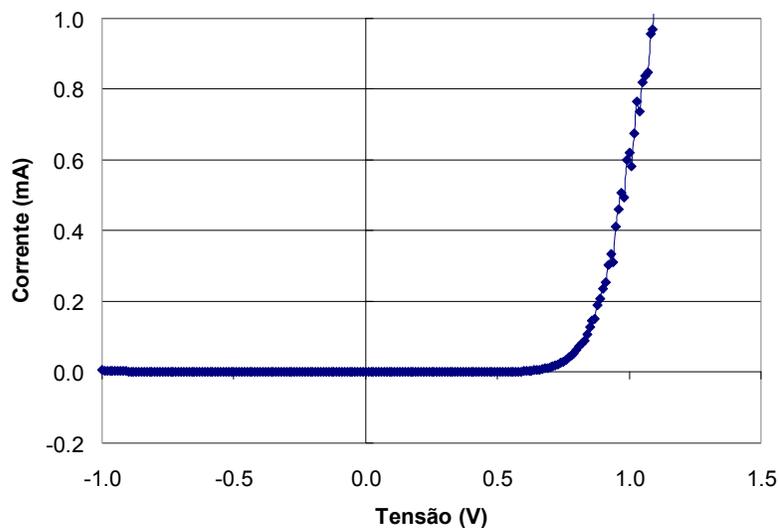
Essencialmente, esta estrutura trata-se de um diodo de InP com gradiente de dopagem com contato ôhmico de p<sup>++</sup> InGaAs, tudo crescido sobre substrato de InP tipo n.

Submetemos esta estrutura ao processamento (vide **capítulo 7**), etapa que a converte em dispositivos (diodos), conforme mostra a imagem microscópica da figura 6.20:



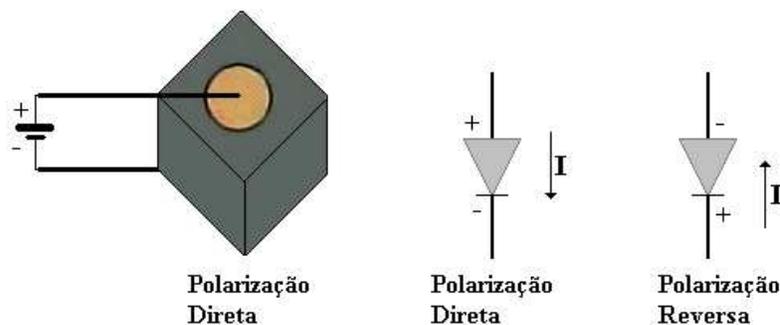
**Figura 6.20** - Imagem por fotomicroscopia óptica após processamento. Cada losango equivale a um diodo. Densidade aproximada de 16 diodos/mm<sup>2</sup>. Amostra CBE 2260

A figura 6.20 nos mostra o aspecto da amostra processada. O processamento consistiu em corroer as camadas p de InGaAs e InP de tal forma a isolarmos os dispositivos. A máscara litográfica para a corrosão é circular correspondente ao círculo amarelo da deposição de uma liga metálica (Au/Ti/Pt) por evaporação, responsável pelo contato metálico do diodo na camada de p<sup>++</sup> InGaAs. Observamos a formação de losangos sob cada círculo. O desenho inserido na figura 6.20 nos ajuda a compreender a formação dos losangos oriunda da corrosão profunda de InP que tende a parar nos planos (111)A formando uma estrutura piramidal com base de losango cuja projeção é vista na foto. Existem aproximadamente 16 diodos/mm<sup>2</sup>. Estamos interessados na caracterização do diodo enquanto dispositivo. A amostra processada é acomodada sobre uma mesa metálica que está aterrada. Aplicamos, através de uma ponteira metálica, uma diferença de potencial entre a parte metalizada do diodo e a mesa, enquanto a corrente que atravessa o dispositivo é medida. O resultado desta medida, que denominamos curva  $I \times V$ , é mostrada no gráfico da figura 6.21:



**Figura 6.21** - Curva I x V – Medida sem luz (HP4549). Amostra 2260

A curva apresenta o comportamento típico de um diodo. Conforme mostra a figura 6.22, quando a polarização é direta, o diodo passa a conduzir se a diferença de potencial é superior a tensão da depleção da junção ( $\sim 0.8V$ ); quando aplicamos uma diferença de potencial reversa, o diodo não conduz. A tensão de ruptura do diodo ocorre quando aplicamos uma diferença de potencial superior a 18V (polarização reversa).

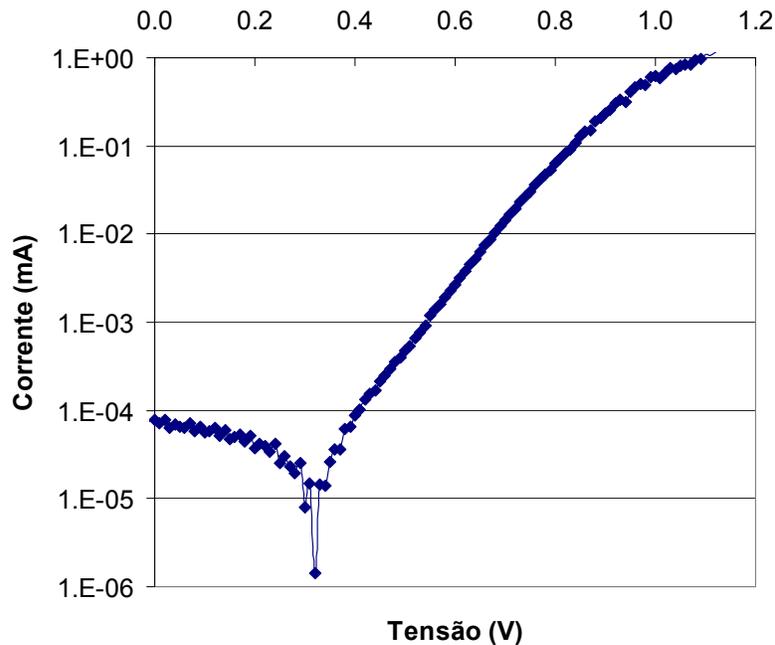


**Figura 6.22** - Representação das polarizações de um diodo.

O estudo detalhado do diodo nos conduz ao modelo em que consideramos a resistência interna do diodo. Considere o diodo real como uma associação em paralelo de uma resistência interna  $R_s$  e um diodo ideal. A corrente conduzida pelo diodo real pode ser representada da seguinte forma:

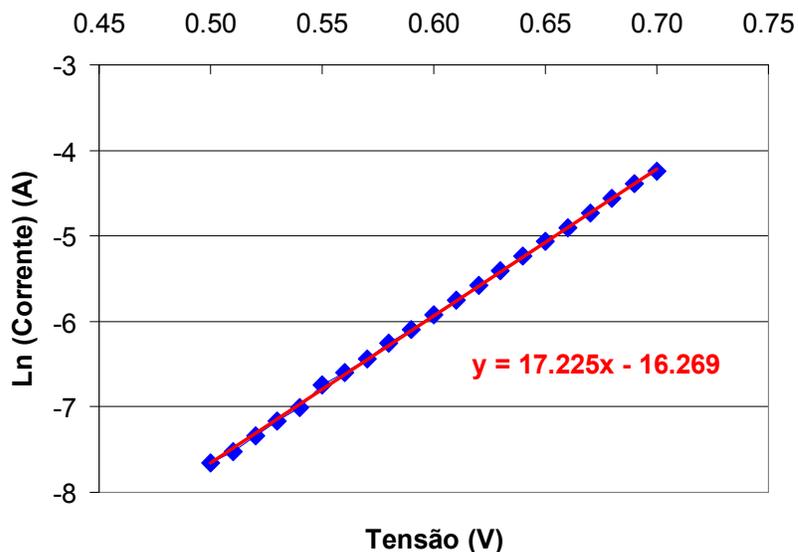
$$I = I_0 \left( e^{\left( \frac{qV}{\eta kT} \right)} - 1 \right) \quad (6.7)$$

Onde  $q$  é a carga do elétron,  $V$  é a tensão aplicada,  $k$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura (300K) e  $\eta$  é o fator idealidade.  $I_0$  é a corrente conduzida pelo diodo real devido à presença desta resistência interna, em nosso modelo suposta paralela ao diodo ideal. O diodo ideal possui fator de idealidade  $\eta = 1$ . No entanto, quando existe recombinação na região de depleção, este fator tende a  $\eta = 2$ . Nosso interesse consiste em determinarmos o fator de idealidade do diodo real. Aplicamos a escala logarítmica (base decimal) para o módulo da corrente do gráfico da figura 6.21 e obtivemos a seguinte curva:



**Figura 6.23** - Curva I x V - Escala logarítmica (base decimal). Apenas valores positivos de tensão foram considerados.

O gráfico da figura 6.23 torna possível a análise da equação 6.7 no regime de condução do diodo (polarização direta); esta curva também nos fornece uma estimativa da corrente reversa ( $\sim 10^{-4}$  mA). Lembremos que a equação 6.7 é uma proposição que assumimos; para isto é necessário observarmos que, no intervalo de 0.4 a 1.0 V, a curva assume caráter linear. Desta forma restringimos nossa análise apenas para o intervalo de 0.5 a 0.7 V, porém na escala logarítmica na base natural e obtivemos a curva mostrada no gráfico da figura 6.24:



**Figura 6.24** - Curva I x V - Valores de corrente em escala logarítmica (base natural)

O gráfico da figura 6.24 nos fornece o comportamento linear da curva I x V mediante o logaritmo neperiano aplicado aos valores de corrente. As constantes linear e angular da reta foram obtidas. Através destas constantes, obtivemos o valor da resistência em paralelo e do fator de idealidade. Considere apenas valores positivos de tensão na equação 6.7; portanto, descartamos a subtração da unidade. Ao aplicamos o logaritmo neperiano nesta equação obtemos:

$$\ln(I) = \ln(I_0) + \left( \frac{q}{\eta k T} \right) V \quad (6.8)$$

A equação 6.8 descreve a equação de uma reta cujos valores das constantes foram obtidos experimentalmente. A comparação nos leva ao seguinte resultado:

$$\frac{q}{\eta k T} = 17.225 \quad \text{onde} \quad \frac{q}{k T} = 38.65 \Rightarrow \eta = 2.24 \quad (6.9)$$

O fator de idealidade, próximo de 2, nos revela que parte da corrente está sendo dissipada na forma de geração de luz. Quanto mais próximo do ideal ( $\eta = 1$ ), maior é a corrente de difusão; Quanto mais distante do ideal, maior é a corrente de recombinação. Indiretamente, este resultado nos parece bom, pois o fato de termos recombinação implica na alta qualidade das camadas crescidas que de outra forma deveriam ter muito maiores contribuições de recombinação de portadores com defeitos. A constante linear pode ser interpretada da seguinte maneira:

$$\ln(I_0) = -16.296 \Rightarrow I_0 \approx 10^{-7} \text{ A} \quad (6.10)$$

Parece correto supor que, para tensões que variam de 0.5 a 0.7 V, a corrente de fuga é da ordem de décimos de micro ampère. O valor da resistência, suposta paralela em nosso modelo, neste caso é da ordem de megaohms. É de se esperar que a corrente inicial  $I_0$  varie com o valor da tensão aplicada sobre o diodo. Entretanto, para um diodo que opera com tensões que variam de -10V a 1V, a variação da corrente  $I_0$  se mostra insignificante, permitindo que se atribua um valor constante. O valor encontrado na equação 6.10 concorda com o valor estimado para a corrente reversa no gráfico da figura 6.23.

A estrutura mostrada na figura 6.19 pode ser dividida em duas partes: junção tipo p e junção tipo n. Estas duas partes constituem as **camadas confinantes** descritas ao longo de nosso trabalho. Imagine que possamos separá-las e, entre ambas, inserimos uma seqüência de poços quântico como, por exemplo, a estrutura descrita pela tabela 6.1. Esta justaposição das camadas confinantes envolvendo uma **região ativa** contendo poços quânticos resulta no **laser de poços quânticos**, tema do próximo capítulo.

## Capítulo 7

---

### Caracterização de Laser de Poços Quânticos

---

#### 7.1 Introdução

No capítulo 6 fabricamos e caracterizamos as partes constituintes de um laser de poços quânticos. Neste capítulo realizamos a justaposição destas partes. Descrevemos, na **seção 7.2**, o dimensionamento da estrutura de um laser - 6 poços quânticos de InGaAs - cujo crescimento (**seção 6.2**) e processamento (**seção 7.3**) foram realizados em nossos Laboratórios de Pesquisa em Dispositivos (LPD/DFA). A caracterização preliminar do dispositivo fabricado a partir de nossos recursos apontou o não-funcionamento do mesmo. A partir de uma amostra doada (estrutura laser de 6 poços quânticos de InGaAsP tensionado), processamos e caracterizamos, na **seção 7.4**, os dispositivos obtidos desta amostra. Na **seção 7.5**, os resultados experimentais obtidos pela caracterização são confrontados com os resultados correlatos obtidos nas simulações teóricas apresentadas nos **capítulos 4 e 5**. O modelo teórico proposto é verificado a partir deste confronto; desta forma foi possível propor ajustes no modelo, visando maior coerência entre a teoria e a prática.

## 7.2 Dimensionamento de um Laser de Poços Quânticos

A caracterização de amostras, o desenvolvimento de poços quânticos e a fabricação de um diodo de InP nos conduziram ao dimensionamento de um laser de poços quânticos, conforme descreve a tabela 7.1:

**TABELA 7.1.** Dimensionamento de um laser de 6 poços quânticos discriminado na forma de roteiro de crescimento por Epitaxia de Feixe Químico (CBE)

Camada	Material	Espessura Estimada (Å)	Dopagem		Repetições	T(Be) °C	T(Si) °C	Tempo de Crescimento minutos
			P	N				
10	InGaAs	1000	1.0E+19	-	1	830	-	6
9	InGaAs	1000	5.0E+18	-	1	827	-	6
8	InP	2000	5.0E+18	-	1	827	-	12
7	InP	15000	5.0E+17	-	1	814	-	90
6	InGaAsP (Q1.4)	100	-	-	1	-	-	0.6
5	InGaAsP (Q1.4)	400	-	-	6	-	-	2.4
4	InGaAs	50	-	-	6	-	-	0.6
3	InGaAsP (Q1.4)	500	-	-	1	-	-	3
2	InP	15000	-	5.0E+17	1	-	1133	90
1	InP	2000	-	5.0E+18	1	-	1187	12
0	InP (substrato)	-	-	1.0E+19	-	-	-	-
Região Ativa	3300	-	-	-	-	-	-	19.80
Total	39300	-	-	-	-	-	-	235.8

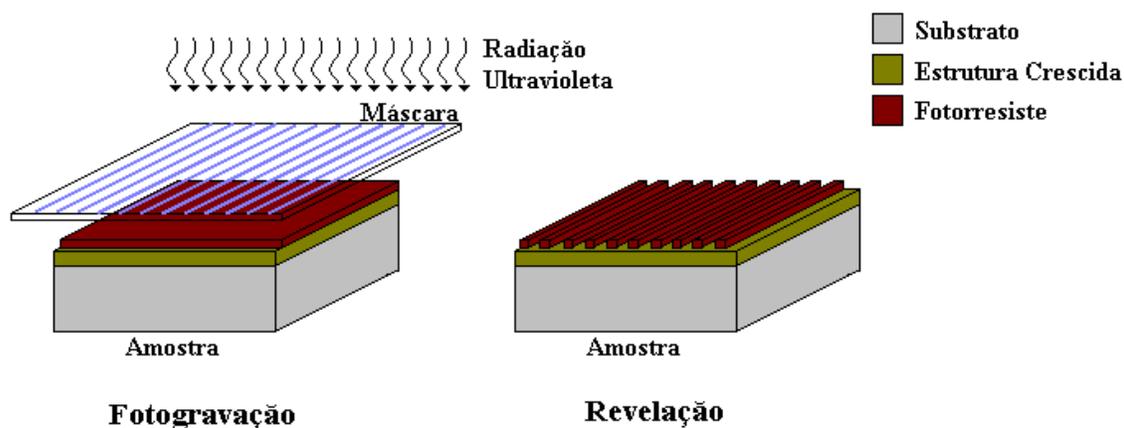
A tabela acima descreve o dimensionamento de um laser de 6 poços quânticos de InGaAs (50Å de espessura), cujo tempo de crescimento corresponde a 40 segundos. Esta estrutura de laser multiplica por seis o valor do ganho obtido por um único poço quântico. Entretanto, o volume a ser bombeado eletronicamente também será seis vezes maior. A espessura das barreiras de InGaAsP (400Å) devem ser suficientes para que não haja tunelamento de portadores entre os poços. A região ativa dispõe, ao todo, de 3300Å de espessura, como proposto no **capítulo 5**. Salientamos que as dopagens seguem um padrão de gradiente diminutivo em direção à região ativa: as camadas de InP adjacentes à região ativa possuem dopagem menor ( $5 \times 10^{17}$ ), para minimizar a difusão de dopantes (principalmente Be) para a região ativa. A última camada de InGaAs também é crescida com um gradiente de dopagem: a camada mais externa é a mais dopada ( $10^{19}$ ) para facilitar o contato ôhmico com a metalização posterior de sua superfície externa.

## 7.3 Processamento de Laser

O objetivo do processamento de amostras crescidas com a estrutura de diodo ou de laser é transformá-las em seus respectivos dispositivos, que funcionam através de injeção de corrente; portanto, este é o conjunto de etapas que torna as amostras aptas a serem caracterizadas como dispositivos. O processamento consiste de 6 etapas, descritas a seguir.

### 7.3.1 Fotogração Positiva

Nesta etapa, a amostra, depois de crescida, é submetida a um processo em que se transfere um padrão contido em uma máscara litográfica sobre a superfície desta amostra. Uma camada uniforme de fotorresiste (polímero sensível à radiação ultravioleta) é aplicada sobre a superfície da amostra; na seqüência, a amostra é aquecida a 110°C para fixar o fotorresiste. Na fotoalinhadora, a máscara litográfica transfere o padrão que se deseja gravar sobre a superfície da amostra através da exposição à luz ultravioleta, que sensibiliza o fotorresiste de acordo com o padrão de linhas, conforme ilustra a figura 7.1. Na seqüência, procede-se a revelação: mergulhamos a amostra em uma solução que dissolve o fotorresiste nas regiões expostas à radiação. Novamente, a amostra é aquecida, porém a 118°C, o que confere rigidez ao fotorresiste impresso na forma de linhas.



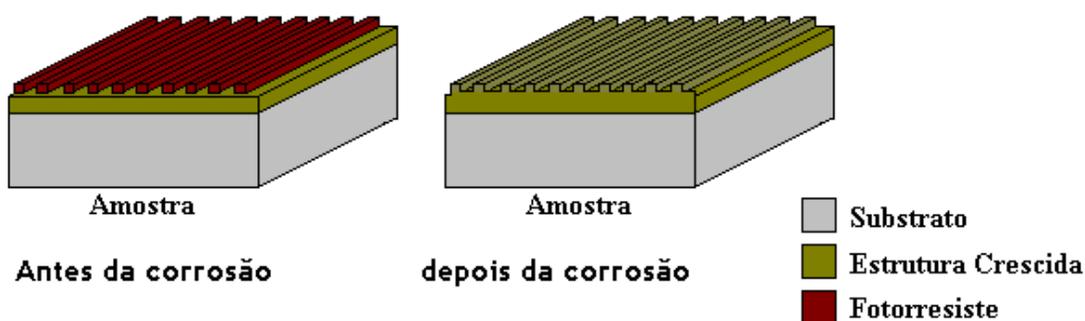
**Figura 7.1** – Representação do processo de fotossensibilização de uma superfície contendo camada de fotorresiste. O padrão da máscara litográfica é transferido para a superfície da amostra, conforme ilustrado ao lado, após a revelação. Fotorresiste 3312. Revelador AZ400

A máscara representada na figura 7.1 é utilizada no processamento do laser cujas linhas, orientadas na direção cristalina do substrato, possuem 7  $\mu\text{m}$  de largura e são espaçadas de 250  $\mu\text{m}$  de distância. No caso do diodo, o padrão da máscara utilizada são círculos de 200  $\mu\text{m}$  de

diâmetro, formando as “mesas” e o contato metálico são círculos de 70  $\mu\text{m}$ . O formato de losangos nas mesas se dá devido ao ataque químico preferencial.

### 7.3.2 Corrosão

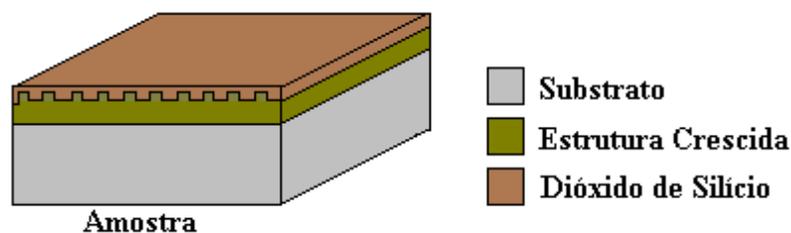
Após o tratamento térmico, a amostra é exposta a duas soluções corrosivas: a primeira solução seletiva ataca somente a última camada crescida (InGaAs); o processo corrosivo cessa quando se atinge a camada subsequente de InP. A segunda solução, também seletiva, é utilizada para corroer apenas a camada de InP, cujo processo cessa quando se atinge a região ativa; na seqüência, o fotorresiste é removidas com acetona, conforme ilustra a figura 7.2:



**Figura 7.2** - Ilustração do processo de corrosão: as linhas de fotorresiste preservam a estrutura crescida, ao passo que as partes expostas da superfície da amostra são corroídas. Ao lado, o aspecto final da superfície após a corrosão. 1ª solução seletiva: 40 partes de H<sub>2</sub>O destilada, 8 partes de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> e 1 parte de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. 2ª solução seletiva: 1 parte de H<sub>2</sub>O destilado e 3 partes de HCl. Taxa de corrosão (2ª solução): ~ 1 $\mu\text{m}$ /minuto

### 7.3.3 Deposição de SiO<sub>2</sub>

A amostra é levada a uma evaporadora por feixe de elétron. Cristais de SiO<sub>2</sub> são colocados no cadinho para serem evaporados por um feixe de elétrons que incidem sobre este. Forma-se, então, um filme fino de SiO<sub>2</sub> sobre a superfície da amostra, conforme mostra a figura 7.3:



**Figura 7.3** - Deposição de SiO<sub>2</sub>.

O objetivo desta etapa é direcionar a injeção de corrente ao longo das linhas que preservam as estruturas crescidas; para isto, é necessário isolar eletricamente as linhas, preenchendo-as de dióxido de Silício. A espessura depositada ( $\sim 3000\text{\AA}$ ) é medida por um cristal oscilador que se encontra dentro da câmara de vácuo ao lado da amostra.

### 7.3.4 Fotogravação Negativa

Os procedimentos são similares à fotogravação positiva. Uma camada de fotorresiste é aplicada sobre a camada de  $\text{SiO}_2$ ; o tratamento térmico do fotorresiste, no entanto, é feito a  $90^\circ\text{C}$ . Uma segunda máscara, cujo padrão (análogo a máscara anterior) contém linhas de  $5\ \mu\text{m}$  de largura, é colocada sobre a amostra de modo que o padrão de linhas de ambas (máscara e amostra) coincidam. Ressaltamos que a camada de  $\text{SiO}_2$  é semi-transparente, o que torna possível o alinhamento descrito. O conjunto é exposto à luz ultravioleta. Devido a propriedades do fotorresiste, o tratamento térmico feito a  $90^\circ\text{C}$  propicia a **inversão** da revelação: as regiões que não foram expostas à radiação são dissolvidas pela solução reveladora, preservando o fotorresiste sobre a superfície cujo padrão é oposto àquele da máscara, conforme mostra a figura 7.4. De modo similar, a amostra é submetida a um ataque corrosivo, cuja solução é à base de ácido fluorídrico, de forma que as partes expostas com  $\text{SiO}_2$  sejam corroídas; o processo cessa quando se atinge a camada de InGaAs. Ao final da corrosão, removemos o fotorresiste com acetona e obtemos o perfil mostrado na figura 7.4:



**Figura 7.4** - Fotogravação negativa. Ao lado, o perfil de camadas após a corrosão das partes expostas de  $\text{SiO}_2$ . Fotorresiste 5212. Revelador MF312

As linhas expostas de InGaAs, cuja largura é  $5\ \mu\text{m}$ , constituem a região de injeção de corrente elétrica. O laser, portanto, é delimitado pela largura fixa de  $5\ \mu\text{m}$ ; no entanto, o comprimento da linha (que é o comprimento da cavidade ressonante) é delimitado pelo processo de clivagem, como veremos adiante.

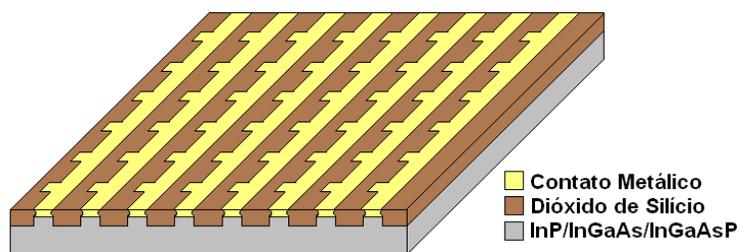
### 7.3.5 Lift-Off

O processo de fotogração positivo é novamente utilizado. Uma terceira máscara, cujo padrão é utilizado na confecção dos *pads* e do contato ôhmico, é transferida para a superfície da amostra, a qual denominaremos, daqui por diante, de “lado p”. Após a revelação, a amostra é levada a uma outra evaporadora por *electron-beam*, no qual o “lado p” é metalizado através da deposição de uma camada de Ti (300Å), uma camada de Pt (1000Å) e, por fim, uma camada de Au (2000Å). Ao removermos a camada de fotorresiste com acetona, a deposição metálica sobre o fotorresiste também é removida, permanecendo apenas a camada metálica que foi depositada sobre o InGaAs e sobre uma fração do dióxido de silício adjacente ao InGaAs. A figura 7.5 mostra o aspecto do perfil antes e depois da remoção do fotorresiste com acetona:



**Figura 7.5** - Representação do processo de metalização do "lado p". Ao lado, perfil de camadas após a remoção do fotorresiste. Fotorresiste 5214. Revelador AZ400

O aspecto da amostra processada pode ser visto na figura 7.6; note a presença de *pads*, que são extensões metalizadas que aumentam a área de contato com a ponteira metálica, através da qual injetamos corrente no dispositivo.



**Figura 7.6** - Ilustração do aspecto da superfície ao final do processamento: note a presença de *pads* que ampliam a área de contato elétrico externo.

### 7.3.6 Desbaste

Esta etapa consiste no desbaste mecânico (que utiliza pó de silício) do lado oposto à superfície da amostra, o qual denominaremos, daqui por diante, de “lado n”. A espessura do substrato, cujo valor inicial é, aproximadamente, 400  $\mu\text{m}$ , é reduzida para 100  $\mu\text{m}$ . O desbaste mostra-se extremamente útil: a espessura reduzida facilita (no processo de clivagem) a obtenção de espelhos de melhor qualidade, indispensável para a realimentação óptica da cavidade linear e também facilita a injeção de portadores no laser. Para critério de comparação, o crescimento da estrutura discriminada na tabela 7.1 totaliza quase 4  $\mu\text{m}$  de espessura, cujo valor é duas ordens de grandeza menor que a espessura inicial do substrato.

### 7.3.7 Metalização do substrato

Da mesma forma que metalizamos o “lado p”, é necessário metalizar o lado desbastado (lado n). Utilizamos o mesmo processo de evaporação por *electron-beam* para a deposição da liga metálica de Ni/Ge/Au/Ni/Au, cujas espessuras (nesta ordem) são 200Å, 500Å, 1000Å, 200Å e 1000Å, respectivamente,

### 7.3.8 Alloy

Consiste no tratamento térmico dado a amostra depois de processada. A amostra é levada a um forno RTP (*Rapid Thermal Annealing*) aquecido a 420°C durante 20 segundos para a formação do contato ôhmico do “lado n”.

### 7.3.9 Clivagem

A clivagem também é um processo mecânico. A amostra processada pode ser dividida em centenas de dispositivos, na forma de pequenas barras; cada barra pode conter até dezenas de lasers, conforme mostra a figura 7.7:

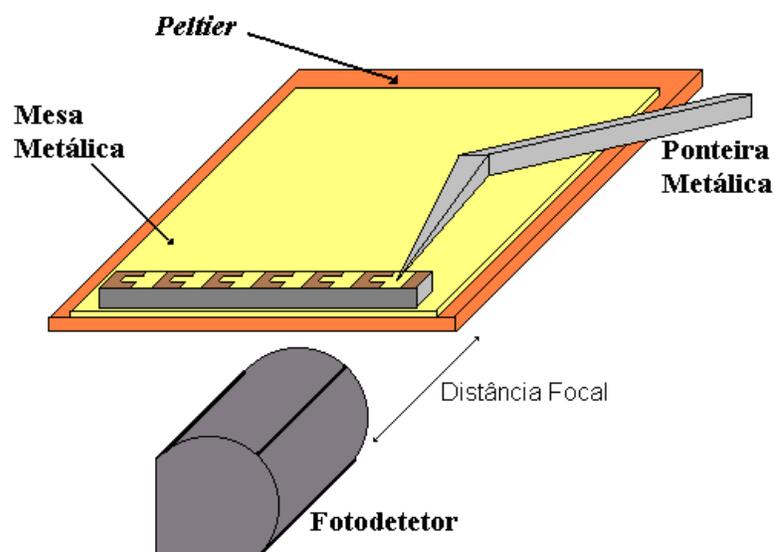


**Figura 7.7** - Ilustração de uma barra resultante do processo de clivagem da amostra processada: cada barra pode conter até dezenas de lasers. As laterais (como exemplifica a lateral frontal em destaque) constituem espelhos.

Após a clivagem, as laterais de cada barra constituem espelhos que são faces clivadas que proporcionam a realimentação óptica. A barra ilustrada na figura 7.7 contém 8 dispositivos lasers. A largura da barra ( $L$ ) é o comprimento da cavidade ressonante de cada um dos lasers. O processo de clivagem nos permite escolher o valor deste comprimento que nos convém.

#### 7.4 Caracterização de Laser de Poços Quânticos

Foram crescidas duas amostras de acordo com a estrutura discriminada na tabela 7.1, amostras CBE 2206 e CBE 2207. Depois de submetidas ao processamento, estas amostras, agora dispositivos lasers, foram submetidas aos procedimentos que as caracterizam como dispositivos. A eletroluminescência consiste na injeção de uma corrente elétrica (que varia de 0 a 100 mA) e, concomitantemente, na detecção da luz emitida pelo dispositivo através de um fotodetector, conforme mostra a figura 7.8:



**Figura 7.8** – Representação simplificada da montagem para detecção da luz emitida pelo dispositivo laser quando uma corrente elétrica é injetada no mesmo.

O “lado n” do dispositivo laser é colocado sobre a mesa metálica, que se encontra aterrada. Através de uma ponteira, uma corrente elétrica é aplicada no “lado p” do dispositivo. O fotodetector capta a luz emitida pelo dispositivo. A caracterização se dá através de dois métodos: dependência da potência da luz emitida com a corrente injetada e dependência da potência da luz emitida com o comprimento de onda, denominada daqui por diante de curva espectral de potência. Através da curva **potência emitida  $\times$  corrente injetada**, daqui por diante denominada

de curva  $L \times I$ , é possível averiguar, de forma preliminar, se o dispositivo está funcionando ou não. A corrente injetada e a temperatura são parâmetros experimentais que podem ser variados. Em todas as simulações das curvas espectrais de ganho óptico mantivemos a temperatura constante. Em nossas análises experimentais o mesmo se sucede: a temperatura do dispositivo é mantida constante (19°C) através de um *Peltier*. A caracterização preliminar ( $L \times I$ ) dos dispositivos lasers CBE 2206 e CBE 2207 apontou o não-funcionamento de ambos: conforme injetamos corrente nestes dispositivos, a potência da luz emitida manteve-se residual. Em outras palavras, a curva  $L \times I$  não apresentou corrente de limiar. Investigamos a causa do não-funcionamento deste dispositivo: após revisarmos todas as etapas do crescimento e processamento destas amostras, estes dispositivos foram testados quanto ao seu comportamento de corrente por tensão aplicada ao diodo. A figura 7.9 nos mostra as curvas  $I \times V$  dos dispositivos obtidos das amostras CBE 2206 e CBE 2207. Mostramos também, para efeito comparativo, a curva obtida por um dispositivo laser proveniente de uma amostra doada, aqui chamada padrão.

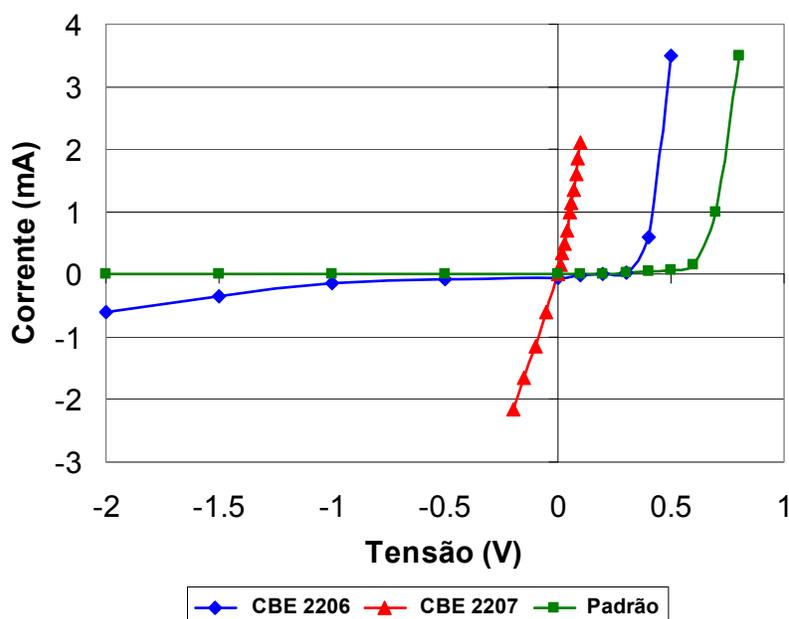
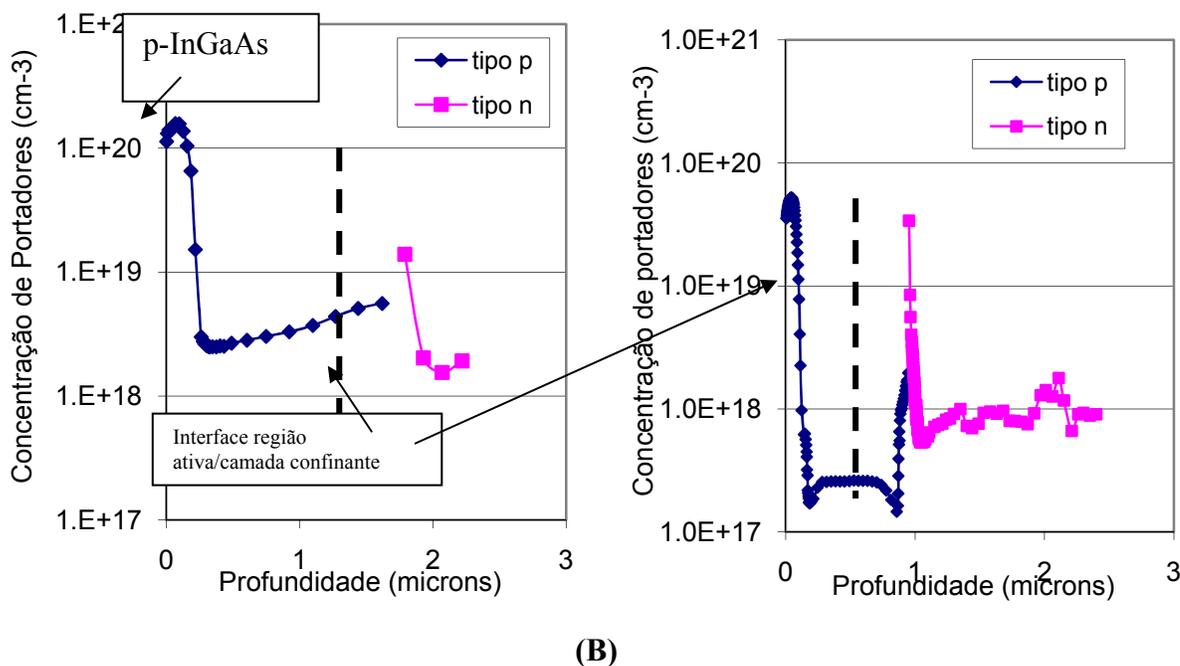


Figura 7.9 - Medidas  $I \times V$ . Amostras CBE 2206, CBE 2207 e Padrão.

Enquanto o diodo padrão apresenta uma curva típica de um bom dispositivo, notamos a alta corrente de fuga nos diodos obtidos com nosso material. Medidas de isolamento elétrico entre dispositivos supostamente isolados numa mesma barra clivada revelou baixíssima resistência indicando problemas na dopagem p, ou seja, um aparente curto entre os dispositivos. Deve-se observar que quase toda a camada dopada p-InP é retirada no processamento e, portanto, esta

baixa resistência parece estar ocorrendo muito próximo à interface com o material quaternário, não dopado. Apesar da calibração de dopagem nas camadas separadas, é importante avaliar a perfilometria de dopagem com o crescimento da estrutura. A figura 7.10 mostra o perfil de dopagem para ambas as amostras medidas no perfilômetro de medida capacitância por tensão ( $C \times V$  eletrolítico).



**Figura 7.10** - Perfil de dopagem obtida por medidas de capacitância X voltagem eletrolítica. (A) Amostra CBE 2207; (B) Amostra CBE 2206.

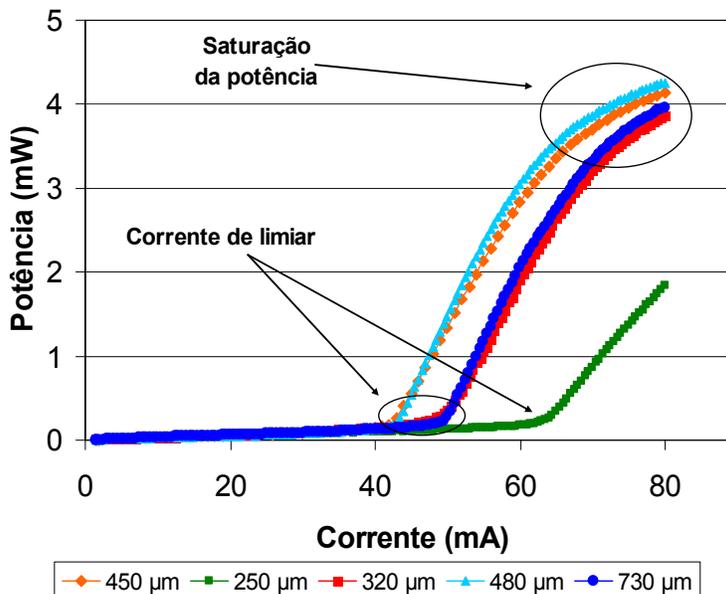
Notamos na amostra CBE 2206 (figura 7.10B) um alto pico de dopante p (berílio) próximo à interface região ativa/camada confinante p-InP. No restante da camada, a dopagem está correta. Na amostra CBE 2207 (figura 7.10A), aparentemente o pico de dopagem na interface foi sanado. No entanto, o nível de dopagem é uma ordem de grandeza maior. Isto explica a falta de isolamento elétrico entre lasers.

Optamos, face ao não-funcionamento dos lasers que fabricamos, pelo processamento e caracterização de uma amostra cuja estrutura laser já estivesse crescida. Utilizamos uma amostra obtida externamente com 6 poços quânticos do sistema InGaAsP/InGaAsP; ou seja, poços e barreiras de InGaAsP tensionadas. Essencialmente, a estrutura é similar à discriminada na tabela 7.1, com a diferença de ter os poços de InGaAsP e não de InGaAs, além de ambos (poço e barreira) serem ligeiramente descasados com o substrato. O parâmetro que mensura esta diferença, denominado *strain*, é dado pela seguinte expressão:

$$\varepsilon = \frac{a_0 - a}{a} \quad (7.1)$$

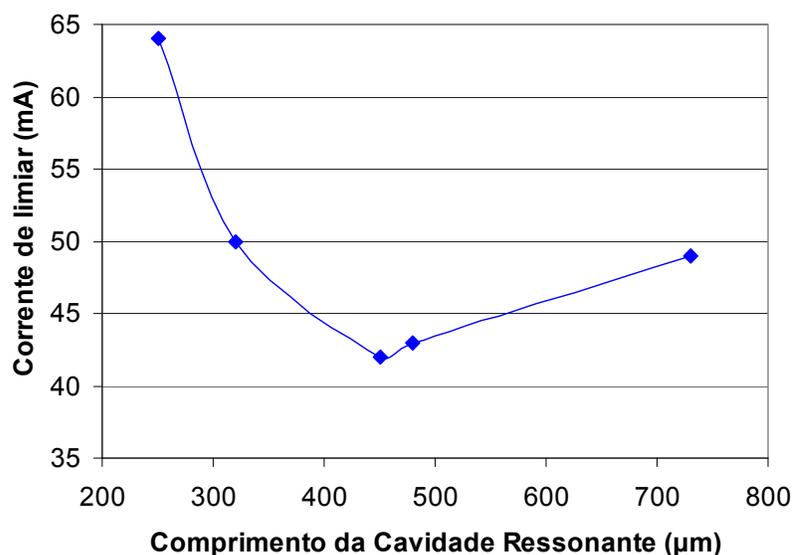
Onde  $a_0$  é o parâmetro de rede do InP (5.8688Å) e  $a$  é o parâmetro de rede do quaternário. Se o valor de  $\varepsilon$  for negativo, significa que há compressão do parâmetro de rede. Se for positivo, significa que há distensão. O tensionamento do parâmetro de rede afeta, entre outras coisas, o valor da profundidade dos poços de energia das bandas de condução e valência. Convém salientar que o nosso modelo de ganho ainda não incorpora os efeitos provenientes do tensionamento do parâmetro de rede; portanto, não há como simular as curvas espectrais de ganho para os poços quânticos tensionados. No entanto, acreditamos que qualitativamente podemos prosseguir na avaliação destas estruturas.

Após o processamento da amostra doada, procedemos a clivagem da amostra processada em barras de diversos comprimentos de cavidade do laser. Através do arranjo representado na figura 7.8, realizamos a eletroluminescência das barras, denominadas daqui por diante de dispositivos lasers. As curvas  $L \times I$  para diferentes comprimentos de cavidade ressonante dos dispositivos são apresentadas no gráfico da figura 7.11:



**Figura 7.11** – Curvas  $L \times I$  para diversos comprimentos de cavidade ressonante (250, 320, 450, 480 e 730  $\mu\text{m}$ ). Medidas obtidas experimentalmente de dispositivos lasers oriundos da amostra padrão processada em nossos laboratórios. Amostra 726D. Temperatura do Peltier mantido a 19°C

As curvas experimentais mostradas no gráfico da figura 7.11 correspondem às curvas correlatas na literatura científica [Agraval *et al*, 1993]. Note que, diferente das curvas  $L \times I$  simuladas teoricamente no gráfico da figura 5.13 (**capítulo 5**), estas curvas experimentais nos mostram que a corrente de limiar não gera mudança abrupta da inclinação da curvas, mas sim de forma suavizada. As curvas  $L \times I$  cujos comprimentos são 450 e 480  $\mu\text{m}$  apresentam correntes de limiar ( $I_{\text{th}}$ ) de 42 e 43 mA, respectivamente, e começam a saturar quando a corrente injetada ultrapassa 60 mA; as curvas  $L \times I$  cujos comprimentos são 320 e 730  $\mu\text{m}$  apresentam  $I_{\text{th}}$  de 49 e 50 mA, respectivamente, e começam a saturar quando a corrente injetada ultrapassa 70 mA. A curva correspondente ao comprimento de 250  $\mu\text{m}$  apresenta  $I_{\text{th}}$  de 64 mA e deve saturar para correntes superiores a 80 mA. Esta saturação está relacionada com a o aquecimento por efeito Joule da estrutura causado pela resistência em série no laser. Investigamos o comportamento da corrente de limiar com o comprimento da cavidade ressonante e obtivemos o gráfico da figura 7.12:

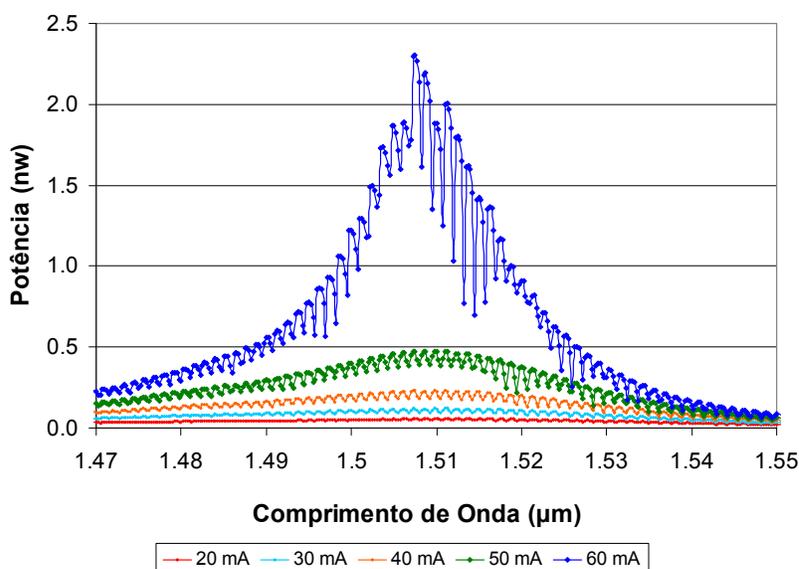


**Figura 7.12** – Curva da corrente de limiar vs comprimento da cavidade ressonante obtida através das curvas experimentais da figura 7.11.

A curva experimental da figura 7.12 nos revela a ocorrência de um valor mínimo da corrente de limiar ( $I_{\text{th, min}}$ ) de 42 mA quando variamos o comprimento da cavidade ressonante; o comprimento da cavidade ressonante, neste mínimo, é igual a 450  $\mu\text{m}$ . Notamos a mesma assimetria da curva constatada nas curvas teóricas similares analisadas no **capítulo 5**. A ordem de

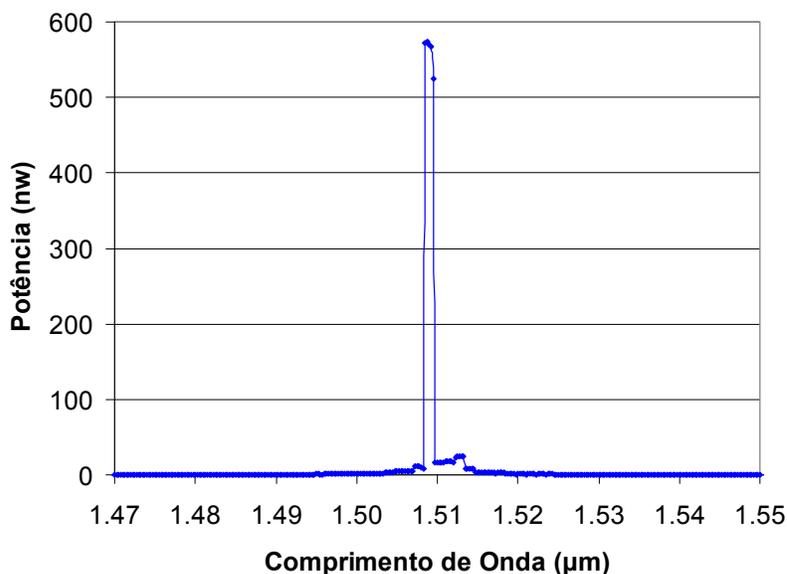
grandeza dos valores obtidos no gráfico da figura 7.12 assim como o confronto destes resultados com a teoria serão discutidos na última seção.

Caracterizamos as curvas espectrais de potência da luz emitida para uma cavidade ressonante de 250  $\mu\text{m}$  de comprimento. A montagem utilizada para a obtenção desta medida é similar ao arranjo da figura 7.8: a luz emitida é captada por uma fibra óptica que a conduz ao analisador de espectro, onde é analisada em função dos diversos comprimentos de onda que a compõe. A corrente injetada é variada até que se alcance o valor de  $I_{th}$ ; as curvas espectrais de potência resultantes desta variação são mostradas nas figuras 7.13 e 7.14:



**Figura 7.13** - Curvas espectrais de potência para diversas correntes injetadas (20, 30, 40, 50 e 60 mA). Medidas obtidas (OSA) experimentalmente do dispositivo laser de 250  $\mu\text{m}$  de cavidade ressonante. Amostra 726D. Temperatura do Peltier mantido a 19°C

Note a presença dos modos *Fabry-Perot* ao longo de todo o espectro. A curva de 60 mA apresenta potência máxima da ordem de  $2 \times 10^{-9}$  W. Note que esta potência aumentou quase duas ordens de grandeza em relação à potência obtida na curva de 20 mA. À medida que aumentamos a corrente injetada, a potência do modo cujo comprimento de onda corresponde à energia de transição do poço começa a aumentar vertiginosamente. Como descrito no **capítulo 5**, o modo que sobrevive na cavidade ressonante é aquele cujo valor correspondente de energia apresenta máximo ganho na curva espectral de ganho. Lembramos que isto acontece quando a corrente de limiar é atingida, como mostra o gráfico da figura 7.14:



**Figura 7.14** - Curva espectral de potência para uma corrente injetada de 70 mA. Medidas obtidas (OSA) experimentalmente do dispositivo laser de 250  $\mu\text{m}$  de cavidade ressonante. Amostra 726D. Temperatura do Peltier mantido a 19°C. Curva apresentada isoladamente das anteriores por critério de visualização.

O gráfico da figura 7.14 nos mostra a curva espectral de potência do mesmo dispositivo para uma corrente injetada de 70 mA, valor que excede a corrente de limiar do mesmo (64 mA); o comprimento de onda da transição do poço corresponde a 1.51  $\mu\text{m}$ . Note que a potência máxima emitida pelo dispositivo no regime *lasing* aumentou quase três ordens de grandeza em relação à potência emitida pelas curvas da figura anterior.

As curvas espectrais de ganho podem ser obtidas experimentalmente a partir do método *Hakki-Paoli* [Hakki *et al*, 1974], em que o ganho óptico é mensurado a partir da amplitude das oscilações *Fabry-Perot* das curvas espectrais de potência para correntes injetadas abaixo da corrente de limiar, como pode ser visto nas curvas da figura 7.13. Salientamos que este método não é eficaz para mensurar a curva de ganho sobre todo o espectro útil da curva espectral de potência, a partir da qual é gerada. Isto se deve ao fato da amplitude das oscilações *Fabry-Perot* tornarem-se cada vez menores conforme nos afastamos da região do pico como podemos observar na figura 7.13, o que torna o cálculo impreciso. Outra limitação do método está no valor da corrente injetada no laser a partir da qual é gerada a curva espectral de potência: quanto mais próxima do valor da corrente de limiar do dispositivo, mais imprecisas são as oscilações *Fabry-Perot* resultantes da competição entre os modos; as oscilações deixam de existir quando a corrente de limiar é atingida, como pode ser visto na figura 7.14. De acordo com o método, a

amplitude das oscilações é dada pela diferença entre o pico e o vale de cada modo subsequente. A razão entre os picos e o vale é dado pela seguinte expressão:

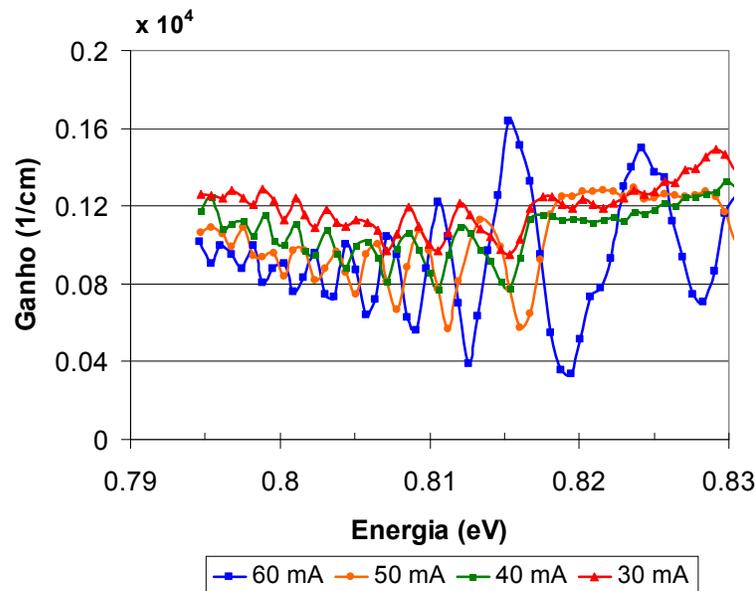
$$r_i = \frac{P_i + P_{i+1}}{2V_i} \quad (7.2)$$

Onde  $P_i$  e  $P_{i+1}$  são picos simultâneos no espectro com seu respectivo vale intermediário  $V_i$ .

O ganho é calculado da seguinte forma:

$$g = \frac{1}{\Gamma L} \ln \left( \frac{r_i^{1/2} + 1}{r_i^{1/2} - 1} \right) + \frac{1}{\Gamma L} \ln R_0 \quad (7.3)$$

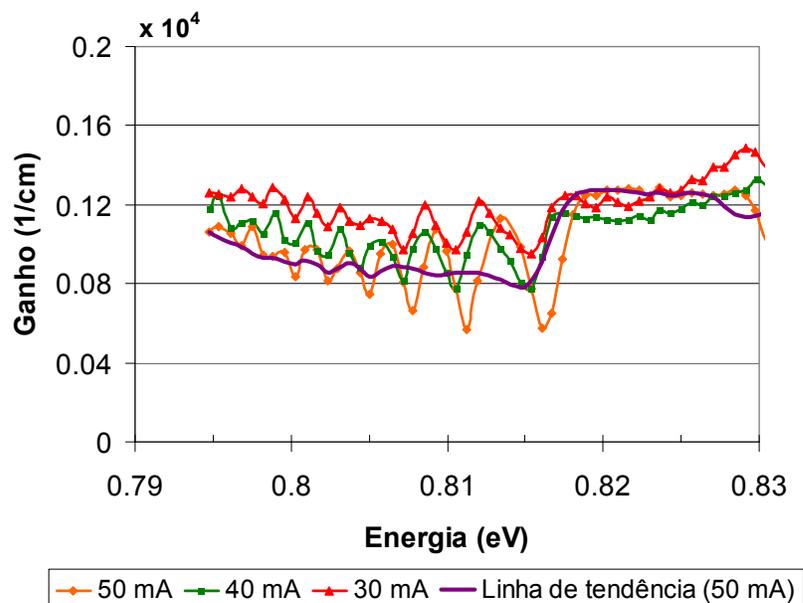
Onde  $\Gamma$  é o fator de confinamento,  $L$  é o comprimento do laser e  $R_0$  é a refletividade. Consideramos o fator de confinamento (correspondente a 6 poços de  $75\text{\AA}$  em uma região ativa cuja espessura total é  $2954\text{\AA}$ ) igual a  $\Gamma = 0.06$ ; consideramos a refletividade  $R_0 = 0.3$ . As curvas espectrais de potência da figura 7.13 foram utilizadas para gerar, a partir do método *Hakki-Paoli* (equações 7.2 e 7.3), as respectivas curvas espectrais de ganho óptico, conforme mostra a figura 7.15:



**Figura 7.15** - Curvas espectrais de ganho para diversas correntes injetadas (30, 40, 50 e 60 mA) obtidas a partir da aplicação do método Hakki-Paoli às curvas espectrais de potência da figura 7.13

A corrente associada a cada curva pode ser equiparada à concentração de portadores. As curvas da figura 7.15 nos sugerem a existência de modos *Fabry-Perot* modulados pelas curvas de ganho de poços quânticos, exceto para a curva de ganho de 60 mA, devido à imprecisão das

oscilações *Fabry-Perot* para correntes próximas ao limiar ( $I_{th}=64$  mA). No entanto, as oscilações desta curva indicam que o máximo ganho óptico ocorre para a energia (fóton) de 0.815 eV, que corresponde a 1.52  $\mu\text{m}$ , próximo ao valor do pico emitido pelo laser na curva espectral de potência da figura 7.14. A figura 7.16 mostra a tendência do comportamento das curvas espectrais de ganho, exceto para 60 mA:



**Figura 7.16** - Curvas espectrais de ganho da figura anterior (exceto a curva de 60 mA) delimitadas pela linha de tendência (média móvel) aplicada à curva de 50 mA

A linha de tendência (média móvel de período 5) aplicada à curva de ganho de 50 mA delimita o comportamento médio da curva a que foi aplicada. A presença desta linha evidencia um desnível na curva de ganho, distorção semelhante aquela que ocorre nas curvas espectrais de ganho para poço quântico simuladas no **capítulo 4** (figura 4.5); o mesmo sucede com as outras curvas da figura 7.16. Parece-nos correto supor que existe uma transição de energia associada a este desnível, próximo a 0.82 eV, energia que corresponde ao pico emitido pelo laser (1.51  $\mu\text{m}$ ). A existência de modos *Fabry-Perot*, cuja amplitude de oscilação aumenta à medida que se aproxima da energia de transição demonstra a competição entre modos na cavidade ressonante.

## 7.5 Confronto de Resultados

Analizamos os resultados experimentais através da comparação qualitativa com os resultados teóricos congêneres. Ressaltamos que as simulações teóricas do poço quântico foram obtidas para

um dispositivo de uma única camada de InGaAs de 200Å de espessura, cuja estrutura não é tensionada. Os resultados experimentais, por sua vez, foram obtidos para o dispositivo com 6 poços quânticos de 75Å de espessura, cuja estrutura é tensionada. Tratam-se, portanto, de estruturas distintas no que se refere à dimensão e composição. Logo, não pressupomos a convergência quantitativa entre os resultados teóricos e experimentais. Estamos interessados na análise qualitativa, em que comparamos a ordem de grandeza dos resultados obtidos em ambos os casos, assim como o comportamento das curvas correlatas.

As curvas experimentais de ganho óptico mostradas na figura 7.16 apresentam certa semelhança quando comparadas às curvas teóricas de ganho espectral para o poço quântico simuladas no **capítulo 4** (figura 4.5). Podemos inferir alguns padrões no comportamento destas curvas:

Os valores experimentais de ganho óptico são da mesma ordem de grandeza quando comparados aos valores de ganho da primeira transição das curvas teóricas de ganho espectral do poço quântico (figura 4.12, capítulo 4);

As curvas experimentais de ganho da figura 7.15 sugerem que, à medida que aumentamos a corrente, aumentamos a amplitude das oscilações *Fabry-Perot* próximos à energia de transição, resultado da competição entre os modos. Outro aspecto relevante é o fato destas oscilações deslocarem-se a direita em relação às outras, fato relacionado ao deslocamento do ganho máximo com o aumento da concentração de portadores (**capítulo 4**).

A curva experimental da corrente de limiar em função do comprimento da cavidade ressonante mostrada na figura 7.12, quando comparada à curva teórica correlata (figura 5.17, capítulo 5), nos revela a discrepância dos valores mensurados. As correntes mínimas de limiar, em ambos os casos, diferem quase duas ordens de grandeza (na curva teórica,  $I_{th_{min}} = 0.575$  mA para comprimento do laser de 100  $\mu\text{m}$ ; na curva experimental,  $I_{th_{min}} = 42$  mA para comprimento do laser de 450  $\mu\text{m}$ ). As diferenças entre a estrutura simulada na teoria e o dispositivo mensurado experimentalmente justificam, em parte, esta discrepância:

O volume da nanoestruturada a ser bombeada eletronicamente difere; na simulação teórica, o poço quântico de espessura de 200Å, comprimento de 100  $\mu\text{m}$  de cavidade (associado a  $I_{th_{min}} = 0.575$  mA) e largura de 4  $\mu\text{m}$  totaliza o volume de 8  $\mu\text{m}^3$ . O laser fabricado de 6 poços quânticos de 75Å de espessura, comprimento de 450  $\mu\text{m}$  de cavidade (associado a  $I_{th_{min}} = 42$  mA) e largura de 7  $\mu\text{m}$  totaliza o volume de 141.75  $\mu\text{m}^3$ . Se considerarmos a proporção entre os volumes a

serem bombeados em ambos os casos, parece-nos correto supor que as nanoestruturas deste dispositivo demandam quase 20 vezes mais corrente que o poço de 200Å; ou seja,  $20 \times 0.575 = 11.5 \text{ mA}$ . Mesmo assim persiste uma discrepância de 30 mA entre a corrente que seria necessária na teoria (11.5 mA) e a corrente mensurada no laboratório (42 mA);

A composição da estrutura de poços e barreiras da amostra doada difere da composição do sistema InGaAsP/InGaAs adotado nas simulações teóricas. O fato da barreira e o poço serem de InGaAsP leva a um índice de refração médio menor e, portanto:

- Menor fator de confinamento, ou seja, menor ganho real;
- Menor refletividade no espelho, ou seja, maior perda nos espelhos.

Estes dois fatores conjugados explicam, em parte, a necessidade de correntes de limiar mais elevadas assim como comprimentos de cavidade ressonantes maiores para minimizar a perdas por refletividade.

No entanto, a explicação mais plausível para a discrepância entre os valores de corrente está no modelo adotado no capítulo 5: a equação de taxa da densidade de portadores (equação 5.50) não prevê a perda de portadores por defeitos na rede ou vazamento de corrente na banda de condução. Estas perdas poderiam ser incorporadas na equação 5.50 através da subtração de um termo cuja dependência com relação à densidade de portadores seja linear:

$$R_{\text{Defeitos}} = An \quad (7.4)$$

Onde  $n$  é a densidade de portadores injetados e  $A$  é a constante de recombinação não-radiativa proveniente de defeitos que agem como armadilhas de elétrons e lacunas. A inclusão deste termo provavelmente será capaz de ajustar os valores obtidos na simulação teórica de modo que se aproximem dos valores obtidos experimentalmente. A taxa de recombinação total [Olshansky, 1984] para a equação 5.50 poderia ser reescrita como:

$$R_{\text{total}}(n) = An + Bn^2 + Cn^3 \quad (7.5)$$

No entanto, salientamos que os valores das constantes  $B$  (coeficiente de emissão estimulada) e  $C$  (coeficiente de recombinação Auger) são referenciadas na literatura científica. O coeficiente de recombinação não-radiativa proveniente de defeitos pode ser escrito como:

$$A = \sigma v N_{\text{trap}} \quad (7.6)$$

onde  $\sigma$  é a seção de choque das armadilhas,  $v$  é a velocidade de elétrons ou lacunas e  $N_{\text{trap}}$  é a densidade de armadilhas. Os valores destas constantes estão intrinsecamente ligados à

qualidade do cristal crescido e do processamento e pressupõe o conhecimento minucioso do tipo de defeito que afeta a rede cristalina, assim como a densidade de defeitos presentes no cristal, cujo estudo não é o objetivo do nosso trabalho. Uma forma de obtermos o valor do coeficiente de recombinação não-radiativa proveniente de defeitos consiste na simulação teórica de uma estrutura laser de poços quânticos que funcionasse enquanto dispositivo na prática: a partir do confronto de resultados teóricos e experimentais de uma mesma estrutura, seríamos capazes de estimar um valor para este coeficiente de modo que ajustasse os resultados obtidos em ambos os casos. Por fim, devemos enfatizar que todos estes efeitos são aumentados com a temperatura. Dada a resistência em série ao diodo, conforme visto em seu efeito à saturação da potência de saída nas curvas  $L \times I$ , o aquecimento da estrutura deve também ser levado em consideração. De toda forma, pudemos mostrar pelo menos uma concordância qualitativa com o modelo. Nosso interesse futuro é adequar o modelo a prever os resultados de nossas estruturas utilizando um refinamento final com ajuste empírico da corrente de vazamento, além de estudar a dependência da corrente de limiar com a temperatura.

## Conclusão

---

Esta dissertação de mestrado apresentou os estudos teóricos sobre o cálculo de ganho óptico em nanoestruturas baseadas no sistema InGaAs/InGaAsP. Após desenvolvermos todo o ferramental teórico para calcularmos o ganho óptico para os quatro casos abordados (*bulk*, poço, fio e ponto), pudemos constatar, a partir de análises comparativas das curvas espectrais de ganho, que nanofios e nanopontos propiciam condições de **alto ganho óptico** devido ao confinamento de suas dimensões e, ainda melhor, **controle espectral**. Estas características são extremamente desejáveis em lasers de semicondutores:

- O alto ganho óptico permite que o dispositivo funcione com baixa densidade de corrente de limiar;
- O controle espectral permite, a partir do dimensionamento de nanoestruturas, a escolha do comprimento de onda a ser emitido pelo dispositivo.

Mencionemos também que nanoestruturas tornam o comprimento de onda emitido fixo e independente da concentração de portadores injetados no dispositivo a medida que as confinamos. Na prática, esta característica mostra-se a mais importante, pois permite a injeção da corrente desejada de modo que o comprimento de onda emitido pelo dispositivo não seja afetado. De outra forma, qualquer incremento na potência da luz emitida resultaria na alteração do comprimento de onda desta luz.

O efeito da não-homogeneidade das dimensões dos pontos também foi considerado; as análises comparativas das curvas espectrais demonstraram que, embora o ganho óptico diminua quando consideramos um modelo mais realístico de distribuição de pontos quânticos, o controle espectral é preservado.

Os resultados das curvas espectrais de ganho são utilizados para calcular a corrente de limiar de laser de semicondutor de faces clivadas. O estudo realizado para a otimização do comprimento da cavidade para cada um dos meios de amplificação de luz (*bulk*, poço, fio e ponto quântico) demonstrou que, a medida que confinamos as nanoestruturas, a corrente de limiar diminui, devido ao aumento do ganho óptico proporcionado pelo confinamento.

Por fim descrevemos os procedimentos experimentais que compreenderam desde o crescimento e caracterização de amostras até o processamento de um dispositivo laser de poços e sua posterior caracterização enquanto dispositivo optoeletrônico: os resultados experimentais provenientes desta caracterização foram confrontados com os resultados teóricos correlatos. O modelo teórico proposto foi verificado qualitativamente a partir deste confronto; constatamos que as correntes de limiar obtidas experimentalmente estavam em desacordo com os valores obtidos na teoria. Propusemos a revisão da equação de taxa da densidade de portadores: o acréscimo de um termo, dependente da temperatura, de perda por recombinação não-radiativa proveniente de defeitos, que agem como armadilhas de elétrons e lacunas, poderiam ajustar os resultados obtidos na teoria e na prática.

## Referências Bibliográficas

---

Adachi S., “*Physical Properties of III-V Semiconductor Compounds*”, New York: Wiley (1992)

Agraval G. P. e N. K. Dutta, “*Semiconductor Lasers*”, 2ª edição (1993) – Van Nostrand Reinhold.

Alferov Zh.I. e R.F.Kazarinov, Authors Certificate 181737 (U.R.S.S.) (1963)

Arfken G.B. e H.J. Weber, “*Mathematical Methods for Physicists*”, 4ª edição, Academic Press. (1995)

Ashcroft N.W. e N.D. Mermin, “*Solid State Physics*”, 1ª edição, Saunders College Publishing (1976)

Bettini J., “**Crescimento de InGaP sobre GaAs por Epitaxia de Feixe Químico**”, Tese de Doutorado, IFGW/UNICAMP (2003)

Bohrer J., A. Krost e D. Bimberg, “*Composition Dependence of Bandgap and Type of Lineup in InGaAlAs/InP Heterostructures*”, Appl. Phys. Lett. 63, 1918 (1993)

Chuang S.L., “*Physics of Optoelectronic Devices*”, New York: Wiley (1995)

Cohen-Tannoudji C., B. Diu e F. Laloë, “*Quantum Mechanics*”, volume I, Wiley Interscience Publication. (1977)

Cotta M.A., M.M.G. de Carvalho, M. A.A. Pudenzi e K.M.I. Landers, “**Be Incorporation and Surface Morphologies in Homoepitaxial InP Films**”, Appl. Phys. Lett. 67 (8) (1995)

Dumke W.P., Phys. Rev. 127, 1559 (1962)

Eisberg, R.M. e R. Resnick, “**Física Quântica: Átomos, Moléculas, Núcleos e Partículas**”, 1ª edição, Rio de Janeiro, Campus (1985)

Esaki L., T. Tsu, “*Supperlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors*”, IBM J. Res. Develop., 61 (1970)

Hakki B.W. e T.L. Paoli, “*Gain Spectra in GaAs Double-Heterostructure Injecton Lasers*”, Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey (1974)

Hall R.N., G. E. Fenner, J.D. Kingsley, T.J. Soltys e eR.O. Carlson, Phys. Rev. Lett. 1, 62 (1962)

Hayashi I., M.B. Panish e P.W. Foy, IEEE J. Quantum Electron, QE-5, 211 (1969)

Hellwege K.H., Ed., “*Landolt-Bornstein Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*”, Berlin, Germany: Springer (1982), New Series, Group III, 17a; Groups III-V 22a, Berlin: Springer (1986)

Jackson J.D., “*Classical Electrodynamics*”, 2ª edição, John Wiley & Sons, Inc. (1975)

Javan A., W.R. Bennett Jr. e D.R. Herriot, Phys. Rev. Lett. 6, 106 (1961)

Kane E.O., “*Band Structure of Indium Antimonide*”, J. Phys. Chem. Solids 1, 249 (1956)

Kressel H. e H. Nelson, RCA Rev. 30, 106 (1969)

Kroemer H., Proc. IEEE 51, 1782 (1963)

Lee K.-S., W.-S. Han, J. S. Kim, and B. Lee, “*Band structure parameters of compressively strained In Ga As/InGaAsP multiple quantum wells*”, J. Korean Phys. Soc. 35, 587 (2000)

Leonard D., S. Fafard, K. Pond, Y.H. Zhang, J.L. Merz e P.M.Petroff, “**Structural an optical properties of self-assembled InGaAs Quantum Dots**”, Journal of Vacuum Science and Technology, B 12 (4) (1994)

Maiman T. H., Nature 187, 493 (1960)

Mendoza-Alvarez J. G., M. P. Pires, S.M. Landi, A.S. Lopes, P.L. Souza, J.M. Villas-Boas e N. Studart, “**Influence of stoichiometry on the luminescent properties of InAs quantum dots grown on a InxGa1-xAs/InP heterostructure**”, Physica E 32(1-2), 85 (2006)

Mialichi J.R. e N.C. Frateschi, “**Effects of non-uniform size distribution on the spectral optical gain properties of InGaAs/InGaAsP quantum dots**” J. Mater. Sci. 43, 568 (2008)

Minch J., S.H. Park, T. Keating e, S.L. Chuang, “**Theory and Experiment of In<sub>(1-x-y)</sub>Ga<sub>(x)</sub>Al<sub>(y)</sub>As and In<sub>(1-x)</sub>Ga<sub>(x)</sub>As<sub>(y)</sub>P<sub>(1-y)</sub> Long-Wavelength Strained Quantum-Well Lasers**”, Journal of Quantum Electronics 35 (5) (1999)

Miya T., Y. Terunuma, T. Hosaka e T. Miyoshita, Electron. Lett. 15, 106 (1979)

Moon R.L., G.A. Antipaz e L.W. James, J. Electron. Mater. 3, 635 (1974)

Nisbet A., Proc. Royal Soc., 231A, 250 (1955)

Ogata K., “**Modern Control Engineering**”, 3ª edição, Englewood Cliffs, Prentice Hall (1990)

Olshansky R.C., C.B. Su, J. Manning e W. Powazinik, IEEE J. Quantum Electron. QE-20, 838 (1984)

Reitz J.R., F.J. Milford e R.W. Christy, “**Foundations of Eletromagnetic Theory**”, 4ª edição, Addison-Wesley Publishing, Inc. (1980)

Schawlow A.L. e C.H. Townes, Phys. Rev. 112, 1940 (1958)

Suematsu Y., Proc. IEEE 71, 692 (1983)

Sugimura A., K. Daikoku, N. Imoto e T. Miya, J. Quantum Electron. QE-16, 215 (1980)

Svelto O., "*Principles of Laser*", 2ª edição, Plenum Press, New York and London (1982)

Sze S.M., "*Semiconductor Devices*", John Wiley & Sons, Inc. (2002)

Varshni Y. P., "*Temperature dependence of the energy gap in semiconductors*", Physica (Amsterdam) 34, 149 (1967)

Yamada M., H. Ishiguro e H. Nagato, "*Estimation of Intrabad Relaxation Time in Undoped AlGaAs Injection Laser*", Jap. J. Appl. Phys. 19, 135 (1980)