Felipe Vallini

Nanolasers de semicondutor metálico-dielétrico com bombeio eletrônico: a influência do meio de ganho

Campinas, SP

2013

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Instituto de Física Gleb Wataghin

Felipe Vallini

Nanolasers de semicondutor metálico-dielétrico com bombeio eletrônico: a influência do meio de ganho

Tese apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de Doutor em Ciências

Orientador: Newton Cesário Frateschi

Este exemplar corresponde à versão final da tese defendida pelo aluno Felipe Vallini orientada pelo Prof. Dr. Newton Cesário Frateschi.

Campinas, SP

2013

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Física Gleb Wataghin
Valkíria Succi Vicente - CRB 8/5398

V244n

Vallini, Felipe, 1985-
Nanolasers de semicondutor metálico-dielétrico com bombeio eletrônico : a influência do meio de ganho / Felipe Vallini. – Campinas, SP : [s.n.], 2013.

Orientador: Newton Cesário Frateschi.
Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física Gleb Wataghin.

1. Nanolaser de semicondutor. 2. Bulk. 3. Poços quânticos. 4. Injeção eletrônica. I. Frateschi, Newton Cesário,1962-. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física Gleb Wataghin. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Metallo-dielectric semiconductor nanolasers with electronic pumping : the influence of the gain media
Palavras-chave em inglês:
Semiconductor nanolaser
Bulk
Quantum wells
Electronic injection
Área de concentração: Física
Titulação: Doutor em Ciências
Banca examinadora:
Newton Cesário Frateschi [Orientador]
Alain André Quivy
Ben-Hur Viana Borges
Thiago Pedro Mayer Alegre
Flávio Caldas da Cruz
Data de defesa: 19-12-2013
Programa de Pós-Graduação: Física

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE **FELIPE VALLINI – RA: 023779** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 19 / 12 / 2013.

COMISSÃO JULGADORA:

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

Prof. Dr. Alain André Quivy – IF/USP

Prof. Dr. Ben-Hur Viana Borges – EESC/USP

Prof. Dr. Thiago Pedro Mayer Alegre – DFA/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Flávio Caldas da Cruz – DEQ/IFGW/UNICAMP

Resumo

Neste trabalho são investigados os nanolasers de semicondutor do tipo metálico-dielétrico com injeção eletrônica. Com o uso de softwares robustos otimizamos as propriedades eletromagnéticas das cavidades propostas através da solução das equações de Maxwell em um meio material. Também resolvemos auto-consistentemente as equações de Poisson, de continuidade, de transporte e de Schroedinger para obter as propriedades eletrônicas da cavidade. Tal otimização, considerando a parte de confinamento do modo em conjunto com a parte da injeção eletrônica nunca havia sido proposta ou realizada para nanolasers. Estudamos o efeito do meio de ganho em um nanolaser desse tipo através da comparação do desempenho de um nanolaser com meio de ganho *bulk* e outro com meio de ganho de múltiplos poços quânticos. Essa análise foi feita inserindo um modelo de reservatório de portadores às equações de taxa convencionais para nanolasers. Fabricamos dois nanolasers, um com cada meio de ganho. Os nanolasers foram caracterizados e demonstramos que um meio de ganho *bulk* é mais adequado ao desenvolvimento de nanolasers de semicondutor metálico-dielétrico com bombeio eletrônico. Por fim, medimos um nanolaser com meio de ganho *bulk* a 77 K, o qual apresentou uma corrente de limiar da ordem de 2 mA, emissão em 1567 nm e largura de linha de 0.4 nm.

Abstract

In this work we have investigated metallo-dielectric semiconductor nanolasers with electronic pumping. We have optimized the electromagnetic properties of the proposed cavities through the solution of Maxwell equations in a material media using robust software. We also solved self-consistently Poisson, continuity, transport and Schrodinger equations to obtain the electronic properties of the cavities. Such optimization, which considers the optical mode confinement together with the electronic injection, had not been proposed or realized for nanolasers yet. We have studied the effect of the gain media in this class of nanolaser comparing the performance of a nanolaser with bulk gain media and a nanolaser with multiple quantum wells gain media. This analysis was done inserting a reservoir model for carriers into conventional laser rate equations. We have fabricated two nanolasers, each one with one of the proposed gain media. The nanolasers were measured and we demonstrated that a bulk gain media is more suitable for the development of metallo-dielectric semiconductor nanolasers with electronic pumping. Finally, we have measured a bulk gain media nanolaser at 77 K, with a threshold current of 2 mA, emission at 1567 nm and a linewidth of 0.4 nm.

Sumário

Resumo vii

Abstract vii

Agradecimentos xvii

1. Introdução 1

1.1 As dimensões limites de um laser 2

1.1.1 VCSEL 5

1.1.2 Laser de cristal fotônico 7

1.1.3 Laser de nanofio 8

1.1.4 Nanolasers metálico-dielétricos 8

1.2 Nossa contribuição 9

2. Confinamento da luz em cavidades com dimensões sub-λ 13

2.1 Confinamento da luz em meios dielétricos 13

2.2 Confinamento da luz em guias curvos 14

2.3 O confinamento e as perdas vistos após um mapeamento conformal 15

2.4 Microdiscos: uma extensão de ressonadores em anel 17

2.5 Nanodiscos: reduzindo a dimensão da cavidade 18

2.6 Confinamento da luz em cavidades de micro e nanodiscos: solução analítica 19

2.7 Grandezas relevantes 22

2.8 Como simular um sistema dissipativo com elementos finitos? 23

2.9 Otimização da cavidade: parâmetros constantes e parâmetros livres. 23

2.10 Efeito da camada de isolamento no confinamento 26

2.11 Efeito do raio da região ativa no confinamento 27

2.12 Efeito do raio do pedestal no confinamento 28

2.13 Conclusão 30

3. Meios dielétricos de ganho para nanolasers 33

3.1 *Bulk*, poços quânticos, nanofios e pontos quânticos 33

3.2 A relação entre emissão espontânea e o ganho material 35

3.3 Cálculo da densidade de estados fotônicos 39

3.4 Cálculo da emissão espontânea para *bulk* 40

3.5 Cálculo da emissão espontânea para poços quânticos 42
3.6 Determinação dos quase-níveis de Fermi 44
3.7 Simulações da emissão espontânea e do ganho material para um meio *bulk* 45
3.8 Simulações da emissão espontânea e do ganho material para um meio de poços quânticos 48
3.9 Uma comparação entre o material *bulk* com o de múltiplos poços quânticos 50
3.10 Conclusão 52
4. Injeção de portadores em dispositivos optoeletrônicos 55
4.1 Equação de Poisson 55
4.2 Equações de transporte de portadores 56
4.3 Equações de continuidade 56
4.4 Relações auxiliares e condições de contorno 57
4.5 Estrutura das camadas e diagrama de bandas para as estruturas lasers 58
4.6 Injeção de portadores 60
4.7 Potência consumida e efeitos de aquecimento 64
4.8 Um resumo da otimização 67
4.9 Conclusão 70
5. Desempenho dos nanolasers 71
5.1 Equações de taxa: o caso *bulk* 71
5.2 Equações de taxa: a barreira como um reservatório de portadores 74
5.3 Reservatório de portadores 80
5.4 Conclusão 81
6. Fabricação dos Nanolasers 83
6.1 Nanolaser de semicondutor metálico-dielétrico 83
6.2 *Nanopatch* de semicondutor 96
6.3 Conclusão 103
7. Caracterização dos nanolasers de semicondutor metálico-dielétrico com bombeio eletrônico 105
7.1 Bancada de medidas 105
7.2 Caracterização optoeletrônica 107
7.3 Uma análise geométrica dos nanolasers 115
7.4 Conclusão 117

8. Conclusão 119
Apêndice A. Cálculo do elemento de matriz do dipolo 125
Apêndice B. Poços quânticos 131
Apêndice C: Modelo de linha de transmissão para medidas de resistividade contato 137

Aos meus pais e querido irmão

I doubt I'm any wiser than I was five hundred years back. I'm older. I've been up, and been down, and been up again. Have I learned aught? I've learned from my mistakes, but I've had more time to commit more mistakes.

Hob Gadling, in Sandman #13: "Men of Good Fortune"

"...with great power there must also come -- great responsibility!"

Narrator, in Amazing Fantasy #15

Agradecimentos

É difícil escrever um agradecimento citando o nome de todas as pessoas que fizeram parte desses longos quatro anos que passaram tão depressa sem esquecer-se de ninguém. Por isso quero deixar aqui o meu carinho a todas as pessoas que cruzaram pelo meu caminho nesse período. Seja de forma longa ou curta, todos tiveram um papel importante durante esses anos todos.

Devo agradecer a todos os membros do grupo, com os quais compartilhei laboratórios, salas e reuniões por incontáveis horas da minha vida. Aqui vai um abraço em especial ao Antônio Augusto Von Zuben a ao Luís Barea, meus companheiros de sala. Sem eles talvez eu tivesse acabado minha tese antes, mas seria muito mais sem graça.

Quero agradecer meu orientador, Newton Cesário Frateschi, pois foi a pessoa que me ensinou o que eu preciso para dar continuidade à minha carreira. Ele me mostrou os melhores caminhos a serem tomados. "*We've got to get in to get out*".

À minha família (pais, irmão, tio e avôs) que sempre aceitou minhas escolhas e suportou bem os momentos de distância, sempre me trazendo de volta. Um abraço bem apertado aos meus pais, Mauro e Elaine, e ao meu irmão Luís.

Aos amigos da saudosa República Vamô Vê e aos novos amigos da brilhante Tropicália. Viver com mais de 30 pessoas diferentes ao longo desses anos foi fundamental para meu desenvolvimento como uma pessoa melhor. Aprendi muito sobre a vida com todos vocês. Espero reencontrar a todos em dias de um futuro não tão distante.

Amigos de Botucatu, sei que entenderam muito bem meus momentos de ausência das reuniões do grupo, mas como físico, estava correndo atrás do meu objetivo de dominar o mundo.

Queria deixar um beijo carinhoso a uma pessoa especial a qual não vou dizer o nome, pois ela é muito tímida. Eu a conheci há pouco tempo, mas ela teve um papel fundamental durante essa etapa final. Obrigado e muito carinho...

Não posso deixar de fazer um agradecimento especial aos meus companheiros de aventuras: Diogo Almeida, Lucas Gonçalves, Luiz Fernando Vallini, Caio Vasquez, Luiz Henrique Nerli, Igor Alencar, Thiago Junqueira e Carlos Góis.

Friends from San Diego, thank you for the 6 months we spent working and having fun together.

I will be back!

Este projeto de doutorado foi financiado pelo CNPQ (#142792/2009-8), CAPES (BEX #5781/11-6) e FAPESP e está vinculado ao CePOF e ao INCT FOTONICOM.

1. Introdução

Os primeiros lasers foram fabricados há aproximadamente 50 anos e causaram um imenso impacto no nosso cotidiano, resultando em aplicações militares, na área da saúde, em telecomunicações, na fabricação de materiais, em sensoriamento e como ferramenta essencial para experimentos de física fundamental. Mais recentemente, unindo o laser de semicondutor com o advento da nanotecnologia / nanofotônica, surgiu uma nova ideia de dispositivo, o nanolaser de semicondutor, ao qual nos referenciaremos a partir de agora como nanolaser. Nanolasers se referem a lasers cujas dimensões são comparáveis ou até mesmo menores que o comprimento de onda envolvido [1,2]. O objetivo da redução incessante do tamanho dos dispositivos é evidenciado pela Lei de Moore, que diz que a integração em larga escala com a redução do tamanho dos dispositivos permite um incrível aumento do desempenho com simultânea redução de custo [3]. Essa busca por miniaturização é o que move o campo dos nanolasers, pois ainda há uma diferença muito grande das dimensões dos dispositivos de microeletrônica baseados em silício, uma tecnologia mais madura e bem estabelecida, com os dispositivos optoeletrônicos baseados em ligas de semicondutores da família III-V. Essa diferença, que dificulta a integração entre as duas plataformas, se dá em maior parte devido ao *band gap* indireto do Si e devido ao comprimento de onda dos elétrons, que é uma ordem de grandeza menor do que o dos fótons na região de comprimento de onda envolvido em telecomunicações ópticas (infravermelho).

Uma vez que essa redução de tamanho dos lasers de semicondutor seja alcançada, uma série de aplicações se torna viável. A primeira delas e a mais natural é a integração de alta densidade em chips fotônicos para comunicação no mesmo chip [4,5]. Por exemplo, no caso de um nanolaser possuir uma largura de banda de modulação de 12.5 GHz, vinte nanolasers integrados em um único chip possibilitariam uma largura de banda de 250 GHz para troca e processamento de dados entre dois computadores. Outra aplicação interessante é mais relacionada à biologia, para imageamento de ultra-alta resolução e de alta sensibilidade, sensoriamento e espectroscopia [6]. Neste caso, os dispositivos ficariam muito mais baratos se uma fonte coerente de luz ultra pequena pudesse ser integrada no mesmo chip onde se encontram os sensores. Além de aplicações tecnológicas, a redução do volume de material onde a luz fica confinada faz com que a interação da radiação com a matéria aumente, sendo os nanolasers um novo laboratório para o estudo de alguns efeitos quânticos, principalmente relacionados ao acoplamento forte e fraco da radiação com a matéria [7].

Independentemente da aplicação desejada para os nanolasers, devemos ressaltar que o objetivo é tornar disponível um nanolaser que opere à temperatura ambiente e com bombeio eletrônico (injeção de corrente). O custo de um dispositivo operando a temperaturas criogênicas é muito alto. A necessidade de outra fonte de luz para bombear o laser de interesse também é

algo inviável. Sendo assim, manteremos o foco em discutir apenas nanolasers com bombeio eletrônico.

Para dar prosseguimento à tese, queremos deixar claro nesta introdução quais são as limitações que surgem para a redução dos nanolasers e como ultrapassá-las. Qual é o estado da arte e o caminho científico/tecnológico para chegar até elas? Respondidas essas perguntas, podemos inserir o trabalho proposto nessa tese e sua relevância no contexto geral dos nanolasers de semicondutor. Por fim, descreveremos brevemente o conteúdo de cada capítulo.

1.1 As dimensões limites de um laser

São duas as condições necessárias para termos um laser de semicondutor. Necessitamos de uma cavidade ressonante e um meio de ganho embutido nela. Consideremos então uma cavidade unidimensional de comprimento L formada por dois espelhos de refletividades r_1 e r_2 e preenchida por um material com ganho óptico, conforme figura 1.1.

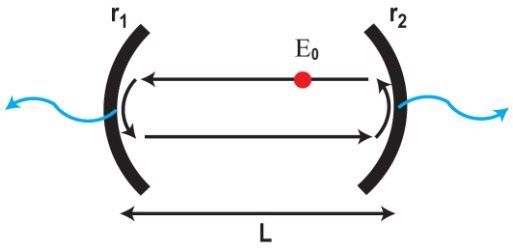


Fig. 1.1: Esquema de uma cavidade ressonante de comprimento L formada por dois espelhos de refletividades r_1 e r_2, respectivamente. Dentro dessa cavidade temos um campo confinado com amplitude de oscilação E_0.

Uma das condições para que a cavidade seja ressonante é que um campo eletromagnético contido dentro dela deve formar um estado estacionário para certas frequências específicas, os modos ressonantes. Mais ainda, considerando que o sistema pode ter perdas, um modo ressonante perfeito pode ocorrer se a amplificação óptica interna à cavidade compensá-las. Isso significa que, matematicamente, a amplitude complexa de um campo, E_0, ao partir de um ponto arbitrário da cavidade, deve retornar ao seu valor original após o modo se propagar ao longo da cavidade, refletir nos dois espelhos e retornar ao mesmo ponto inicial:

$$E_0 = r_1 r_2 e^{(2ikL)} E_0 \quad (1.1)$$

onde i representa um número complexo ($\sqrt[2]{-1}$) e k é o vetor de onda de propagação do modo em questão. Como o vetor de onda é complexo, $k = k' + ik''$, duas condições surgem da equação (1.1):

$$k' = \frac{\pi}{L} m \rightarrow L_{min}^{(1)} = \frac{\lambda}{2n_{eff}} m, m = 1,2, \ldots \qquad (1.2\text{-}1)$$

$$L = \frac{\ln(r_1 r_2)}{(2k'')} \rightarrow L_{(min)}^{(2)} = \frac{ln(r_1 r_2)}{-2g_m} \qquad (1.2\text{-}2)$$

onde λ é o comprimento de onda, n_{eff} o índice de refração efetivo do modo propagante em questão, m é um número inteiro e g_m é o ganho modal, definido como $g_m = \Gamma g$. Γ é o fator de confinamento, definido como a superposição da distribuição espacial do modo óptico confinado com o volume que constitui o meio de ganho. g é o ganho material disponível dentro da cavidade. Assim, criam-se duas escalas que definem o limite inferior para o comprimento de um laser. A primeira delas, $L_{min}^{(1)}$, é a condição de meia onda, chamada de limite da difração e associada com qualquer onda [8]. A segunda, $L_{min}^{(2)}$, simplesmente diz que a propagação ao longo do meio de ganho deve ser longa o suficiente para sobrepor as perdas determinadas pela propagação e pela refletividade dos espelhos que formam a cavidade [9]. Outra forma de dizer isto é que quanto menor o laser, maior será o número de vezes por unidade de tempo os fótons chegam aos espelhos e, portanto, maior a taxa de perda.

Para redimensionar o primeiro limite de comprimento, é preciso aumentar o índice de refração efetivo, como pode ser visto pela equação (1.2-1). Um exemplo são as estruturas plasmônicas formadas por uma interface metal-dielétrico, pois apresentam uma interessante relação de dispersão: quando excitadas próximo da ressonância dos plasmons de superfície é possível obter altos índices de refração com pouca variação da frequência de ressonância [10]. Esse efeito é utilizado nos chamados lasers plasmônicos e nos *spasers* (*Surface Plasmon Amplified Stimulated Emission of Radiation,* em inglês) [11,12,13]. Neste caso, uma camada de metal é colocada extremamente próxima ou mesmo encostada ao meio de ganho. Plasmons de superfície são criados e acoplam com fótons, criando uma quase-partícula chamada de plasmon-polariton [14]. Um mecanismo de relaxamento análogo às oscilações de relaxação de um laser faz com que as partículas se desacoplem e fótons sejam gerados. Esse tipo de nanolaser não se encontra no escopo dessa tese, mas temos que dizer que sua grande desvantagem é a alta perda inserida no sistema devido à grande superposição do modo óptico confinado com o meio metálico (efeito Joule).

Já o segundo limite pode ser reduzido de duas maneiras: aumentando a refletividade da cavidade ou aumentando o ganho modal. O aumento da refletividade pode ser feito escolhendo um material com maior coeficiente de reflexão ou fazendo um arranjo de camadas que crie situações de interferência construtiva da luz em áreas de interesse, no caso, no meio de ganho. O ganho modal pode aumentar dependendo da escolha do meio de ganho ou otimizando a cavidade para aumentar o Γ. O tipo de nanolaser com o qual trabalhamos nesta tese está relacionado a essa forma de reduzir os limites das dimensões de uma cavidade.

Independentemente do tipo de nanolaser, alguns problemas fundamentais surgem com a redução de suas dimensões. O primeiro problema, de certa forma óbvio, é que ao reduzirmos um nanolaser, reduzimos a região de ganho, o que consequentemente diminui o Γ devido ao aumento da distribuição espacial do modo confinado fora do meio material. A redução de um nanolaser

também implica na redução da área para injeção de corrente elétrica e, portanto, aumento da resistência elétrica, que faz necessário uma tensão extremamente alta para injetar a corrente de operação desejada. Além disso, a dificuldade de injeção em conjunto com a alta densidade fotônica em uma pequena região do espaço faz com que ocorram efeitos de auto-aquecimento que podem alterar as propriedades do meio de ganho e inibir o funcionamento do dispositivo [15]. Outro problema, menos óbvio, é o chamado fator de Purcell: modificação da emissão espontânea devido ao confinamento dos fótons [16]. Apesar da interação radiação-matéria poder ser usada para aumento da emissão espontânea, ela também pode resultar em supressão da mesma.

Baseado nesses limites e problemas, e nos modos de ultrapassá-los, vamos descrever os diferentes tipo de nanolasers com suas principais vantagens e desvantagens, mostrando um breve histórico deles, para então inserir o nosso dispositivo e a relevância do estudo realizado nessa tese. Os dispositivos a serem comentados encontram-se na figura 1.2.

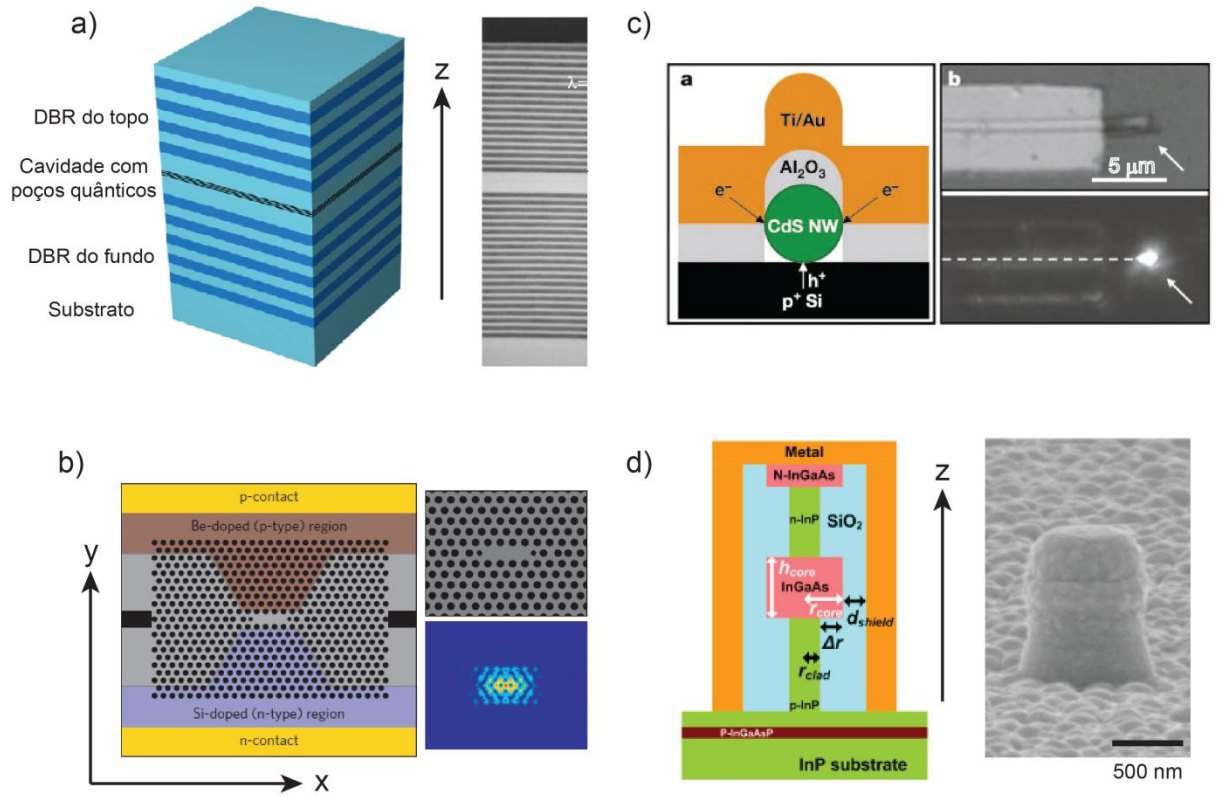


Fig. 1.2: (a) Esquema de um VCSEL de poços quânticos confinados por DBR's com uma imagem de SEM [14]. (b) Esquema de um laser de cristal fotônico à esquerda, com uma fotografia feita com um SEM do lado direito superior e respectivo modo fotônico do lado direito inferior [17]. (c) Esquema de um laser de nanofio à esquerda, com uma imagem de SEM do lado direito superior e imagem da luz coerente emitida do lado direito inferior [18]. (d) Esquema de um nanolaser envolto por camada metálica dielétrica à esquerda e foto obtida com um SEM à direita [19].

1.1.1 VCSEL

O primeiro laser de semicondutor que consideramos como um nanolaser é o laser de cavidade vertical com emissão de superfície (VCSEL – *Vertical-Cavity Surface-Emiting Laser*, do acrônimo em inglês), onde o comprimento de onda no material da luz emitida tem a mesma dimensão que a distribuição espacial do modo óptico em uma das dimensões do confinamento. Um exemplo do dispositivo encontra-se na figura 1.2 (a). Na direção vertical, eixo *z*, temos uma sequência de espelhos de Bragg com dimensões de $\lambda/4$ para aumentar a refletividade da cavidade, ou seja, criamos uma *band gap* fotônico unidimensional [20]. Entre duas sequências dos espelhos de Bragg, insere-se o meio ativo com espessura de $\lambda/2$ ou λ , para criar uma ressonância na cavidade e confinar o modo óptico de interesse. Na figura 1.2 (a) à direita vemos uma foto da estrutura obtida com um microscópio eletrônico de varredura (SEM – *Scanning Electron Microscope*, do acrônimo em inglês).

A proposta e desenvolvimento de um VCSEL foram primeiramente feitos por K. Iga em 1977, onde se utilizava espelhos dielétricos no substrato [21]. Com o avanço da tecnologia de epitaxia de materiais III-V foi possível fazer lasers de emissão de superfície, com funcionamento contínuo (CW – *continuous wave*, do inglês), utilizando espelhos de Bragg crescidos epitaxialmente. O primeiro destes lasers, bombeado opticamente e operando a temperatura ambiente, foi realizado por Jack Jewel e Axel Scherer, em 1989, na época pesquisadores da AT&T Bell Laboratories [22]. Larry Coldren foi o primeiro a demonstrar um VCESL bombeado eletronicamente, em 1993 [23]. O interesse nestes lasers era principalmente devido à possibilidade de integração destes dispositivos, uma vez que não necessitavam clivagem para obter a cavidade ressonante. Simultaneamente, estes lasers, cujo confinamento em uma das dimensões era da ordem de um comprimento de onda, despertou interesse na comunidade científica do ponto de vista de verificar efeitos na emissão espontânea causados por este confinamento. Um destes trabalhos veio com a proposta de Yablonovitch de utilizar a modulação do índice de refração das diferentes camadas que formam os espelhos de Bragg para controlar a emissão espontânea de radiação, suprimindo-a nos modos indesejados e aumentando-a nos modos de emissão de interesse [17]. Aqui cabe lembrar que, segundo as relações de Einstein, a emissão espontânea deve coexistir com a absorção e com a emissão estimulada [24]. Assim, o aumento da emissão espontânea nos modos de interesse diminui a corrente de limiar enquanto que a redução da emissão espontânea nos modos indesejados, sejam eles de radiação ou confinados, diminui a corrente de fuga do laser, evitando efeitos de aquecimento.

Com melhoras nos métodos de crescimento epitaxial e nos processos de fabricação foi possível pensar em reduzir a dimensão radial dessas cavidades, o que reduziu a quantidade de modos confinados. Uma redução do número de modos implica no aumento do fator de acoplamento da emissão espontânea do meio com o modo ressonante da cavidade, β. Uma cavidade com um único modo confinado e com total supressão de todos os modos de radiação significa um β unitário. A partir desse momento surgiu o conceito de um laser sem corrente de

limiar (*thresholdless*), onde a transição entre a emissão espontânea e a estimulada não é bem definida [25]. O interesse em se obter um laser sem corrente de limiar é a diminuição da potência consumida para ligar o dispositivo bem como a possibilidade de modulação rápida da luz, já que a influência da modulação de corrente no modo óptico seria muito alta. Assim, começa a corrida pelos nanolasers, em busca do laser com a menor, ou de preferência sem corrente de limiar.

O sistema descrito acima é dissipativo e cada fóton criado na cavidade é emitido, não interagindo novamente com o sistema, pois o tempo de vida da interação radiação-matéria é menor do que o tempo de vida fotônico dentro da cavidade. Portanto, estamos em um regime de acoplamento radiação-matéria considerado como fraco. Se inserirmos pontos quânticos no meio de ganho, a energia de interação entre os emissores e os fótons aumenta, e seu tempo de vida passa a ser maior do que o tempo de vida fotônico dentro da cavidade. Esse é o chamado regime de acoplamento forte, onde é criado um estado degenerado entre emissor e fóton. Assim, esse tipo de cavidade se tornou importante para o entendimento de diversos fenômenos quânticos e para o desenvolvimento da teoria de eletrodinâmica quântica de cavidades [7].

Um desses novos efeitos, relacionados com os nanolasers, é a formação de quase-partículas chamadas éxciton-poláritons (chamaremos simplesmente de poláritons) [14]. A amostra é excitada opticamente, de forma não ressonante, com energias acima dos níveis dos poços quânticos para criar elétrons e buracos, que perdem energia via emissão de fônons e formam um reservatório de éxcitons. Esse reservatório acopla com possíveis modos da cavidade fotônica que resulta em um estado hibridizado entre éxcitons e fótons, os poláritons. Essas quase-partículas, por emissão de fônons ou outros mecanismos de relaxação, decaem ao longo do ramo de poláritons até atingir o mínimo da banda de condução e formar um condensado de poláritons, já que são bósons devido ao spin inteiro. Nesse estado os poláritons decaem radiativamente através da emissão coerente de fótons, e temos o chamado laser de poláritons, cuja grande vantagem é possuir limiares de mais de uma ordem de grandeza menores do que um laser convencional, além de não necessitar de inversão de população, podendo ser uma solução para os nanolasers. Obviamente com o aumento do bombeio um laser de poláriton passa a ser um laser de fótons.

Infelizmente, éxcitons são formados a energias térmicas muito baixas, pois sua energia de ligação está abaixo de $\kappa_B T$ em temperatura ambiente. Logo, os lasers de poláritons só foram demonstrados a temperaturas criogênicas. Além disso, para manter a qualidade do confinamento do modo óptico não podemos reduzir o número de camadas que constituem os espelhos de Bragg, ou seja, a princípio é impossível reduzir o comprimento da cavidade ao longo do eixo z. O alto confinamento reduz as perdas ópticas da cavidade e então aumentar o acoplamento entre os éxcitons e os fótons da cavidade.

Entretanto, apesar dessas cavidades permitirem modos ópticos cujas distribuições espaciais são da ordem dos comprimentos de onda, na nossa definição de nanolaser, queremos

uma cavidade cuja dimensão real seja da ordem do comprimento de onda envolvido. Não estamos diretamente interessados no volume efetivo do modo óptico confinado

1.1.2 Laser de cristal fotônico

Já que os VCSEL's apresentavam forte confinamento unidimensional, é de se esperar que a próxima tentativa de nanolasers viesse por meio de uma estrutura que confinasse bidimensionalmente a luz. Neste caso, é comum utilizar os chamados cristais fotônicos, como ilustrado na figura 1.2 (b). Uma rede periódica de buracos é formada sobre um substrato para criar uma modulação controlada e periódica do índice de refração [26]. Quando resolvemos a equação de onda para tal estrutura, o efeito da variação periódica do índice de refração é análogo ao potencial gerado pelos caroços iônicos quando resolvemos a equação de Schroedinger para uma rede cristalina. Assim, é criado o chamado *band gap* fotônico, estados proibidos para propagação de ondas eletromagnéticas. Inserindo um defeito (ausência de um buraco) no centro dessa rede fotônica, criamos um estado permitido dentro do *band gap* fotônico que permite o confinamento da luz para frequências bem específicas, os modos ressonantes do cristal fotônico. Apenas para deixar claro, o confinamento na direção z é dado pela diferença de índice de refração entre os materiais.

Para o cristal fotônico operar como um laser com bombeio eletrônico, além do confinamento fotônico, mais duas condições devem ser satisfeitas: o material que forma a estrutura deve possuir ganho óptico e deve-se criar, em alguma região, uma junção *P-i-N* para injeção de portadores na cavidade. No caso do cristal exibido na figura 1.2 (b), o meio de ganho é composto de pontos quânticos de InAs inseridos em uma matriz de GaAs. Já para formar a junção *P-i-N*, dopa-se parte do cristal com Be (tipo p) e parte com Si (tipo n). Nas extremidades das regiões dopadas deposita-se metal para contato ôhmico. Tais dispositivos funcionam com correntes de limiar ultra-pequenas, de 287 nA a uma temperatura de 150 K [17].

Os cristais fotônicos apresentam um altíssimo fator de qualidade (Q) e, portanto, um grande tempo de vida fotônico. Eles também possuem um altíssimo volume efetivo do modo óptico (V_{eff}), definido com a renormalização espacial da energia confinada na cavidade com o seu máximo. Logo, tais cavidades apresentam um alto fator de Purcell $\left(F_P \alpha \frac{Q}{V_{eff}}\right)$, o que possibilitaria uma alta velocidade de modulação a um consumo de potência reduzido.

Infelizmente, para possuir todos esses atributos as dimensões do plano do cristal onde estão os buracos são de dezenas de comprimento de onda, o que é muito bom para a dissipação térmica, mas impossibilita a miniaturização desse tipo de dispositivo. Novamente, temos mais um dispositivo que possui um volume efetivo muito pequeno para o modo óptico, mas ao custo de um enorme *footprint*.

1.1.3 Laser de nanofio

Uma terceira opção para a redução do tamanho dos nanolaser são os nanofios, que possuem raios típicos de dezenas a centenas de nanômetros e comprimentos típicos menores do que 1 μm, possibilitando um confinamento quase-tridimensional. Um exemplo de nanofio de CdS operando como um laser com injeção eletrônica é mostrado na figura 1.2 (c) [18]. Os nanofios possuem diversos atributos interessantes como: alto Γ devido ao alto contraste de índice de refração, e uma ampla faixa de *band gaps*, pois como o crescimento dos nanofios não precisa ter o parâmetro de rede casado com o substrato é possível obter diversas composições para uma mesma liga sem se preocupar com o parâmetro de rede do substrato.

Entretanto, os nanofios ainda apresentam mais desvantagens do que vantagens. Os tamanhos extremamente pequenos, não só os fazem difíceis de serem manipulados, mas também dificultam enormemente a injeção de corrente elétrica devido à alta resistência. Como mencionado anteriormente, esse problema acarreta em efeitos de auto-aquecimento. Mesmo que seja possível obter emissão estimulada em um nanofio, a divergência do campo distante é muito grande devido à pequena área para emissão da luz, o que dificulta muito o acoplamento da luz emitida com um guia de onda integrado ou mesmo com uma fibra óptica. Logo, os nanofios ainda não são os melhores candidatos para um nanolaser com bombeio eletrônico à temperatura ambiente.

1.1.4 Nanolasers metálico-dielétricos

A melhor solução até agora alcançada para se obter um nanolaser são os nanolasers envoltos por camada metálica-dielétrica, conforme mostra o esquema na figura 1.2 (d) [19]. Esse dispositivo é constituído por uma dupla heteroestrutura *P-i-N* para injeção de corrente e o meio de ganho é uma liga ternária de InGaAs casada com InP. Na direção vertical, eixo *z*, o confinamento é feito pela diferença de índice de refração e por um refletor metálico depositado no topo. Esse refletor faz com que a emissão ocorra pelo substrato, que é de InP e transparente ao comprimento de onda emitido. O confinamento radial é obtido depositando-se uma camada metálica de alta condutividade (que introduz o mínimo possível de perdas ao modo óptico) ao redor do semicondutor. Entre o metal e o semicondutor há uma camada de material isolante (neste caso dióxido de silício) para diminuir a sobreposição do campo eletromagnético confinado com a camada metálica, que insere perdas ao modo. Dessa maneira o metal serve como uma camada de alta refletividade para aumentar o confinamento bidimensional do modo.

Duas geometrias podem ser utilizadas para formar as cavidades ressonantes desse tipo de nanolaser: cilíndrica e retangular. No caso da geometria cilíndrica, usam-se nanodiscos com modos ressonantes do tipo *whispering gallery* [27]. Já na retangular, usam-se cavidades retangulares cujos modos ressonantes são Fabry-Perot [28]. Um exemplo de um nanolaser desse tipo com cavidade cilíndrica é mostrado na figura 1.2 (d). Alguns desses dispositivos já operam de modo contínuo a temperatura ambiente e com bombeio eletrônico, porém ainda com uma

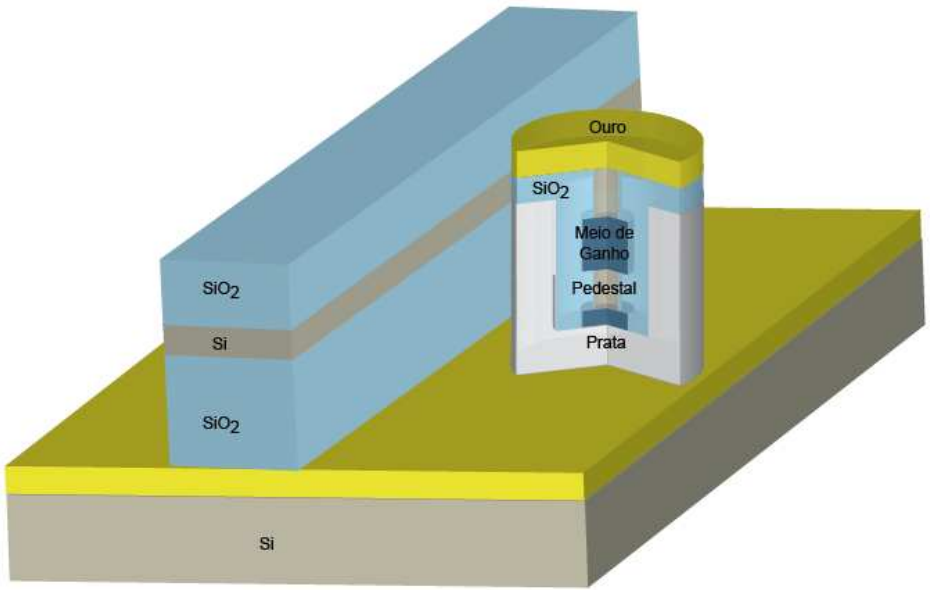
corrente de limiar alta para o tamanho das cavidades, da ordem de mA, o que mostra que a eficiência de operação ainda é baixa. Uma alta corrente injetada em uma cavidade nanométrica gera um intenso aquecimento da cavidade que conforme reportado em diversos casos, deteriora o nanolaser rapidamente até o momento em que ele deixa de funcionar [26].

1.2 Nossa contribuição

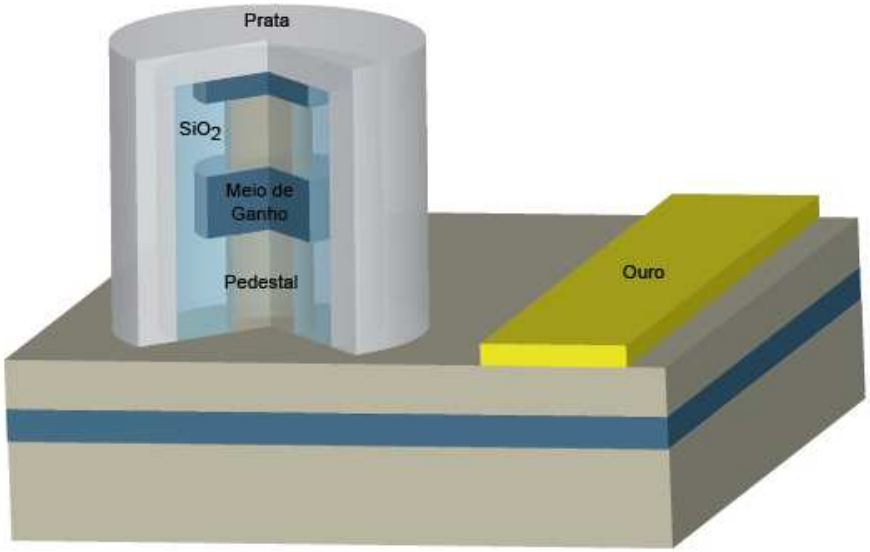
Essa cavidade, metálica-dielétrica, chamou a nossa atenção e por isso foi escolhida como o nanolaser a ser pesquisado e desenvolvido nessa tese. Em termos de suas dimensões ela se encontra entre os lasers de cristal fotônico e os lasers de nanofios. Não apresenta um ótimo fator de qualidade, que é ao menos uma ordem de grandeza menor que num cristal fotônico. Não é tão reduzido quanto um nanofio, mas permite injeção de corrente elétrica de maneira aceitável. Outra vantagem desse dispositivo é a alta capacidade de dissipação térmica, já que uma quantidade de metal razoável pode ser depositada ao redor da cavidade (centenas de nanômetros).

O nanolaser envolto por camada metálica-dielétrica mais eficiente até então foi reportado por K. Ding, *et.al.*, ainda neste ano de 2013 [29]. O nanolaser apresentou uma corrente de limiar de 1 mA e largura de linha de 0.5 nm em operação contínua a temperatura ambiente. Porém, esse nanolaser ainda apresenta alguns problemas: uma de suas dimensões, contando que o metal faz parte dela, possui aproximadamente 2 μm de comprimento e o nanolaser deixou de funcionar após as medidas pois se deteriorou devido ao aquecimento gerado pela injeção de corrente elétrica. Para solucionar esses problemas (reduzir o tamanho e diminuir o auto-aquecimento) os autores sugerem substituir o meio de ganho, que é um *bulk* de InGaAs, por múltiplos poços quânticos. Com isso, o meio ativo proveria mais ganho e a corrente de limiar seria menor. Entretanto, nenhum laser desse tipo com um meio ativo de poços quânticos foi demonstrado.

Nossa proposta foi então realizar uma comparação entre nanolasers de semicondutor com meio de ganho *bulk* e de múltiplos poços quânticos, com emissão na região de 1550 nm (banda-C) e com bombeio eletrônico operando à temperatura ambiente. O objetivo é entender qual o efeito da escolha do meio de ganho no desempenho de um nanolaser, e saber se realmente os poços quânticos são a solução do problema, já que até então nenhum nanolaser com poços quânticos e bombeio eletrônico foi demonstrado. Como cavidade, escolhemos um ressonador do tipo *nanopatch* proposto por Q. Ding et. al., pois possui uma alta capacidade de integração planar além de um alto coeficiente de acoplamento da emissão espontânea com o modo ressonante, possibilitando aplicações em modulação ultrarrápida [30]. A redução da distância entre os eletrodos da cavidade cria um campo elétrico muito alto, que diminui a capacitância parasita e possibilita um aumento da resposta do dispositivo. Uma ilustração desse dispositivo integrado a um guia de onda encontra-se na figura 1.3.



(a)



(b)

Fig. 1.3: (a) Ilustração de um *nanopatch* integrado a um guia de onda. (b) Ilustração de um nanolaser de semicondutor metálico-dielétrico.

Os meios de ganho constituem a região intrínseca de uma dupla heteroestrutura *P-i-N* otimizada para injeção de portadores. As dimensões do dispositivo serão calculadas minimizando a corrente de limiar e a potência dissipada pelos dispositivos. Tal projeto levando em consideração a injeção eletrônica além do confinamento do modo eletromagnético até então não

havia sido realizada para nanolasers. Mostraremos a fabricação e caracterização dos dispositivos, realizadas em um doutorado sanduíche na *University of California at San Diego* (UCSD), em cooperação com o grupo do Prof. Yeshaiahu Fainman. De antemão, os resultados obtidos mostram que o dispositivo com meio de ganho *bulk* é de fato um laser enquanto que o com múltiplos poços quânticos possui apenas emissão espontânea e não atinge seu limiar. Na tese explicaremos o porquê de tal comportamento, que está relacionado com a população dos estados das barreiras dos poços quânticos. Esse efeito, chamado de fuga de portadores para a barreira não havia sido explorado por nenhum pesquisador da área e explica porque ainda não há nanolasers com poços quânticos e bombeio eletrônico [31].

Mostraremos a fabricação de dois conjuntos de dispositivos: nanolasers metálico-dielétricos convencionais para verificar o efeito do meio de ganho no desempenho de um nanolaser e a tentativa de fabricação de um *nanopatch,* dispositivos ilustrados nas figuras 1.3 (b) e (a), respectivamente. A diferença entre os dois dispositivos é que enquanto a emissão do nanolaser é através do substrato transparente ao comprimento de onde emitido, o nanopatch tem uma emissão planar com simetria azimutal devido à lacuna entre o ouro e a prata. Até então nenhum *nanopatch* com bombeio eletrônico foi demonstrado à temperatura ambiente, e mostraremos os avanços e dificuldades que surgem na fabricação do mesmo.

Essa tese seguirá na seguinte ordem: no capítulo 2 tratarei da otimização de uma cavidade ressonante considerando os dois meios de ganho em questão: *bulk* e poços quânticos. Essa otimização é baseada no fator de qualidade da cavidade. O cálculo das propriedades do meio de ganho será descrito no capítulo 3. No capítulo 4, unindo as propriedades do modo óptico com as propriedades do meio de ganho, solucionaremos, auto-consistentemente, as equações de Schroedinger, de Poisson e de transporte para otimizarmos as cavidades com respeito à injeção de portadores, portanto, tentando reduzir a corrente de limiar e a potência consumida pelo dispositivo. No capítulo 5 simularemos as equações de taxa para comparar o desempenho dos dois nanolasers. No capítulo 6 mostraremos a fabricação do dispositivo e no capítulo 7 a caracterização. No capítulo 8 consta a conclusão desse trabalho e perspectivas futuras.

2. Confinamento da luz em cavidades com dimensões sub-λ

Neste segundo capítulo trataremos do primeiro ponto importante a ser considerado para a obtenção de um nanolaser: uma cavidade ressonante com dimensões reais iguais ou menores que seu comprimento de onda ressonante no vácuo, λ.

Primeiro discutiremos o problema do confinamento da luz (comparando com o confinamento de elétrons) e mostraremos a solução geral da equação de onda (Equação de Helmholtz) em coordenadas cilíndricas, pois apenas trataremos desse tipo de geometria nesta tese [32]. Na sequência discutiremos os problemas de reduzir as dimensões da cavidade para obter um confinamento de luz abaixo do limite da difração [8]. Apresentaremos a solução para esse problema através do uso de metais com alta condutividade, como Al, Au e Ag. Por último, escolheremos um tipo de cavidade para ser projetada. Conforme escrito na introdução, consideramos dois possíveis meios de ganho a serem inseridos na cavidade, um com múltiplos poços quânticos e outro com *bulk*. Concluiremos mostrando que o design da cavidade possui algumas dependências com o meio de ganho.

Apesar de apresentarmos e discutirmos aqui as soluções analíticas, toda a análise foi realizada utilizando o software COMSOL, baseado em Elementos Finitos no domínio da frequência [33]. A ideia de discutir brevemente as soluções analíticas é ter uma melhor compreensão e previsão acerca das soluções a serem obtidas.

2.1 Confinamento da luz em meios dielétricos

O confinamento de elétrons e fótons é dado pela solução da equação de Helmholtz para um campo Ψ, que pode ser escalar, no caso de elétrons (Equação de Schroedinger), ou vetorial, no caso de fótons (Equação de Onda) [1]:

$$(\nabla^2 + \Pi)\Psi = 0 \qquad (2.1)$$

onde Π representa um potencial, também escalar ou vetorial. A solução é oscilatória, no caso de $\Pi > 0$, ou possui um decaimento/crescimento monotônico, no caso de $\Pi < 0$. Para o confinamento de elétrons, $\Pi = V - E$, onde V é a altura de um poço de potencial arbitrário e E a energia do elétron confinado. Assim, se a energia E do elétron for menor que o potencial V, o elétron é confinado num sistema não dissipativo. No caso de não haver potencial para confinamento, a solução é uma onda plana propagando no espaço livre com energia E. Para o confinamento de fótons, $\Pi = \frac{n^2\omega^2}{c^2}$, onde n é o índice de refração do meio, ω a frequência do fóton e c a velocidade da luz. Neste caso todas as soluções do problema são oscilatórias, o que significa que a princípio não há como confinar a luz. Porém, se inserirmos o fóton em uma cavidade metálica de condutividade σ, a equação de Helmholtz fica:

$$\left(\nabla^2 + \frac{n^2\omega^2}{c^2} - i\sigma\omega\right)\vec{\mathrm{E}} = \left(\nabla^2 + \frac{n_{comp}^2\omega^2}{c^2}\right)\vec{E} = 0 \qquad (2.2)$$

onde resolvemos para um campo elétrico $\vec{E}$. Agora que o índice de refração passou a ser complexo é possível obter tanto soluções estacionárias bem como decaimentos exponenciais e, portanto, existe confinamento de fótons. Esse sistema sempre será dissipativo devido ao efeito Joule que ocorre quando a onda penetra na região com condutividade σ [15]. Concluímos que a princípio é impossível confinar fótons tridimensionalmente sem dissipação, a não ser que confinamento se dê através de um defeito no centro de um cristal fotônico tridimensional infinito, análogo a uma rede cristalina. Entretanto, se considerarmos uma cavidade de uma ou de duas dimensões, como um guia de onda dielétrico, com um campo propagante na direção z dado por $\vec{E} = E(x,y)e^{ikz}\hat{z}$, a equação de onda terá a forma:

$$\left(\nabla_t^2 + \frac{n^2\omega^2}{c^2} - k^2\right)\vec{\mathrm{E}} = 0 \qquad (2.3)$$

onde k é a constante de propagação efetiva da onda. Assim, é possível confinar um campo eletromagnético, sem dissipação, na direção transversal à propagação da onda.

2.2 Confinamento da luz em guias curvos

E se fosse possível curvar esse guia de ondas? Neste caso poderíamos curvar o guia de ondas até que as suas duas extremidades se encontrassem formando uma cavidade ressonante no formato de um anel, conforme ilustrado na figura 2.1 (a). Como as ondas propagantes são funções oscilatórias, a partir do momento que elas interagissem ao longo do caminho do anel, é possível obter um estado estacionário devido à interferência construtiva entre uma onda propagante com ela mesma. A condição de interferência é então dada por:

$$k2\pi R = M'2\pi \qquad (2.4)$$

onde k ainda é a constante de propagação do modo, R é o raio do anel e M' é um número inteiro, que representa as múltiplas ordens de interferência construtiva ao longo da direção azimutal. Neste caso, a condição de ressonância (interferência construtiva) é:

$$k = \frac{M\prime}{R} \qquad (2.5)$$

Com essa curvatura, a forma espacial do modo confinado não é afetada significativamente em comparação com o modo confinado em um guia retangular. Entretanto, as frentes de onda associadas com o modo passam a girar ao redor do centro de curvatura do anel. A única maneira de o modo continuar existindo com a curvatura é que a fase da frente de onda que está fora da região dielétrica viaje com uma velocidade maior do que a frente de onda que está dentro da região dielétrica. Para certa distância do guia curvado, a única maneira dessa condição ser satisfeita é a frente de onda viajar com uma velocidade local maior que a da luz. Já

que essa condição é fisicamente impossível, o campo além desse ponto passa a ser um modo de radiação para o espaço livre e temos uma perda inserida no modo confinado devido à curvatura do guia [34].

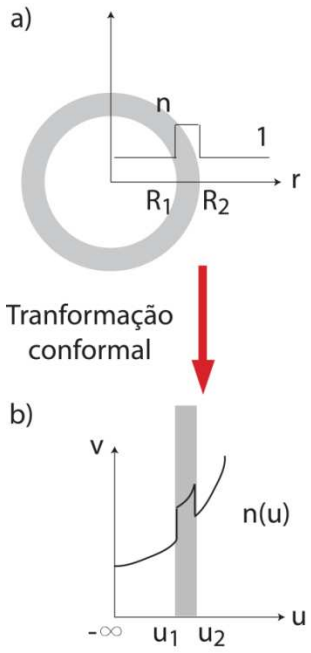


Fig. 2.1: (a) Vista superior de um ressonador em anel com o perfil do índice de refração e (b) a vista da geometria transformada com o novo perfil de índice de refração.

2.3 O confinamento e as perdas vistos após um mapeamento conformal

Podemos visualizar de uma maneira bem interessante o confinamento e as perdas dos modos em um guia de onda curvo se aplicarmos uma transformação conformal do tipo $u + iv = f(\rho, \theta) = Rln\left(\frac{\rho e^{i\theta}}{R}\right)$ na equação de Helmholtz para o campo transverso, equação 2.3 [35,36]. Com essa transformação, o problema é transformado de uma geometria descrita em coordenadas polares (desconsiderando o eixo z) para uma geometria retangular, cujas coordenadas são:

$$u = Rln\left(\frac{\rho}{R}\right) \qquad (2.6\text{-}1)$$

$$v = \theta R \qquad (2.6\text{-}2)$$

Essa nova geometria é análoga a um guia de onda *slab* assimétrico na direção $\hat{v}$ com um perfil de índice de refração variável dado por:

$$n(u) = ne^{\frac{u}{R}}, \quad \rho \geq R_1 \; e \; \rho \leq R_2 \qquad (2.7\text{-}1)$$

$$n(u) = e^{\frac{u}{R}}, \quad \rho \leq R_1 \; e \; \rho \geq R_2 \qquad (2.7\text{-}2)$$

Neste caso, teremos um índice de refração transformado para cada região, as regiões externas ao anel e a região do anel, onde o valor de R na expressão 2.7 depende se estamos do lado interno ou externo do anel. Para a região interna do anel o índice de refração é n, do dielétrico, e para a região externa ao anel o índice de refração é 1, que seria o ar. A figura 2.1 (b) mostra uma ilustração de como seria a nova geometria, em cinza, e o respectivo perfil de índice de refração efetivo, representado pela linha preta.

Como esse sistema continua dissipativo após a transformação, vamos permitir que o autovalor M' seja um número complexo. Neste caso, $M' = M + i\alpha R$, onde α são as perdas por propagação no guia curvo. Assim, as soluções dos campos no espaço real e no espaço transformado são respectivamente:

$$\Psi(r,\theta) = F(r)e^{iM\theta}e^{-\alpha R\theta} \qquad (2.8\text{-}1)$$

$$\Omega(u,v) = H(u)e^{i\frac{M}{R}v}e^{-\alpha v} \qquad (2.8\text{-}2)$$

Ou seja, há uma onda propagando na direção $\hat{v}$ com constante de propagação $k_v = {}^{M}/_{R}$, onde M é um número inteiro que garante uma solução estacionária na direção $\hat{\theta}$ com uma perda por propagação α. Esse problema é análogo ao confinamento de um elétron em uma barreira de potencial finita. O poço de potencial encontra-se entre u_1 e u_2 na figura 2.1 (b). Fora dessa região há uma barreira de potencial pela qual o fotón pode tunelar, o que explica a perda de propagação α que surge com a curvatura do guia de ondas. A solução estacionária na direção u é então dada pela equação de Helmholtz no espaço transformado:

$$\left(\frac{\partial}{\partial u^2} + \frac{\omega^2}{c^2}\overline{n}(u)^2\right)H(u) = 0 \qquad (2.9)$$

onde

$$\overline{n}(u) = \sqrt{n^2(u) - \left[\frac{c}{\omega}\left(\frac{M}{R} - i\alpha\right)\right]^2} \qquad (2.10)$$

Resolvendo a expressão 2.9 para um campo $H(u)$ com o índice de refração efetivo $\overline{n}(u)$ obtemos a solução de um modo confinado de ordem azimutal M. Na expressão 2.10, $n(u)$ é o índice de refração do anel após passar pela transformação conformal e o segundo termo dentro da raiz é o vetor de propagação da onda. O índice de refração complexo indica a perda na propagação que, de fato, é devido ao tunelamento da onda eletromagnética na barreira de potencial.

2.4 Microdiscos: uma extensão de ressonadores em anel

A cavidade que trataremos nesta tese é um microdisco de semicondutor, uma extensão natural das cavidades ressonantes em anel, na qual toda a região interna é preenchida por um material de índice de refração também *n*. Podemos novamente aplicar a transformação conformal descrita na seção anterior para obter uma geometria análoga a um guia de onda *slab* assimétrico na direção $\hat{v}$ com um perfil de índice de refração variável dado por:

$$n(u) = ne^{\frac{u}{R}}, \qquad \rho \leq R \tag{2.11-1}$$

$$n(u) = e^{\frac{u}{R}}, \qquad \rho > R \tag{2.11-2}$$

Um esquema da geometria antes e depois da transformação encontra-se na figura 2.2 (a), junto com o novo perfil de índice de refração *n(u)*. A figura 2.2 (b) mostra a visão superior de um microdisco e um típico modo de galeria sussurrante, que são modos muito parecidos com os confinados em um guia de onda curvo, que ficam praticamente na borda da cavidade. A figura 2.2 (b) também mostra o potencial radial efetivo associado à cavidade e as regiões onde o campo é um modo ligado (confinado), evanescente ou de radiação para o espaço livre.

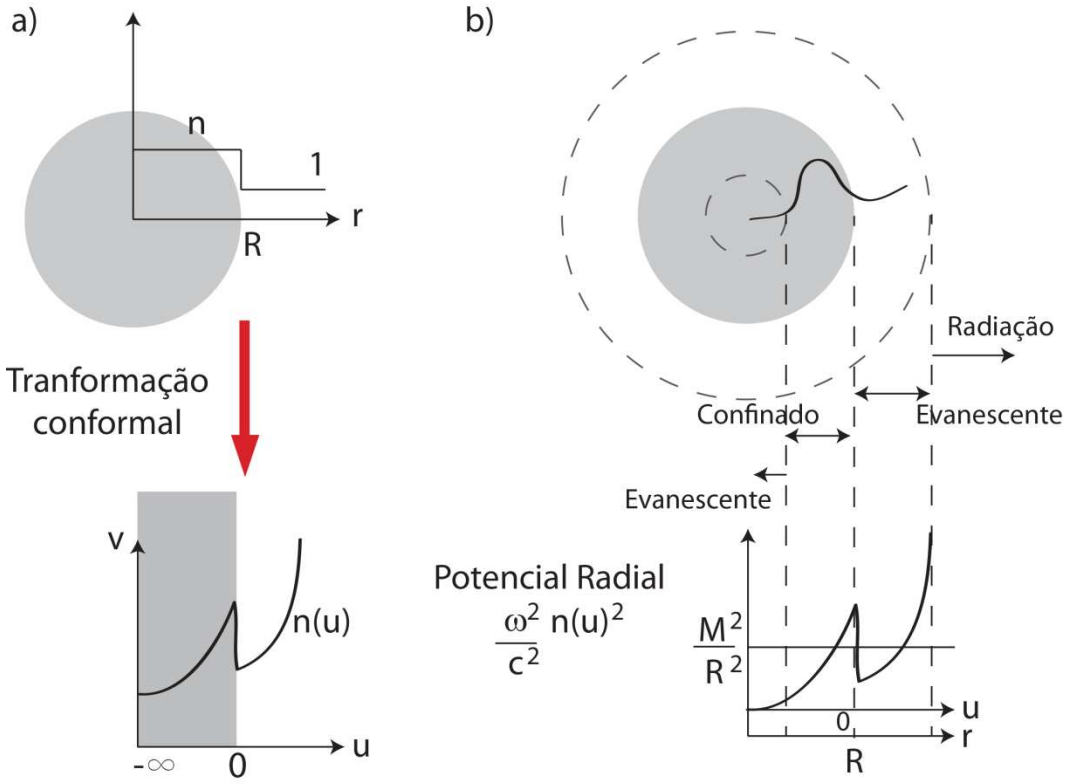


Fig. 2.2: (a) Vista superior de um microdisco com o perfil do índice de refração e a vista da geometria transformada com o novo perfil de índice de refração. (b) Vista superior de um microdisco mostrando o esquema de um modo confinado. Abaixo o potencial radial efetivo e as respectivas regiões do campo evanescente, confinamento e de modos de radiação no espaço livre.

Um fóton é confinado nessa cavidade se o valor $k_V = M/R$ possuir um valor contido dentro da barreira de potencial radial. As perdas por radiação associadas com esses modos podem então ser entendidas fisicamente como o tunelamento do campo confinado através de uma barreira de potencial definida entre a borda do disco e uma região de radiação, conforme ilustra a figura 2.2 (b). Quanto maior o raio do disco, mais fundo e largo é esse potencial radial efetivo e consequentemente mais larga é a barreira a ser atravessada por tunelamento. Dessa forma, quanto maior o raio das cavidades de disco, maior a quantidade de modos confinados e menores as perdas por radiação devido ao tunelamento através da barreira.

2.5 Nanodiscos: reduzindo a dimensão da cavidade

Ao reduzir o raio de um microdisco, pensando no potencial efetivo radial, estamos diminuindo a altura e a largura do poço de potencial, consequentemente reduzindo o número de modos confinados possíveis. Além disso, a barreira de tunelamento é cada vez mais fina, diminuindo o confinamento do modo, como ilustrado na barreira de potencial da figura 2.3 (a). Assim, a contribuição dos modos de radiação é cada vez maior e o modo passa a ser cada vez mais espalhado espacialmente, conforme a simulação de um modo confinado em uma cavidade de 460 nm de raio na figura 2.3 (a). Com isso podemos ver o aumento da distribuição espacial do modo confinado fora da região dielétrica.

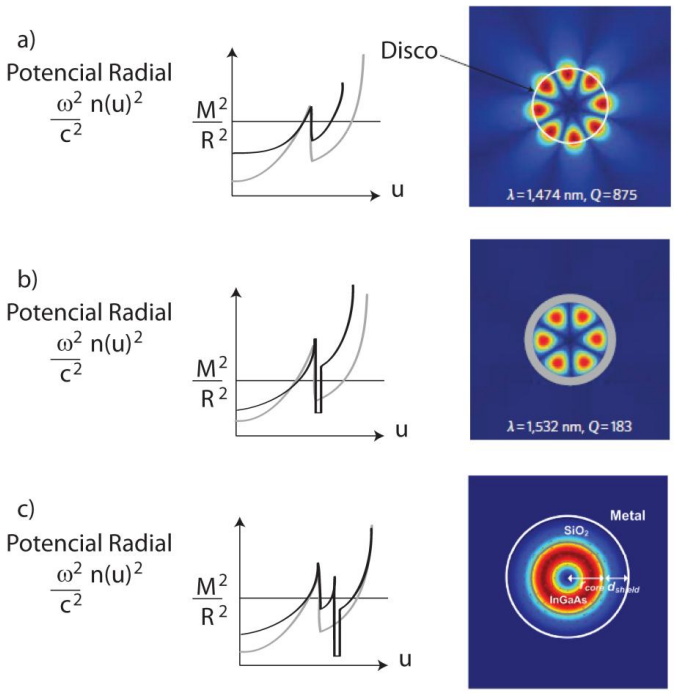


Fig. 2.3: Esquema do potencial radial e do modo confinado simulado para um a) nanodisco, b) um nanodisco envolto por metal e c) um nanodisco envolto por um isolante seguido de um metal. Neste caso o disco tem raio de 460 nm, o metal é alumínio e o isolante dióxido de silício [27]. A linha cinza no esquema do potencial radial representa o potencial de um disco maior, como o ilustrado na figura 2.2 (b).

Esse espalhamento espacial do modo tem duas implicações importantes: a redução do confinamento implica no aumento das perdas de radiação e, portanto, a necessidade de mais ganho material para atingir o limiar de um suposto laser feito com essa cavidade (supondo que o material da cavidade permita inversão de população); além disso, o espalhamento do modo faz com que a densidade de integração diminua já que uma fonte coerente de luz pode acabar interagindo com outra fonte coerente adjacente.

Uma solução encontrada para aumentar o confinamento da luz em nanocavidades é utilizar metais ao redor da cavidade dielétrica. Os metais apresentam a parte real do índice de refração entre 0 e 1 e portanto o coeficiente de refletividade com uma interface dielétrica é alto. Isso cria uma barreira de potencial que aumenta o confinamento da partícula no potencial radial, conforme visto na figura 2.3 (b). Porém, não é qualquer metal que pode ser utilizado. A parte imaginária do índice de refração dos metais é negativa e muitas vezes grande, o que significa que a absorção (amortecimento) da luz em um meio metálico é muito alta. Logo, procura-se utilizar metais com alta condutividade (baixo fator de amortecimento). Os metais que já foram utilizados na fabricação de nanolasers, da menor para maior condutividade são: alumínio, ouro e prata, pois possuem as menores perdas no infravermelho [37]. O efeito de inserir a camada metálica no confinamento é mostrado na figura 2.3 (b), onde vemos um modo eletromagnético confinado quase que completamente. Infelizmente, mesmo com a alta condutividade desses metais, a dissipação de energia no metal é muito grande devido ao efeito Joule, e tais dispositivos tornam-se inviáveis, já que a perda por dissipação faz com que a corrente de limiar aumente ainda mais. Além disso, os efeitos de auto-aquecimento aumentam.

Para evitar esse problema, Nezdah, *et al.*, propõe inserir um isolante entre o dielétrico e a camada metálica [38]. Através da escolha correta da espessura da camada isolante ele encontra um ponto de ótimo uso da propriedade refletora do metal, diminuindo os efeitos da dissipação devido à penetração da luz na camada metálica, conforme mostra o esquema do potencial radial efetivo na figura 2.3 (c). O modo confinado no meio dielétrico com o uso de uma camada isolante seguida de uma metálica também se encontra na figura 2.3 (c). A dissipação do modo por radiação é reduzida no mesmo tempo que a dissipação por efeito Joule. A figura 2.3 contém apenas modos confinados com ordem azimutal 0, porém podem apresentar modos confinados de maior ordem azimutal. Esse é o tipo de cavidade que otimizaremos para inserir um meio de ganho e ser um nanolaser. Tal tipo de cavidade é chamada de cavidade metálica-dielétrica.

2.6 Confinamento da luz em cavidades de micro e nanodiscos: solução analítica

Novamente, o tipo de cavidade na qual estamos interessados para o projeto de um nanolaser é do tipo nanodisco, conforme ilustrado na figura 2.4.

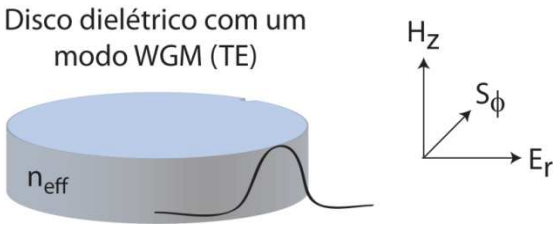


Fig. 2.4: Esquema de uma cavidade ressonante cilíndrica de raio *R* e índice de refração n_{eff} com a distribuição radial de um modo WGM para a polarização TE.

A solução dos campos confinados em um disco dielétrico nada mais é do que uma aproximação bidimensional da solução dos campos confinados em uma cavidade ressonante cilíndrica, de raio *R* e comprimento *L*, quando consideramos que $R >> L$. Neste caso, a solução no plano do disco é dada pela solução do problema de um guia de onda *slab* simétrico com três camadas: a camada que forma o disco no meio de duas camadas de ar ou de algum meio dielétrico com índice de refração menor que o do disco. O índice de refração do disco, ao resolvermos o problema bidimensional, será então n_{eff}, o índice de refração efetivo obtido ao resolver o problema do guia de onda *slab* simétrico através do método do índice efetivo [1]. Esse índice de refração efetivo pode ser calculado para um modo transversal elétrico (TE) e/ou para um modo transversal magnético (TM). Por isso, escrevemos o índice de refração como $n_{eff_{TE,TM}}$. No caso do *slab*, a polarização TE indica que o campo elétrico só tem uma componente na direção *x*, que é a direção paralela à interface entre os materiais, enquanto que o campo magnético possui componente apenas nas outras duas direções. Já a polarização TM indica que o campo magnético só tem uma componente na direção *x*, enquanto que o campo elétrico possui componente apenas nas outras duas direções. Reduzimos então uma estrutura 3D para uma 2D.

Depois de resolver o guia *slab* simétrico e obter o índice de refração efetivo para determinada polarização, voltamos ao caso do disco. Dada a simetria do problema, utilizaremos coordenadas cilíndricas, nas quais os campos são orientados nas componentes, $\hat{r}, \hat{\varphi}\ e\ \hat{z}$, também descritas na figura 2.4. Há duas possíveis polarizações para esses modos, TE ($H_z \parallel \hat{z}\ e\ E_r \parallel \hat{r}$) e TM ($E_z \parallel \hat{z}\ e\ H_r \parallel \hat{r}$) [39]. Devemos notar que a polarização TE no caso do disco significa que temos um modo com polarização TM confinado no *slab* e vice-versa caso a polarização do modo no disco seja TM. Isso porque na aproximação bidimensional utilizada para resolver o disco a interface entre diferentes materiais está na parede do disco. A equação de onda em coordenadas cilíndricas para o caso TE é então:

$$\left(\frac{\partial}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{{n_{eff_{TM}}}^2 \omega^2}{c^2}\right)\Psi(r,\varphi) = 0 \qquad (2.12)$$

Aplicando o método de separação de variáveis, a equação 2.12 pode ser separada em duas, uma para a dependência radial e outra para a dependência azimutal do campo [40]. A equação azimutal é da forma:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + M^2\right)\Phi(\varphi) = 0 \qquad (2.13)$$

cuja solução é oscilatória e descrita através de exponenciais complexas:

$$\Phi(\varphi) = e^{\pm iM\varphi} \qquad (2.14)$$

Neste caso M é um número inteiro que representa o número de ciclos de uma onda confinada propagando na direção azimutal $\hat{\varphi}$. Mais do que isso, ao inserirmos o resultado da equação 2.14 na equação 2.12, vemos que M é grandeza que conecta a equação radial com a equação azimutal, conforme já demonstrava a expressão (2.4):

$$\left(\frac{\partial}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{{n_{eff_{TM}}}^2\omega^2}{c^2} - \frac{M^2}{r^2}\right)F(r) = 0 \qquad (2.15)$$

A equação 2.15 mostra que a dependência radial do campo é uma equação de Bessel, cujas soluções são funções de Bessel [12]. Como nossa cavidade, formada pelo meio dielétrico, estará envolta por uma camada metálica, em uma primeira aproximação podemos utilizar as mesmas condições de contorno de uma cavidade ressonante formada por paredes metálicas, desconsiderando a penetração da onda eletromagnética no metal. Neste caso, o campo magnético normal à interface e o campo elétrico tangencial à interface devem ser nulos. Assim, a solução radial do problema é dada por:

$$F(r < R) = A_{M,N}J_M\left(\gamma_{M,N}(k)r\right) \qquad (2.16\text{-}1)$$
$$F(r \geq R) = 0 \qquad (2.16\text{-}2)$$

onde $\gamma_{M,N}(k)$ é o vetor da onda propagando dentro da cavidade e N é a ordem radial da função de Bessel $J_M(r)$. O vetor de onda é igual a:

$$\gamma^2 = \frac{{n_{eff_{TM}}}^2\omega^2}{c^2} = \frac{X_{M,N}^2}{R^2} \qquad (2.17)$$

e $X_{M,N}$ é o N-ésimo zero da função de Bessel $J_M(r)$. Assim, as frequências de ressonância da cavidade são descritas por:

$$\omega_{M,N}^{TE} = \frac{c}{n_{eff_{TM}}}\frac{X_{M,N}}{R} \qquad (2.18)$$

Unindo a solução radial da equação 2.16-1 com a solução azimutal da equação 2.14, obtemos uma solução geral bem simples para o problema:

$$\Psi(r,\varphi) = A_{M,N}J_M\left(\gamma_{M,N}(k)r\right)e^{\pm iM\varphi} \qquad (2.19)$$

No caso de cavidades de microdisco, sem uma camada metálica ao redor, as soluções para $N \neq 1$ apresentam perdas muito altas e são descartadas. Resta então a solução para $N = 1$,

cujas perdas são muito menores. Essas soluções têm como característica ficarem distribuídas espacialmente perto da borda do disco e por isso são conhecidas como modos de galerias sussurrantes (WGM – do inglês, *Whispering Gallery Modes*) [41]. Quanto maior a ordem azimutal *M*, mais perto da borda está o modo confinado. No caso de nossas cavidades, envoltas por um meio metálico, podem existir soluções para $N \neq 1$ com perdas baixas também, e portanto não podemos desconsiderar tais soluções.

De fato. o problema que precisamos resolver é um pouco mais complexo, pois envolve a cavidade semicondutora envolta por uma camada isolante seguida de uma camada metálica. Além disso, nosso disco está suspenso por pedestais de InP, deixando parte da cavidade confinada por outro semicondutor e parte confinada pelo isolante. Mais ainda, há um anel ao redor da cavidade sem a camada metálica, para extração da luz emitida / confinada, causando uma assimetria no problema, o que torna a solução analítica ainda mais complicada. Por esses motivos, resolveremos o problema computacionalmente através do método de elementos finitos. Ainda assim, apesar de resolver o problema do confinamento computacionalmente, achamos válido chegar até este ponto para demonstrar o tipo de solução dos modos confinados em cavidades de microdisco.

2.7 Grandezas relevantes

Ao simular os modos confinados nas nanocavidades, três parâmetros são relevantes: o comprimento de onda ressonante λ, o fator de qualidade Q e o fator de confinamento Γ.

Lembremos que a cavidade tem a luz confinada em um meio dielétrico com ganho material que permite inversão de população e emissão coerente de radiação. Assim, devemos procurar modos cujo λ está dentro da região de ganho do material. Com a redução da cavidade, o espaçamento entre os λ's aumenta cada vez mais devido à dependência direta com o número azimutal *M*.

O fator de qualidade Q é formalmente definido como a razão entre a energia circulando dentro de um ressonador com a energia perdida a cada ciclo, e é comumente escrito como [32]:

$$Q = \frac{\omega}{\Delta\omega} \qquad (2.20)$$

onde ω é a frequência de ressonância e $\Delta\omega$ a largura de linha da ressonância calculada à meia altura. Tal aproximação é válida para altos fatores de qualidade e é adequada ao nosso caso. Quanto menor a frequência de ressonância, maior é o comprimento de onda, e a dissipação aumenta. Quanto menor a largura de linha, mais localizado espacialmente é o modo, portanto maior o confinamento o que implica em um ganho de limiar menor para obter inversão de população.

O fator de confinamento representa a fração do modo eletromagnético que está contida no meio dielétrico com ganho material e é definido como [24]:

$$\Gamma = \frac{\iiint_g \varepsilon(\vec{r})|E(\vec{r})|^2 dV}{\iiint \varepsilon(\vec{r})|E(\vec{r})|^2 dV} \quad (2.21)$$

Quanto maior o fator de confinamento, maior a interação da radiação com a matéria e, consequentemente, menor a corrente necessária para iniciar a emissão estimulada de radiação.

De fato o que otimizaremos é o Q, pois para um mesmo meio de ganho a variação de Γ não é tão significativa, conforme mostraremos no final deste capítulo.

2.8 Como simular um sistema dissipativo com elementos finitos?

A dificuldade de realizar simulações com elemento finitos é a escolha do domínio espacial e as condições de contorno impostas pelas suas extremidades. Para poder obter as soluções, faz-se uso de regiões chamadas de PML (do inglês, *Perfect Matched Layer*). Em uma região distante de alguns λ's ressonantes da cavidade, inserimos uma camada cuja primeira interface possui reflexão praticamente nula. A luz entra então em uma região com coeficiente de absorção elevado e encontra a segunda interface, que é um refletor perfeito. Assim, ela é absorvida novamente na região interna da PML. Dessa forma, qualquer modo de radiação não afeta a busca pela solução do modo estacionário confinado na cavidade. Passamos então às simulações.

2.9 Otimização da cavidade: parâmetros constantes e parâmetros livres.

A cavidade a ser otimizada encontra-se na figura 2.5, junto com a distribuição espacial do campo elétrico característica para tal design.

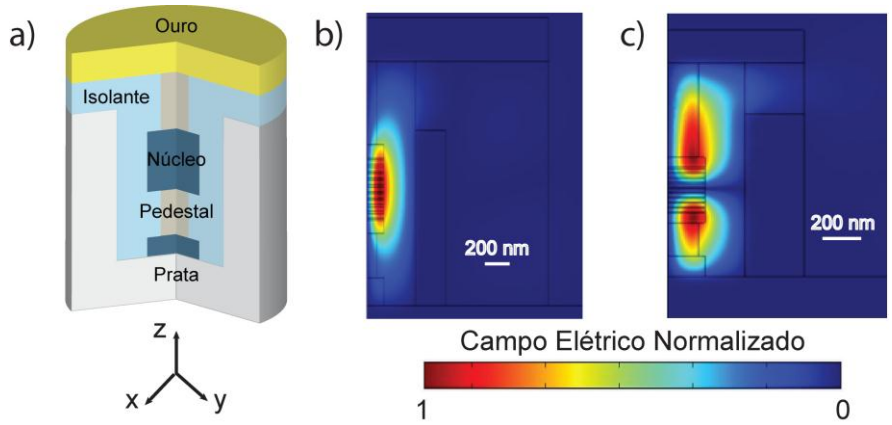


Fig. 2.5: (a) Esquema da cavidade ressonante. Corte transversal da metade do dispositivo com a distribuição espacial do campo elétrico para o (b) modo ressonante fundamental TE_{011} e o (c) modo ressonante de segunda ordem TE_{012}. Com relação ao mapa de cores, a cor vermelha indica o máximo do campo elétrico normalizado para cada um dos casos.

A cavidade no esquema da figura 2.5 (a) é formada por um núcleo que é o meio de ganho suspenso por pedestais de InP. O meio de ganho é um *bulk* de InGaAs ou uma sequência de 10 poços quânticos de InGaAsP / InGaAsP (os detalhes do meio de ganho serão descritos no capítulo 3). A parte superior do pedestal, acima do núcleo, é dopada tipo *p* enquanto que a parte inferior, abaixo do núcleo, é dopada tipo *n*. Os materiais dielétricos são envoltos por uma camada isolante de dióxido de silício para isolamento e para controlar o quanto do modo óptico é absorvido / refletido pelo metal. Neste caso, o metal utilizado ao redor da cavidade é a prata e no topo o ouro. Os metais depositados ao redor da cavidade também suprimem a radiação eletromagnética para o espaço livre, transformando uma cavidade com vazamento (*leaky cavity* – do inglês) em um ressonador óptico de alto confinamento e menor do que o comprimento de onda associado, cujas soluções são qualitativamente descritas na seção 2.6 [42,43]. Na verdade, na região de InGaAsP abaixo do pedestal inferior também existe um fina camada de ouro. Essa camada é necessária para formação de um contato ôhmico para injeção eficiente de portadores ao longo da heteroestrutura que esses materiais formam. A luz nesse tipo de cavidade é emitida pela abertura do dióxido de silício que separa o eletrodo de ouro da camada de prata.

O interesse e a escolha dessa cavidade, chamada de ressonador *nanopatch*, é uma proposta feita por Q. Dang, *et al.* onde a cavidade contém uma abertura no metal ao seu redor para emissão de fótons [30]. No artigo, os autores calculam o efeito de deslocar o pilar formado com os dielétricos com respeito ao centro do eletrodo circular de ouro. Em especial, o efeito é muito grande na radiação distante (*far-field*) emitida pela cavidade, onde os autores mostraram que é possível direcionar a luz (devido à quebra da simetria azimutal) e acoplar a luz a um guia de ondas posicionado / integrado próximo ao nanolaser. Mas nesta tese não trataremos do acoplamento da luz em outra cavidade. Essa é apenas uma motivação para a escolha do um design de uma nanocavidade.

Em relação às dimensões da cavidade, utilizaremos as notações e valores mostrados na figura 2.6, que contém um esquema da cavidade proposta e as respectivas dimensões.

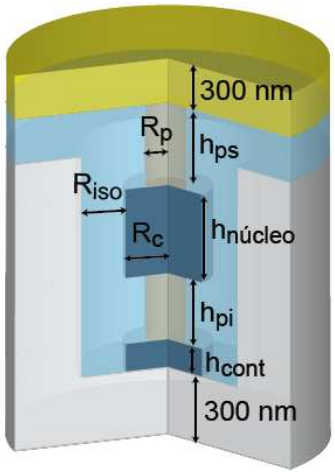


Fig. 2.6: Esquema de um corte da cavidade com as respectivas dimensões.

Primeiro queremos comentar sobre os parâmetros que foram fixados: a espessura dos metais, a espessura do meio ativo e a altura do pilar de dielétrico. A menor dimensão que os filmes de metal podem ter é a da profundidade de penetração da luz (*skin depth*) para que a luz não escape da cavidade. Porém, o metal não pode ser tão espesso, senão uma futura engenharia de campo distante se tornaria mais complicada, já que quanto mais espesso o metal, maior o deslocamento do pilar para conseguir direcionar a luz emitida pela cavidade [30]. Isso porque a região considerada de campo distante é proporcional ao diâmetro da maior dimensão da antena. Assim, escolhemos como espessura tanto do ouro como da prata o valor de 300 nm, pois é o valor da espessura de um bom contato ôhmico comumente utilizado em dispositivos optoeletrônicos.

O meio ativo possui uma espessura fixa de $h_{núcleo}$ de 400 nm, tanto para o caso *bulk* quanto de múltiplos poços quânticos, permitindo uma melhorar comparação entre os dois. Acima desse valor, a injeção de portadores nos poços quânticos começa a ficar não uniforme, enquanto que abaixo desse valor o fator de confinamento começa a diminuir porque o modo se espalha mais ao longo dos pedestais de InP. Além disso, nanolasers com bombeio óptico empregando essa dimensão já foram demonstrados, se mostrando um bom ponto de partida.

A terceira dimensão que manteremos fixa é a altura total do pilar de dielétrico, que tem um total de 1.1 μm. A camada inferior é de InGaAsP, necessária para formação de um bom contato ôhmico, e possui espessura de h_{cont} = 125 nm. O pedestal superior possui altura de h_{ps} = 375 nm e o inferior de h_{pi} = 200 nm. Diminuir a altura do pilar faz com que o modo comece a espalhar mais radialmente e a penetração no metal aumenta muito, e consequentemente as perdas aumentam. Aumentar o pilar além de tal altura faz com que o modo se espalhe muito ao longo da dimensão *z*, conforme mostrado na figura 2.5 (c), onde o pedestal superior é 150 nm mais longo que o pedestal superior da figura 2.5 (b). Os pedestais são dopados para criar a junção *P-i-N*, portanto, as perdas de propagação do modo eletromagnético aumentam quando maior a distribuição do mesmo ao longo dos pedestais, já que eles possuem impurezas dopantes.

Essa cavidade, dentro dos limites desses parâmetros, suporta apenas dois modos, um fundamental que é do tipo TE_{011} e um de segunda ordem do tipo TE_{012}, onde os três índices indicam a ordem radial, azimutal e longitudinal dos modos. A distribuição espacial do campo elétrico para cada um deles encontra-se na figura 2.5 (b) e 2.5 (c) respectivamente. Todas as simulações realizadas foram para otimizar o modo fundamental. Mesmo sendo inerente desse design, não levamos em conta o segundo modo, pois sua inibição também prejudica o modo fundamental. Logo, os parâmetros livres para serem otimizados são: o raio da camada de isolamento, R_{iso}; o raio da região ativa, R_c; e o raio dos pedestais, R_p. A partir de agora simularemos a cavidade variando esses três parâmetros buscando ressonâncias com alto fator de qualidade na faixa de 1550 nm. Para simplificar a comparação, mencionaremos a cavidade com meio de ganho *bulk* simplesmente como *bulk* e a com meio de ganho com múltiplos poços quânticos de *MQW*.

2.10 Efeito da camada de isolamento no confinamento

Para termos uma primeira ideia do efeito da camada de isolante, calculamos o fator de qualidade e o comprimento de onda ressonante em função da espessura do dióxido de silício para diversos R_c e R_p, conforme mostra a figura 2.7.

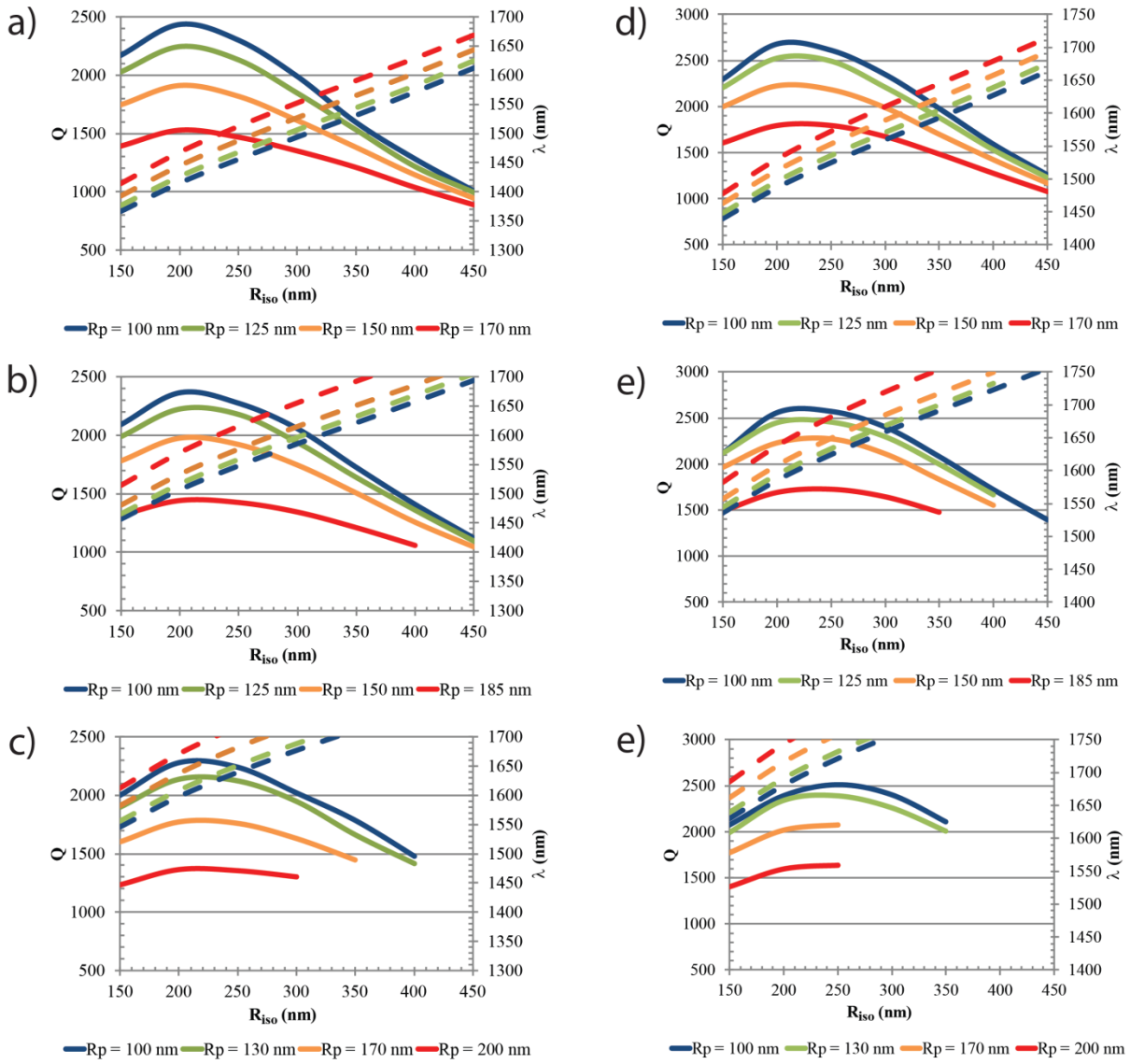


Fig. 2.7: Curvas da variação de Q (linhas sólidas) e de λ (linhas tracejadas). As estruturas são: *MQW* com R_c de (a) 170 nm, (b) 185 nm e (c) 200 nm e *bulk* com R_c de (d) 170 nm, (e) 185 nm e (f) 200 nm.

As curvas na figura 2.7 mostram a variação do fator de qualidade da cavidade (linhas sólidas) e do comprimento de onda ressonante (linhas tracejadas) em função da espessura do óxido (R_{iso}). Todas as curvas da coluna da esquerda são para a cavidade com *MQW* e as da coluna da direita para a cavidade com *bulk*. Os raios do meio ativo são: (a) e (d) 170 nm; (b) e (d) 185 nm; e (c) e (f) 200 nm. Como se pode ver pelas curvas, o comprimento de onda ressonante muda sistematicamente com R_c, o que justifica nossa limitação entre 170 e 200 nm.

Abaixo de 170 nm o comprimento de onda ressonante passa a ficar abaixo da região de 1500 nm, enquanto que acima de 200 nm o comprimento de onda ressonante fica muito acima de 1600 nm. Cabe lembrar que estamos projetando um dispositivo para operar ao redor da banda-C, portanto, o meio de ganho deve emitir por volta de 1550 nm e a ressonância da cavidade deve estar no mesmo comprimento de onda. Cada curva apresenta 4 cores diferentes, representando os valores para diferentes R_p's, que variamos de 100 nm até R_c. Não fomos além de 100 nm por limites de fabricação: é muito difícil fabricar um dispositivo com um $R_p << R_c$ devido a motivos de sustentação mecânica da cavidade. Conforme mostraremos no capítulo 6, quando $R_p << R_c$ as estruturas quebram e caem próximas à base. Mas, quanto menor R_p, maior o fator de qualidade da cavidade e menor o comprimento de onda ressonante devido ao aumento do batente de índice de refração ao redor do meio ativo. O mais interessante dessas curvas é que há um ponto de máximo para os fatores de qualidade em todos os casos, que é R_{iso} = 200 nm. Esse máximo se dá pela otimização do isolante entre o dielétrico e o metal. Para valores abaixo de 200 nm o modo óptico penetra muito na camada metálica e as perdas por efeito Joule aumentam significativamente. Para valores acima de 200 nm o efeito da camada metálica como um bom refletor começa a diminuir com o aumento da distância entre o dielétrico e o metal.

Em resumo, com esse conjunto de dados, fixamos R_{iso} em 200 nm para ambos os casos, *bulk* e *MQW*, e escolhemos um R_p de 100 nm, o menor possível, para analisar o efeito de R_c.

2.11 Efeito do raio da região ativa no confinamento

Para um valor fixo de R_{iso} = 200 nm e de R_p = 100 nm, variamos R_c entre 170 e 200 nm para ambos os casos e obtivemos as curvas da figura 2.8.

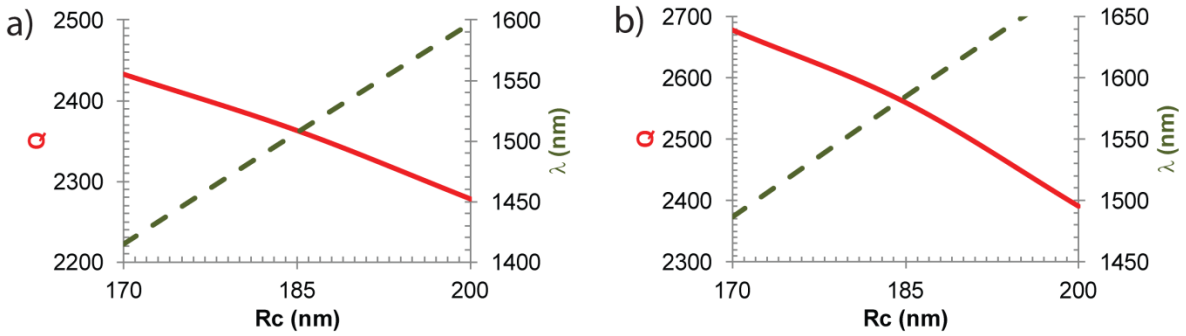


Fig. 2.8: Curvas da variação de Q (linha sólida) e de λ (linha tracejada) em função de R_c para a cavidade (a) *MQW* e (b) *bulk*. Os valores de R_p e R_{iso} são fixos e iguais a 100 e 200 nm respectivamente.

Ambas as curvas da figura 2.8 apresentam o mesmo comportamento: aumento do comprimento de onda ressonante com o aumento do raio da região ativa e consequente diminuição do fator de qualidade. Para fixar o raio da região ativa, observamos o comprimento

de onda ressonante, para que seja o mais próximo de 1550 nm. No caso da cavidade com *MQW*, através da figura 2.8 (a), escolhemos um valor de R_c = 190 nm, que apresenta um comprimento de onda ressonante em 1540 nm e fator de qualidade de 2340. No caso da cavidade com *bulk*, através da figura 2.8 (b) escolhemos um valor de R_c = 180 nm, que apresenta um comprimento de onda ressonante em 1550 nm e fator de qualidade de 2600. Esses valores de Q teóricos são considerados altos para nanolasers. Geralmente eles se encontram na ordem de 1000 [10]. Fixado o valor de R_c, ainda resta saber como as propriedades do modo eletromagnético variam apenas com R_p, que é o parâmetro mais difícil de controlar na fabricação. Portanto, é importante sabermos os limites a serem impostos a R_p.

2.12 Efeito do raio do pedestal no confinamento

Para um valor fixo de R_{iso} = 200 nm e de R_c = 190 / 180 nm (MQW / *bulk*), variamos R_p entre 100 nm e R_c para ambos os casos, e obtive as curvas da figura 2.9.

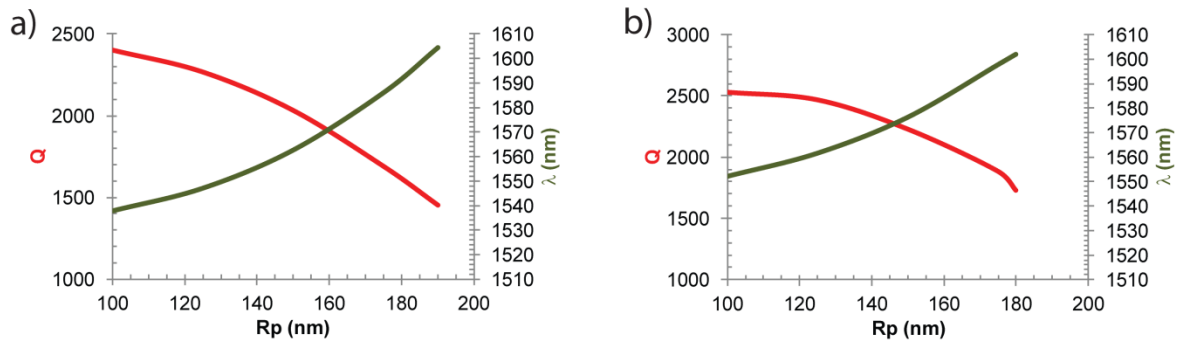


Fig. 2.9: Curvas da variação de Q (linha vermelha) e de λ (linha verde) em função de R_p para valores de R_{iso} = 200 nm e R_c = 190 e 180 nm nos casos da cavidade com (a) *MQW* e (b) *bulk* respectivamente.

Com as curvas da figura 2.9 podemos observar que o efeito do raio do pedestal no comprimento de onda ressonante é muito menor do que o efeito do raio da região ativa. Enquanto que a variação de 30 nm em R_c varia o comprimento de onda ressonante em mais de 150 nm (figura 2.8), a variação em até 90 nm em R_p causa uma mudança de apenas ~ 60 nm no comprimento de onda ressonante (figura 2.9). Porém, o efeito de R_p no tempo de vida fotônico é muito grande, conforme podemos ver na figura 2.9. A variação de até 90 nm em R_p causa uma redução de 50 % no fator de qualidade. Esse efeito é muito menor com a variação de R_c, onde 30 nm de variação altera o fator de qualidade em apenas 200.

É importante lembrar que o fator de qualidade está diretamente ligado ao tempo de vida fotônico, τ_p, e à frequência de ressonância, ω_r, pela expressão [32]:

$$Q = \omega_r \tau_p \qquad (2.22)$$

Geralmente, a otimização do fator de qualidade, e consequentemente do tempo de vida fotônico, é utilizada para os nanolasers, pois essas grandezas são inversamente proporcionais às perdas (dissipação) do sistema. A condição de limiar para lasers de semicondutor é quando o ganho modal, que aumenta com a injeção de portadores, se iguala às perdas totais do sistema. A relação da perda / ganho de limiar, g_{th}, com o fator de qualidade Q e a ressonância ω_r da cavidade é dada pela expressão:

$$\Gamma g_{th} = \frac{\omega_r}{Q v_g} \qquad (2.23)$$

onde v_g é a velocidade de grupo do modo eletromagnético. Assim, conseguir um design com alto fator de qualidade significa conseguir reduzir o ganho de limiar. Esses resultados são mostrados na figura 2.10.

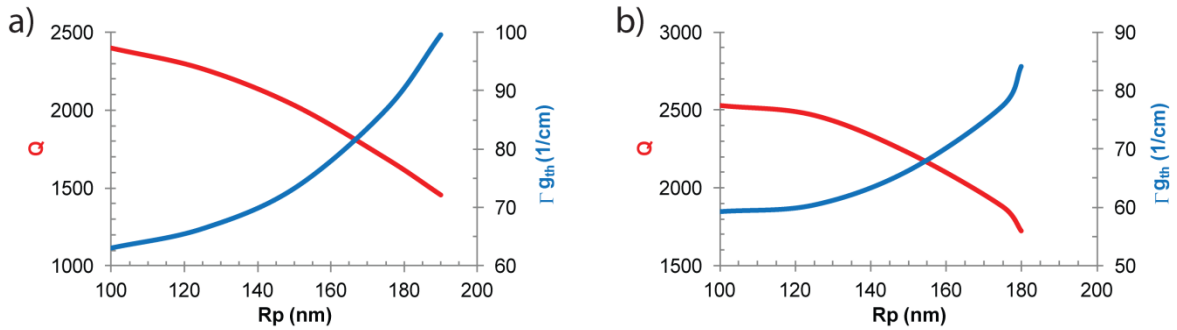


Fig. 2.10: Curvas da variação de Q (linhas sólidas vermelhas) e de g_{th} (linhas sólidas azuis) em função do raio dos pedestais para a cavidade com (a) *MQW* e (b) *bulk*. Os valores de R_{iso} e R_c continuam iguais a 200 e (a) 190 e (b) 180 nm.

Como era de se esperar, pela expressão 2.23, o ganho modal de limiar é praticamente inversamente proporcional ao fator de qualidade da cavidade. Assim, essas curvas são comumente utilizadas para justificar a redução do raio dos pedestais cada vez mais como solução para diminuição das correntes de limiar dos nanolasers. O que concluímos comparando o ganho modal de limiar nos dois casos é que eles são muito similares, e não é o meio de ganho que vai definir qual seria um melhor nanolaser, ao menos do ponto de vista eletromagnético. Porém, pensando que o modo eletromagnético confinado deve interagir com o meio de ganho, há uma diferença entre a escolha do meio de ganho que pode ser significativa, que é o fator de confinamento das duas cavidades, conforme mostra a figura 2.11.

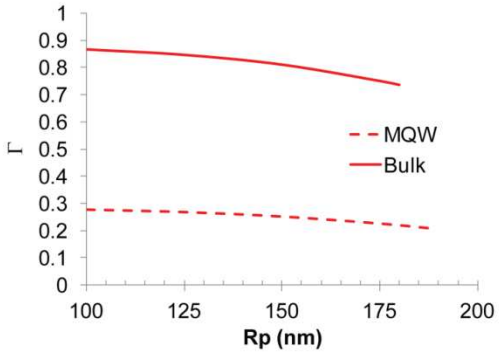


Fig. 2.11: Γ em função de R_p para valores de R_{iso} = 200 nm e R_c = 190 e 180 nm nos casos da cavidade com *MQW* (linha tracejada) e com *bulk* (linha sólida).

Com as curvas da figura 2.11 concluímos que apesar das duas cavidades possuírem propriedades de confinamento da luz similares, a cavidade *bulk* pode ser melhor do que a MQW, pois possui um fator de confinamento quase três vezes maior. Assim, temos duas cavidades otimizadas, mas qual é a melhor ainda é inconclusivo, pois apesar da cavidade com MQW prover um ganho maior, conforme veremos no próximo capítulo, a cavidade com *bulk* apresenta um Γ maior. Além disso, ainda precisamos entender como se dá a injeção de portadores nesses dois meios de ganho. Por último, queremos comentar que, apesar de otimizarmos os modos fundamentais para cada dimensão proposta, há sempre um segundo modo óptico confinado inerente à geometria escolhida. Tais modos também foram simulados e as suas propriedades calculadas serão utilizadas em capítulos posteriores a fim de entendermos seu efeito no desempenho dos nanolasers.

2.13 Conclusão

Neste capítulo da tese, mostramos que a redução do tamanho das cavidades ressonantes, para a ordem de grandeza do comprimento de onda nelas confinado, faz com que o modo eletromagnético se espalhe espacialmente de maneira significativa, diminuindo o fator de qualidade da cavidade e consequentemente aumentando as perdas por dissipação via radiação. Para conseguir reduzir as dimensões das cavidades, mantendo um fator de qualidade relativamente alto, mostramos que podemos usar as boas propriedades refletoras dos metais se os envolver ao redor da cavidade dielétrica. Para controlar a superposição do modo eletromagnético com o metal, inserimos uma camada isolante entre o dielétrico e o metal, que também é essencial para manter a diferença de potencial entre as extremidades da junção *P-i-N*, não curto-circuitando a mesma. Assim, escolhemos duas estruturas, uma com meio de ganho material de múltiplos poços quânticos, que chamamos de MQW, e outra de *bulk*. Variando alguns parâmetros, otimizamos essa cavidade para aumentar o fator de confinamento e, consequentemente, reduzir o ganho modal de limiar. Os valores que fixamos para a cavidade são: a espessura dos metais, t_{metal} = 225 nm; altura do meio ativo, $h_{núcleo}$ = 400 nm; altura do pedestal

superior, h_{ps} = 375 nm; altura do pedestal inferior, h_{pi} = 200 nm; e espessura da camada para contato, h_{cont} = 125 nm. As dimensões da cavidade que de fato otimizamos foram: espessura do isolante, R_{iso} = 200 nm; raio do meio ativo, R_c = 190 e 180 nm para a amostra MQW e *bulk*, respectivamente. A última grandeza que otimizamos foi o raio dos pedestais, R_p, que quanto menor for, menor o ganho modal de limiar necessário para termos um nanolaser. Porém, não utilizaremos o menor R_p como se a cavidade estivesse já otimizada, pois ainda não calculamos a injeção de portadores em tamanhos tão reduzidos de cavidade. Esse cálculo será realizado em capítulos subsequentes. O que concluímos deste capítulo é que o principal efeito do meio de ganho nas propriedades de confinamento das cavidades é mudar o fator de confinamento das cavidades, que é muito maior para *bulk* do que MQW.

No capítulo seguinte calcularemos o ganho material em função da densidade de portadores, para, no capítulo 4, calcular o efeito da redução do pedestal na injeção de portadores. Esse efeito não foi considerado até agora na literatura e, como mostraremos nos capítulos subsequentes, é essencial para o design de nanolasers mais eficientes.

3. Meios dielétricos de ganho para nanolasers

Neste capítulo faremos uma breve discussão entre as diferentes formas de confinar portadores de carga em uma região do espaço para obter ganho material, dando ênfase para o caso de um meio *bulk* e de um meio com poços quânticos. Mostraremos os cálculos para obter a emissão espontânea em função da densidade de portadores de cargas fora do equilíbrio para um material *bulk* e um material com múltiplos poços quânticos, que serão os meios ativos dos nanolasers. Subsequentemente, mostraremos como obter o ganho óptico provido pelo material em função da densidade de portadores a partir da emissão espontânea. Finalizaremos o capítulo mostrando as vantagens e as desvantagens de cada um dos dois meios, *bulk* e poço quântico, se utilizados para nanolasers.

3.1 *Bulk*, poços quânticos, nanofios e pontos quânticos

Para conseguir prover ganho material e consequentemente uma inversão de população para gerar emissão estimulada, é necessário confinar fótons e portadores de carga em uma região do espaço, que é a região onde o modo óptico fica confinado na cavidade. Logo, o núcleo das cavidades otimizadas no capítulo 2 [9]. Há quatro formas de conseguir o confinamento de elétrons: através de uma heteroestrutura formada por camadas espessas de semicondutor, chamada *bulk* (confinamento em uma estrutura 3-D); através da redução de uma das dimensões do meio, criando uma camada fina de semicondutor, chamada de poço quântico (confinamento em uma estrutura 2-D); através da redução de duas das dimensões do meio, criando um semicondutor estreito em duas direções e alongado na outra, chamado de fio quântico ou nanofio (confinamento em uma estrutura 1-D); ou através da redução das 3 dimensões do meio, criando uma ilha isolada de material, chamado de átomo artificial ou ponto quântico (confinamento em uma estrutura 0-D). Independentemente dos tipos de confinamento descritos acima, é necessário utilizarmos de uma heteroestrutura para confinar os portadores em qualquer um dos quatro meios descritos. A figura 3.1 mostra essas quatro geometrias utilizadas para o confinamento dos elétrons.

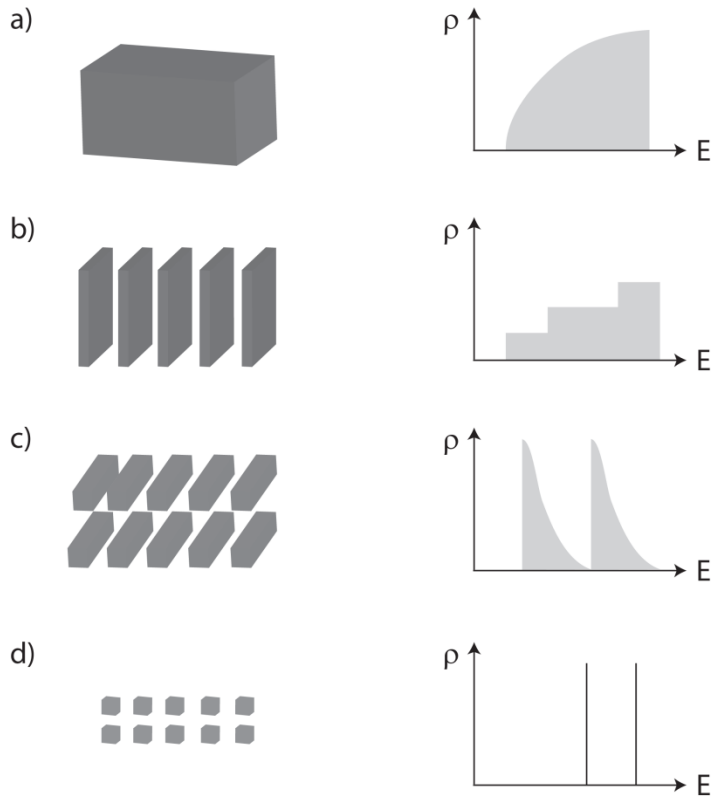


Fig. 3.1: A coluna da esquerda mostra a geometria de confinamento de elétrons enquanto que a coluna da direita mostra a respectiva densidade de estados eletrônicos para um meio (a) *bulk*, (b) de poços quânticos, (c) com nanofios e (d) com pontos quânticos.

O efeito de reduzir uma ou mais dimensões de uma região semicondutora altera o espectro de energias de transições possíveis, *E*, devido à quantização em uma ou mais direções. Consequentemente a densidade de estados eletrônicos ρ da região ativa é afetada consideravelmente [44,45]. As densidades de estados são calculadas pela razão entre o volume de um estado da rede recíproca e o volume do meio, considerando o spin do elétron. Tais efeitos são ilustrados na figura 3.1.

Consideremos inicialmente um meio *bulk*, cujo vetor de onda está em uma esfera de raio *k* no espaço recíproco. Neste caso, os estados de energia são contínuos e a densidade de estados é $\rho \propto \sqrt{E}$, conforme ilustrado na figura 3.1(a) [47]. Reduzindo uma das direções, temos os poços quânticos, nos quais o vetor de onda é quantizado em uma direção e fica contido em um círculo em um plano perpendicular à direção de quantização no espaço *k*. Neste caso, os estados de energia são quantizados e a densidade de estados ρ independe da energia dos níveis quantizados, conforme ilustra a figura 3.1(b) [47]. Ao reduzir mais uma dimensão, no caso dos nanofios, o vetor de onda passa a ser quantizado em duas direções e fica contido ao longo do eixo do nanofio. Neste caso, os estados de energia passam a ser discretos e $\rho \propto \frac{1}{\sqrt{E}}$, conforme ilustra a figura 3.1(c) [47]. A última possibilidade de confinamento é reduzir a estrutura nas 3

dimensões, onde o vetor de onda passa a ser totalmente quantizado e a estrutura possui estados de energia quantizados em todas as direções, como os estados eletrônicos de um átomo, portanto é chamada de átomo artificial. Neste caso, a densidade de estados $\rho \propto \delta(E - E_{n,m,l})$, conforme ilustra a figura 3.1(d) [3]. Aqui *n*, *m* e *l* são números quânticos principal, azimutal e magnético, respectivamente.

O último meio de confinar elétrons que descrevemos, os pontos quânticos, é muito interessante, pois a densidade de estados é muito alta o que permite obter interação forte entre radiação e matéria caso o ponto quântico seja inserido numa cavidade eletromagnética [15]. Como não estamos interessados neste tipo de fenômeno de interação forte, não faremos os cálculos de ganho para pontos quânticos. Além disso, não é o meio mais viável, pois a sobreposição do meio com o modo eletromagnético é muito pequena e ainda não é tão trivial fazer uma engenharia de pontos quânticos para que as energias de transição sejam iguais às energias de um modo ressonante de uma cavidade. Para variar a energia de transição deveríamos ter um controle pleno do crescimento dos pontos quânticos, já que a energia de transição varia com a dimensão dos pontos quânticos.

Os nanofios também não são a melhor solução para obter um nanolaser com bombeio eletrônico que opere à temperatura ambiente porque a redução de sua seção transversal para criar o confinamento bidimensional de elétrons faz com que a resistência para injeção de corrente elétrica seja muito alta [1]. Assim, também descartamos o cálculo de ganho para nanofios.

Na sequência, passamos para o cálculo da emissão espontânea e do ganho para um meio *bulk* e um meio com múltiplos poços quânticos, que são meios com ganho suficiente e boa superposição com o modo eletromagnético, além de permitirem injeção de corrente com resistência aceitável.

3.2 A relação entre emissão espontânea e o ganho material

Consideremos uma cavidade fechada formada por um semicondutor de volume *V* que suporta *N(E)* estados fotônicos entre *E* e *E* + *ΔE*. Neste semicondutor são permitidas transições eletrônicas entre elétrons na banda de condução, com energia E_c e vetor de onda $\overrightarrow{k_c}$, com buracos na banda de valência, com energia E_v e vetor de onda $\overrightarrow{k_v}$. Os elétrons da banda de condução estão em equilíbrio com um quase-nível de Fermi, E_{fc}. Os buracos na banda de valência estão em equilíbrio com um quase-nível de Fermi, E_{fv}. Esse sistema pode ser aproximado por um sistema de dois níveis, onde a banda de condução é o estado 2, com energia E_2 e a banda de valência é o estado 1, com energia E_1.

A distribuição da ocupação dos estados disponíveis de elétrons na banda de condução f_2, buracos na banda de valência f_1 e fótons na cavidade *P(E)* são respectivamente [46]:

$$f_2 = \frac{1}{e^{(E_c - E_{fc})/kT} + 1} \qquad (3.1\text{-}1)$$

$$f_1 = \frac{1}{e^{(E_v - E_{fv})/kT} + 1} \qquad (3.1\text{-}2)$$

$$P(E) = \frac{1}{e^{E/kT} - 1} \qquad (3.1\text{-}3)$$

onde k é a constante de Boltzmann e T a temperatura, que sempre consideraremos como sendo ambiente. Como elétrons e buracos são férmions, seguem uma distribuição de Fermi-Dirac. Como fótons são bósons, seguem uma distribuição de Bose-Einstein. A taxa total de recombinação radiativa entre dois estados (2 e 1) dessa cavidade pode ser expressa em termos da absorção (B_{12}), emissão estimulada (B_{21}) e emissão espontânea (A_{21}) [24]:

$$R_T = B_{12} f_1 (1 - f_2) \rho(E_{21}) - B_{21} f_2 (1 - f_1) \rho(E_{21}) - A_{21} f_2 (1 - f_1) \qquad (3.2)$$

Os termos B_{12} e B_{21} estão escritos em unidades de *energia/tempo* e o termo A_{21} em unidades de *1/tempo*. A taxa total de recombinação radiativa contém duas contribuições:

$$R_T = R_{esp} + R_{est} \qquad (3.3)$$

onde R_{esp} é a taxa de emissão espontânea e R_{est} a taxa de emissão estimulada, que são dadas, respectivamente, por:

$$R_{esp} = A_{21} f_2 (1 - f_1) \qquad (3.4\text{-}1)$$

$$R_{est} = B_{21} f_2 (1 - f_1) \rho(E_{21}) - B_{12} f_1 (1 - f_2) \rho(E_{21}) \qquad (3.4\text{-}2)$$

Em todas as equações acima a densidade espectral de fótons (número de fótons entre E e $E+\Delta E$) é dada por:

$$\rho(E_{21}) = N(E_{21}) P(E_{21}) \qquad (3.5)$$

Assim, a taxa de variação dos portadores dentro da cavidade é a taxa de emissão vezes a quantidade portadores envolvidos no processo.

$$\frac{dn}{dt} = \left(R_{est} + R_{esp}\right) n \qquad (3.6)$$

Se o sistema estiver em equilíbrio, a variação de elétrons e fótons com o tempo é nula, pois o sistema já atingiu um estado estacionário e as densidades de probabilidade de ocupar os estados para elétrons e buracos são iguais (os quase-níveis de Fermi se igualam $E_{fc}=E_{fv} = E_f$), portanto:

$$R_{esp} = -R_{est} \qquad (3.7)$$

Substituindo as equações (3.4), (3.5) e (3.1-1) em (3.7) pode-se obter, no equilíbrio:

$$\frac{A_{21}{f_2}^{eq}\left(1-{f_1}^{eq}\right)}{B_{21}{f_2}^{eq}\left(1-{f_1}^{eq}\right)-B_{12}{f_1}^{eq}\left(1-{f_2}^{eq}\right)}=\frac{N(E_{21})}{e^{E_{21}/kT}-1} \quad (3.8)$$

Comparando o lado esquerdo com o lado direito da equação, conclui-se que:

$$B_{21}=B_{12}=B \;\; e \;\; A_{21}=N(E_{21})B \quad (3.9)$$

As expressões em 3.9 significam que a taxa de emissão estimulada e de absorção são iguais, ou seja, a probabilidade de um fóton ser absorvido e levar um elétron à banda de condução é a mesma que a de um elétron descer para a banda de valência emitindo um fóton e ambas independem da densidade fotônica. Já a emissão espontânea depende da densidade espectral fotônica disponível. Com essas relações é possível reescrever as taxas de emissão espontânea e estimulada como:

$$R_{esp}=N(E_{21})Bf_2(1-f_1) \quad (3.10\text{-}1)$$
$$R_{est}=B(f_2-f_1)\rho(E_{21}) \quad (3.10\text{-}2)$$

Agora, considerando que o sistema está fora do equilíbrio, devido à injeção de portadores, por exemplo, os quase-níveis de Fermi para elétrons e buracos são diferentes. A diferença entre eles é:

$$\Delta\mu=E_{fc}-E_{fv}\neq 0 \quad (3.11)$$

A partir da injeção de portadores alteramos a diferença entre os quase-níveis de Fermi, o que consequentemente altera a taxa de recombinação radiativa dos portadores. Necessitamos agora relacionar essa variação com a densidade de fótons.

Para saber a relação entre a emissão espontânea e estimulada e o ganho, vamos considerar uma cavidade ressonante unidimensional de volume *V* com uma densidade de fótons p_m *(V/ΔE*) = ρ_m, onde *m* é um dos modos ressonantes da cavidade. Esse modo propagante possui energia *E* e largura de linha *ΔE*. A densidade de fótons se propaga ao longo da cavidade (ao longo do eixo *x*) que permite absorção, emissão espontânea e estimulada de radiação. Considerando que f_1 e f_2 são independentes do tempo e da posição, e que β é a fração da emissão espontânea que acopla no modo ressonante de interesse *m*, a variação da densidade fotônica ao longo da cavidade é escrita como:

$$\frac{dp_m}{dx}=\frac{dp_m}{dt}\frac{dt}{dx}=\left(\beta R_{esp}+\frac{R_{est}}{V}\right)\frac{1}{v_g}=\beta\frac{A_{21}f_2(1-f_1)}{v_g}+\frac{B(f_2-f_1)\rho_m}{v_gV}$$

$$=\beta\frac{A_{21}f_2(1-f_1)}{v_g}+\frac{B(f_2-f_1)}{v_g}\frac{p_m}{\Delta E} \quad (3.12)$$

No último termo da expressão 3.12, dividimos pela largura de linha em energia para considerar a largura da emissão. A solução dessa equação diferencial é o valor da densidade de fótons ao longo de *x*:

$$\rho_m(x) = \left[\frac{\beta \Delta E A_{21} f_2(1-f_1)}{B(f_2-f_1)} + \rho_m(0)\right] e^{\frac{B/\Delta E(f_2-f_1)}{v_g}x} - \frac{\beta \Delta E A_{21} f_2(1-f_1)}{B(f_2-f_1)} \qquad (3.13)$$

O aumento exponencial da densidade de fótons na expressão 3.13 é definido como o ganho material:

$$g = \frac{B'(f_2-f_1)}{v_g} \quad (3.14)$$

onde $B' = {B}/{\Delta E}$, e *B'* tem unidade de *1/tempo*. O ganho depende então do nível de excitação da matéria, através do termo *B'*; da velocidade de grupo, pois quanto menor ela for, mais tempo a densidade de fótons fica presente no meio de ganho e há mais interação da radiação com a matéria; e do nível de inversão de população definido como f_2-f_1. Se $f_2 > f_1$, o termo *g* leva à amplificação exponencial. Se $f_2 < f_1$, o termo *g* leva à absorção exponencial. Substituindo a expressão 3.14 na expressão 3.10-2, é possível saber a taxa de emissão estimulada em função do ganho material disponível:

$$R_{est} = g(E, f_2, f_1)\Delta E \rho(E) v_g \qquad (3.15)$$

Mas de fato, ainda não temos o ganho material calculado e dependente da excitação da matéria e inversão de população. A maneira correta de calcular o ganho é relacioná-lo com a emissão espontânea de radiação, que experimentalmente pode ser medida através da fotoluminescência de uma amostra, e sua relação é mostrada a partir da expressão 3.10-1:

$$R_{esp} = A_{21} f_2(1-f_1) = \frac{N(E_{21})B f_2(1-f_1) v_g (f_2-f_1)}{v_g(f_2-f_1)} = \frac{N(E_{21})\Delta E f_2(1-f_1) v_g}{(f_2-f_1)} g(E_{21}, f_2, f_1) \quad (3.16)$$

O ganho em termos da taxa de emissão espontânea é então:

$$g(E_{21}, f_2, f_1) = \frac{R_{esp}(f_2-f_1)}{N(E_{21})\Delta E f_2(1-f_1) v_g} \qquad (3.17)$$

Utilizando as expressões 3.1 e 3.11 é possível reescreve a equação 3.17 como:

$$g(E_{21}, f_2, f_1) = \frac{R_{esp}}{N(E_{21})\Delta E v_g}\left[1 - e^{(E-\Delta\mu)/kT}\right] \qquad (3.18)$$

Nesta expressão, *N(E)ΔE* são todos os modos que estão dentro de uma largura de linha *ΔE*. Com isso observamos a relação direta entre o ganho e a taxa de emissão espontânea. Além disso, na equação 3.18 há uma relação entre o ganho e o nível de inversão de população através de *Δμ*, ou seja, a separação entre os quase-níveis de Fermi, cujo valor aumenta com a injeção de

portadores no meio. Se $\Delta\mu > E$, $g > 0$ e há amplificação da emissão espontânea do meio. Se $\Delta\mu = E$, $g = 0$ e o meio é transparente aos fótons com energia E. Se $\Delta\mu < E$, $g < 0$ e há absorção.

Para saber o ganho material, é necessário calcularmos a densidade de estados fotônicos, a taxa de emissão espontânea e a variação da diferença dos quasi-níveis de Fermi com a injeção de portadores no meio. A densidade de estados fotônicos independe se o meio material é *bulk* ou uma sequência de múltiplos poços quânticos. Mas as outras grandezas são extremamente dependentes da forma de confinamento dos portadores de carga, já que a densidade de estados eletrônicos é diferente para *bulk* e poços quânticos, como mostra a figura 3.1(a) e 3.1(b). Passamos então para o cálculo dessas grandezas.

3.3 Cálculo da densidade de estados fotônicos

O número total de estados fotônicos disponíveis é a razão entre o volume total do espaço recíproco e o volume de um estado no espaço recíproco com dimensões k [47]:

$$N_T = 2\frac{\frac{4\pi k^3}{3}}{\frac{(2\pi)^3}{L^3}} \qquad (3.19)$$

onde L é a dimensão da cavidade, considerando que é muito maior do que λ. O fator 2 é inserido para contabilizar a polarização do fóton. A densidade de estados por unidade de volume e por intervalo de energia é:

$$N(E) = V\left(\frac{dN_T}{dE}\right) \qquad (3.20)$$

Utilizando a relação de dispersão para fótons em um meio com índice de refração n, $E = \hbar ck/n$, é possível escrever a densidade de estados fotônicos por unidade de volume como:

$$n(E) = \frac{N(E)}{V} = \left(\frac{n}{\hbar c}\right)^3 \frac{E^2}{\pi^2} \qquad (3.21)$$

Esse valor será utilizado tanto no cálculo do ganho para *bulk* como para poços quânticos. Devemos ressaltar aqui que, essencialmente, estamos utilizando a distribuição de estados fotônicos para um corpo negro, o que é usual para lasers grandes ($L >> \lambda$). Considerando que vamos utilizar o ganho para nanolasers, a densidade de fotônica pode ser muito distinta e exibir aspectos discretos (não contínuos). De fato, uma modificação da emissão espontânea, e portanto do ganho, ocorre nos nanolasers. Este efeito é dado pelo fator de Purcell [16,48]. Em nossa análise comparativa entre bulk e poços quânticos, não consideramos este fator. Cremos que sua influência seria similar nos dois casos.

3.4 Cálculo da emissão espontânea para *bulk*

Para calcular a taxa de emissão espontânea devemos levar em conta todas as transições possíveis entre estados da banda de condução e de valência, ou seja, devemos considerar todos os vetores da rede recíproca $\overrightarrow{k_c}$ e $\overrightarrow{k_v}$. Assim, a emissão espontânea total por unidade de energia é:

$$\frac{R_{esp}}{\Delta E} = \left(\frac{V}{8\pi^3}\right)^2 \iint B'\left(E, \overrightarrow{k_c}, \overrightarrow{k_v}\right) N(E) f_2\left(\overrightarrow{k_c}\right)\left[1 - f_1\left(\overrightarrow{k_v}\right)\right] d^3k_c d^3k_v \quad (3.22)$$

Vamos reescrever a probabilidade de emissão espontânea *B'* como:

$$B'\left(E, \overrightarrow{k_c}, \overrightarrow{k_v}\right) = C\left(E, \overrightarrow{k_c}, \overrightarrow{k_v}\right)\delta[X], onde\ X\left(E, \overrightarrow{k_c}, \overrightarrow{k_v}\right) = E - E_c\left(\overrightarrow{k_c}\right) + E_v\left(\overrightarrow{k_v}\right) \quad (3.23)$$

O valor de $C\left(E, \overrightarrow{k_c}, \overrightarrow{k_v}\right)$ será demonstrado e calculado posteriormente. Após essa substituição, consideremos que apenas transições com o mesmo vetor de onda acontecem; assim há conservação do momento do elétron sem o envolvimento de fônons da rede. Com essa consideração, o cálculo da emissão espontânea se reduz a uma integração em um volume no espaço recíproco:

$$R'_{esp} = \frac{R_{esp}}{V\Delta E} = \frac{1}{8\pi^3}\int C\left(E, \vec{k}\right)\delta\left[X\left(E, \vec{k}\right)\right] N(E) f_2\left(\vec{k}\right)\left[1 - f_1\left(\vec{k}\right)\right] d^3k \quad (3.24)$$

Assumindo que o espaço recíproco é simétrico em suas três dimensões, a emissão espontânea passa a depender apenas do módulo do vetor $\vec{k}$:

$$R'_{esp} = \frac{1}{2\pi}\int C\left(E, \vec{k}\right)\delta\left[X\left(E, \vec{k}\right)\right] N(E) f_2\left(\vec{k}\right)\left[1 - f_1\left(\vec{k}\right)\right] k^2 dk \quad (3.25)$$

Já que há um *δ(X)* na integral, é interessante alterar a integração de *dk* para *dX*:

$$R'_{esp} = \frac{1}{2\pi}\int C[E, k(X)]\delta(X) N(E) f_2[k(X)]\{1 - f_1[k(X)]\}\frac{k^2 dX}{\left|{}^{dX}/_{dk}\right|} \quad (3.26)$$

e o resultado da integração é:

$$R'_{esp} = \left.\frac{C[E,k(X)] N(E) f_2[k(X)]\{1 - f_1[k(X)]\} k^2}{2\pi\left|{}^{dX}/_{dk}\right|}\right|_X \quad (3.27)$$

Agora ainda faltam obter as relações entre *k*, *X* e a derivada de *X* com respeito a *k*. Como *X* depende da energia das bandas de condução e de valência, é necessário saber a relação entre *E* e *k*. As bandas foram consideradas parabólicas, logo a relação de dispersão é:

$$E_{c(v)}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{c(v)}} \quad (3.28)$$

onde m_c e m_v são as massas efetivas dos elétrons na banda de condução e dos buracos na banda de valência, respectivamente. Utilizando o topo da banda de valência como o referencial 0 de

energia ($k = 0$), $E_c + E_v = E_g$, onde E_g é o *gap* de energia, substituímos a expressão 3.28 na expressão 3.23 para obter:

$$X(k) = E - \left(E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}\right) \qquad (3.29)$$

onde m_r é a massa reduzida definida como [49]:

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v} \qquad (3.30)$$

Com a aproximação da massa reduzida, consideramos que um buraco não vai existir sem um elétron, que é uma aproximação válida e muito utilizada no cálculo do ganho de materiais *bulk* e de poços quânticos. Assim, o valor de $k(X)$ é:

$$k(X) = \sqrt{\frac{2m_r[(E-E_g)-X]}{\hbar^2}} \qquad (3.31)$$

Como as transições só ocorrem quando $X = 0$ (considerando que todas as transições ocorrem muito perto do fundo da banda de condução e do topo da banda de valência) é possível obter $k(0)$ e a derivada de X com respeito a k nessa mesma condição:

$$k_0 = k(0) = \sqrt{\frac{2m_r(E - E_g)}{\hbar^2}} \qquad (3.32\text{-}1)$$

$$\frac{dX}{dk} = -\frac{\hbar^2 k}{2m_r} \Longrightarrow \left.\frac{dX}{dk}\right|_{X=0} = -\frac{\hbar^2 k_0}{2m_r} \qquad (3.32\text{-}2)$$

Finalmente, substituindo os valores da expressão 3.32 na expressão 3.27 e multiplicando por 2 para considerar o spin do elétron, obtemos a expressão para a emissão espontânea:

$$R'_{esp}(E, E_{fc}, E_{fv}) = \frac{m_r k_0}{\pi\hbar^2} C(E) N(E) f_2(k_0)[1 - f_1(k_0)], E > E_g \quad (3.33)$$

Os novos valores de f_2 e f_1, após a mudança de variável e considerando a massa reduzida são:

$$f_2 = \frac{1}{e^{(E_c - E_{fc})/kT} + 1} = \frac{1}{e^{\left(E_g + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_c} - E_{fc}\right)/kT} + 1}$$
$$f_1 = \frac{1}{e^{(E_v - E_{fv})/kT} + 1} = \frac{1}{e^{\left(-\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_v} - E_{fv}\right)/kT} + 1} \qquad (3.34)$$

Cabe notar que o termo $\frac{m_r k_0}{\pi\hbar^2}$ é a densidade de estados eletrônicos para um meio *bulk* e segue o comportamento ilustrado na figura 3.1(a) [9].

A única grandeza que resta ser calculada é o valor de *C(E)*, que envolve elementos de matriz do operador momento entre os estados final e inicial. Seu valor é derivado da regra de ouro de Fermi para a transição entre dois estados durante o processo de interação elétron-fóton no regime fraco de acoplamento. A dedução é mostrada no apêndice A, mas aqui utilizaremos apenas o resultado final:

$$C(E) = \left(\frac{2q^2h}{\varepsilon EV}\right)\frac{E_g\left(E_g+\Delta\right)}{3m_r\left(E_g+\frac{2}{3}\Delta\right)} \quad (3.35)$$

onde Δ está relacionado com o acoplamento spin-órbita que também é explicado no apêndice A. A expressão 3.33 diz que a emissão espontânea só ocorre para $E > E_g$ porque k_0 só é definido a partir desse valor, conforme a expressão 3.32. Porém, as posições dos níveis de energia envolvidos nas transições possuem uma incerteza devido ao tempo que os portadores levam para definir um quase-equilíbrio, chamado de tempo de termalização. O tempo de termalização é dado pelo tempo característico de espalhamento entre os portadores de uma mesma banda de energia, e por isso é chamado de espalhamento intrabanda. Esse tempo é escrito como τ_{in} e encontra-se na faixa de 0.1 a 0.3 ps [50]. Assim, como utilizamos a massa reduzida entre os elétrons e os buracos para calcular a emissão espontânea, também usamos um tempo de espalhamento intrabanda reduzido. Pelo princípio da incerteza, é possível introduzir um alargamento Lorentziano de $\Delta E = \hbar/\tau_{in}$ na emissão espontânea, chegando à expressão final:

$$\overline{R_{esp}}\left(E, E_{fc}, E_{fv}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} R'_{esp}\left(E, E_{fc}, E_{fv}\right)\frac{\left(\frac{1}{\pi}\right)\left(\frac{1}{\Delta E}\right)}{1+\left(\frac{E-E'}{\Delta E}\right)^2}dE' \quad (3.36)$$

Com o cálculo da emissão espontânea (expressão 3.36) e da densidade de estados fotônicos (expressão 3.21) pode-se calcular o ganho material para um meio *bulk* em função da diferença entre os quase-níveis de Fermi $\Delta\mu$ a partir da expressão 3.18.

3.5 Cálculo da emissão espontânea para poços quânticos

O cálculo da emissão espontânea para poços quânticos é totalmente análogo ao cálculo para *bulk*. Portanto, a expressão 3.36 ainda pode ser utilizada se três diferenças forem consideradas: o número de estados eletrônicos é quantizado dado o poço de potencial, a densidade de estados eletrônicos é diferente e os elementos da matriz do operador momento de dipolo em *C(E)* dependem da polarização da radiação (*TE* ou *TM*).

No caso do *bulk*, os níveis de energia E_1 e E_2 representam o topo da banda de valência e o fundo da banda de condução. Para poços quânticos, como os níveis são quantizados, deve-se somar aos valores de E_1 e E_2 o valor de energia dos estados quantizados:

$$E_1^m = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} + E_{hm} \qquad (3.37\text{-}1)$$

$$E_2^j = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} + E_{ej} \qquad (3.37\text{-}2)$$

onde E_{hm} é o m-ésimo nível de energia quantizado para os buracos na banda de valência e E_{ej} o j-ésimo nível de energia quantizado para os elétrons na banda de condução. Como só consideramos transições para $k = 0$, entre o topo da banda de valência e o fundo da banda de condução, a energia da transição é dada por:

$$E_{hm}^{ej} = E_g + E_{ej} - E_{hm} \qquad (3.38)$$

Os valores dos níveis de energia quantizados são calculados no apêndice B. Assim, a energia do *gap* da expressão 3.35 deve ser substituída pela energia da transição entre os níveis de energia E_{hm}^{ej}.

A densidade de estados é bidimensional e dada por [45]:

$$\rho_r = \frac{m_r}{\pi\hbar^2 L_z}\sum_{m,j} H\left(E - E_{hm}^{ej}\right) \qquad (3.39)$$

onde m_r é massa reduzida para o par elétron buraco em questão, L_z é a largura do poço e H é uma função de Heaviside, que mostra que também há uma quantização da densidade de estados, que como se pode notar é constante. Esse comportamento pode ser verificado com a figura 3.1(b). Esse valor deve ser colocado no lugar da densidade de estados eletrônicos obtido no caso *bulk*.

A última diferença é o termo *C(E),* que deve ser corrigido. No caso do *bulk*, o vetor de onda do elétron encontra-se em toda uma esfera no espaço recíproco. No caso de poços quânticos, o vetor de onda não quantizado dos elétrons ou dos buracos encontram-se em um plano perpendicular à direção de quantização, portanto apenas campos elétricos contidos no plano (polarização *TE*) atuam no processo de interação da radiação com a matéria [45]. O fator de correção multiplicando *C(E)* é 2/3, ou seja, apenas duas direções contribuem nas transições.

A emissão espontânea em poços quânticos é então escrita como:

$$R'_{esp}\left(E, E_{fc}, E_{fv}\right) = \frac{m_r}{\pi\hbar^2 L_z}\sum_{m,j}\left|I_{hm}^{ej}\right|^2 H\left(E - E_{hm}^{ej}\right)\frac{2}{3}C(E)N(E)f_2(k_0)[1 - f_1(k_0)], E > E_{hm}^{ej} \qquad (3.40)$$

onde $\left|I_{hm}^{ej}\right|^2$ é o resultado da integral de sobreposição das funções de onda do elétron j da banda de condução com o buraco m da banda de valência e é calculada no apêndice B. Os novos valores de f_2 e f_1, levando em conta a energia de transição entre os níveis dos poços colocando o referencial de energia igual a zero novamente no topo da banda de valência, são:

$$f_2 = \frac{1}{e^{\left(E_{ej}-E_{fc}\right)/kT}+1} = \frac{1}{e^{\left(E_g+E_{ej}+\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_c}-E_{fc}\right)/kT}+1}$$
$$f_1 = \frac{1}{e^{\left(E_{hm}-E_{fv}\right)/kT}+1} = \frac{1}{e^{\left(-\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_v}-E_{hm}-E_{fv}\right)/kT}+1} \qquad (3.41)$$

Da mesma forma que para um meio *bulk*, deve-se levar em conta o tempo de espalhamento intrabanda na emissão espontânea, inserindo novamente um alargamento Lorentziano. Isso é feito inserindo a expressão 3.34 na expressão 3.36, de maneira análoga ao caso *bulk*. Com o cálculo da emissão espontânea (expressão 3.36) e da densidade de estados fotônicos (expressão 3.21), pode-se calcular o ganho material para um meio de poços quânticos em função da diferença entre os quase-níveis de Fermi $\Delta\mu$ a partir da expressão 3.18.

3.6 Determinação dos quase-níveis de Fermi

Conforme mostra a expressão 3.18, o ganho é calculado em função de $\Delta\mu$, a diferença entre os quase-níveis de Fermi. Porém, o que nos interessa é calcular o ganho em função da injeção eletrônica, ou seja, em função da densidade de portadores. Para isso, é necessário utilizar a relação entre a densidade de portadores em um nível de energia e a respectiva distribuição de probabilidade de ocupação dos estados eletrônicos. Essa relação para elétrons e buracos no caso de um material *bulk* é:

$$n = \int_{E_G}^{\infty} \rho_c(E) f_{2,E_{f2}}(E) dE \qquad (3.42\text{-}1)$$

$$p = \int_{-\infty}^{0} \rho_v(E)(1 - f_{1,E_{f1}})(E) dE \qquad (3.42\text{-}2)$$

De fato essa integração é feita separando as expressões 3.42 em duas partes, uma para considerar os portadores no meio ativo de InGaAs, e outra para considerar os portadores que ficam na camada de confinamento que envolve o meio de ganho, que nos nossos nanolasers é de InP [51]. Essa consideração é feita por completeza, pois no caso *bulk*, as camadas de confinamento passam a ser preenchidas apenas quando a injeção é muito maior que 10^{19} cm^{-3}, valores que geralmente rompem a junção e não são alcançados.

No caso de um meio com múltiplos poços quânticos, é necessário levar em conta a densidade de portadores nas barreiras que confinam os elétrons. Geralmente, a população das barreiras é desprezada no cálculo de ganho para laser de semicondutores convencionais, onde o comprimento da cavidade é ordem de μm's. Porém, em nanolasers, as perdas do sistema são tão grandes que há necessidade de um alto ganho material, e consequentemente uma alta densidade de portadores que faz com que a separação dos quase-níveis de Fermi seja tal que permita o

preenchimento de estados eletrônicos das barreiras. Assim, as densidades de elétrons e buracos para poços quânticos, considerando a probabilidade de ocupar tanto os estados quantizados dos poços bem como os estados contínuos da barreira, são:

$$n_T = n_{QW} + n_B = \int_{E_g+E_{ej}}^{\Delta E_c} \rho^{2D}(E) f_2^{2D}(E) dE + \int_{\Delta E_c}^{\infty} \rho^{3D}(E) f_2^{3D}(E) dE \qquad (3.43\text{-}1)$$

$$p_T = p_{QW} + p_B = \int_{-E_{hm}}^{\Delta E_v} \rho^{2D}(E) f_1^{2D}(E) dE + \int_{\Delta E_v}^{-\infty} \rho^{3D}(E) f_1^{3D}(E) dE \qquad (3.43\text{-}2)$$

onde nas expressões o primeiro termo do lado direito é o cálculo dos portadores ligados que estão confinados nos poços, e o segundo termo é o cálculo dos portadores livres que já preenchem as barreiras. ΔE_c e ΔE_v são a descontinuidade entre os poços e as barreiras, respectivamente [51].

Invertendo as expressões 3.42 e 3.43, pode-se obter os valores dos quase-níveis de Fermi em função da injeção de portadores para uma amostra de poços quânticos e uma amostra *bulk*. Com a variação da diferença entre os quase-níveis de Fermi, calculamos o ganho material e sabemos sua relação com a densidade de portadores no meio ativo.

No caso dos poços quânticos, como há portadores na barreira, temos que calcular o seu ganho material. Se houver um modo na cavidade com comprimento de onda ressonante igual ao comprimento de onda referente à energia do *gap* da barreira, pode até ocorrer emissão estimulada de radiação. De fato, mostramos no capítulo 2 que existe um modo com comprimento de onda ressonante da ordem de 1300 nm, que é próximo ao *gap* de energia nas barreiras e no capítulo 5 mostraremos que é possível obter um nanolaser com emissão em um modo de barreira.

3.7 Simulações da emissão espontânea e do ganho material para um meio *bulk*

Utilizando as expressões das seções anteriores, mostraremos os resultados do cálculo da emissão espontânea e do ganho material para um meio *bulk*. A estrutura considerada está ilustrada na figura 3.2.

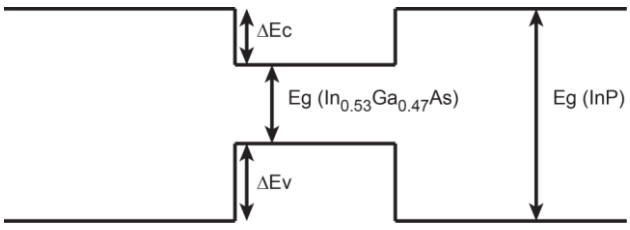


Fig. 3.2: Diagrama de bandas para uma heteroestrutura formada por uma camada 4000 Å de $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ confinada por duas camadas de InP.

A composição do InGaAs em questão é para que o parâmetro de rede seja casado com o do InP e não haja efeito de *stress / strain* no material. Os parâmetros ΔE_c e ΔE_v são as descontinuidades da banda de condução e de valência, respectivamente, entre os dois materiais. Esses valores são calculados em função da composição da liga semicondutora e seus valores foram obtidos de S. Adachi [52]. Os outros valores usados no cálculo da emissão espontânea e do ganho material encontram-se na tabela 3.1.

Tab. 3.1: Valores utilizados nas simulações de ganho material para *bulk*.

Grandeza	Valor	Unidade
T	300	K
k_b	$1.38\text{x}10^{23}$	m^2Kg/s^2K
c	$3\text{x}10^{8}$	m/s
n_{eff}	3.3	-
h	$6.63\text{x}10^{-34}$	m^2Kg/s
q	$1.6\text{x}10^{19}$	C
E_g ($In_{0.53}Ga_{0.47}As$)	0.74	eV
E_g (InP)	1.4236	eV
Massa do elétron (m)	$9.31\text{x}10^{-31}$	Kg
m_c	0.041*m	Kg
m_v	0.431*m	Kg
Δ	0.335	eV
ΔE_c	0.2734	eV
ΔE_v	0.4102	eV
τ_{in}	0.1	ps

As curvas de emissão espontânea e do ganho material em função da densidade de portadores encontram-se na figura 3.3.

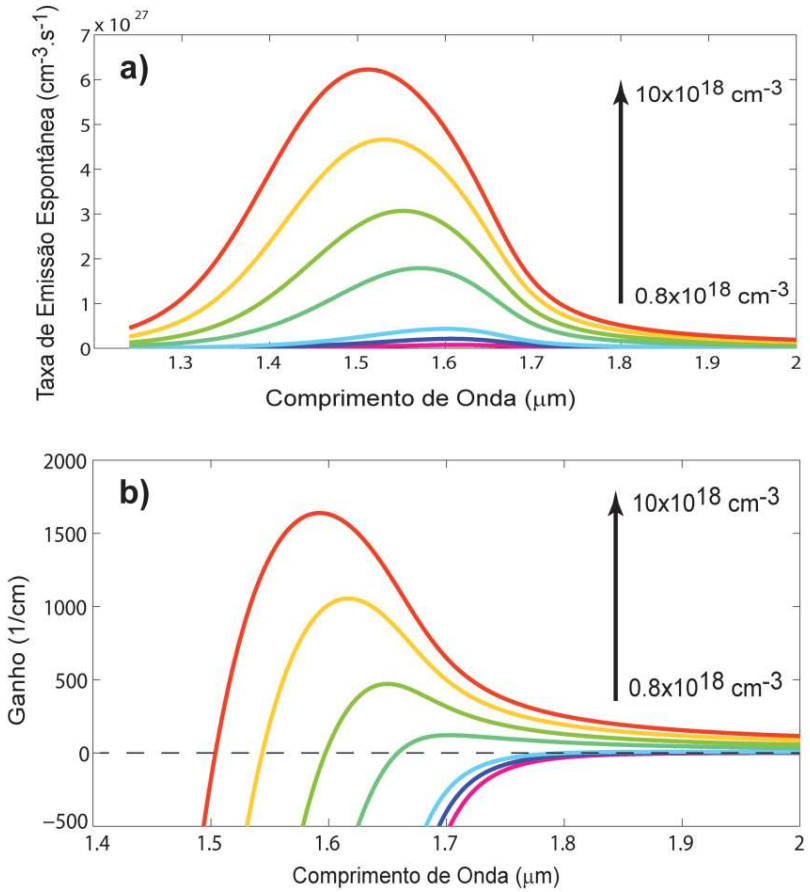


Fig. 3.3: Curvas da (a) emissão espontânea e do (b) ganho de um meio *bulk* em função do comprimento de onda para uma densidade de portadores variando linearmente entre $0.8\text{x}10^{18}$ e $10\text{x}10^{18}$ cm^{-3} no meio ativo.

A princípio a curva da emissão espontânea na figura 3.3 (a) deveria reduzir a zero a partir de certo comprimento de onda, ou seja, quando a energia do elétron estiver abaixo de E_g. Porém, devido ao alargamento lorentziano inserido pelo espalhamento intrabanda, há emissão para comprimentos de onda menores. A emissão espontânea, como esperado, aumenta com a densidade de portadores no meio ativo, ao mesmo tempo em que se desloca para comprimentos de ondas menores (energias maiores), que é o chamado efeito de preenchimento da banda. Já que no caso *bulk* a densidade de estados é contínua, conforme a banda é preenchida pelos portadores, a diferença da energia de transição entre os elétrons da banda de condução e os buracos da banda de valência aumenta.

Com a emissão espontânea, calculamos o ganho material mostrado na figura 3.3 (b). Para uma densidade de portadores pequena o meio ativo é um absorvedor. Aumentando a densidade de portadores o sistema passa pela condição de transparência, onde não há ganho nem perda, obviamente para um comprimento de onda específico. Neste caso, a densidade de portadores é dita de transparência e é chamada de n_0. O ganho material aumenta com a densidade de

portadores e seu máximo é deslocado para comprimentos de ondas menores, novamente devido ao efeito de preenchimento de bandas.

3.8 Simulações da emissão espontânea e do ganho material para um meio de poços quânticos

Utilizando as expressões das seções anteriores, mostraremos os resultados do cálculo da emissão espontânea e do ganho material para um meio com 10 poços quânticos. A estrutura considerada está ilustrada na figura 3.4 e possui o mesmo comprimento que o meio *bulk*.

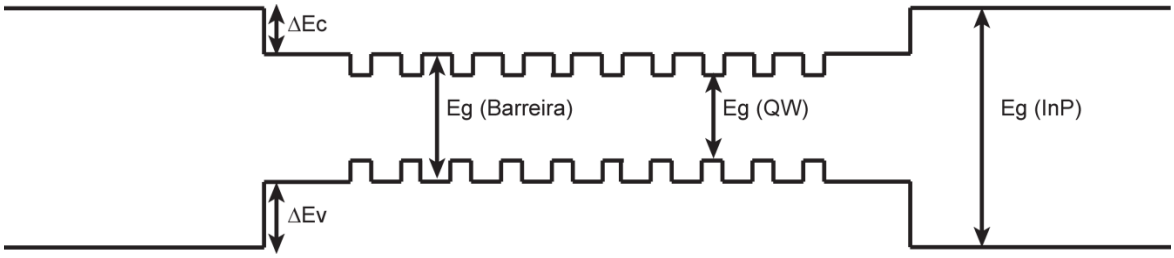


Fig. 3.4: Diagrama de bandas para uma heteroestrutura formada por poços quânticos de $In_{0.56}Ga_{0.44}As_{0.938}P_{0.062}$/ $In_{0.734}Ga_{0.266}As_{0.571}P_{0.429}$ confinados por duas camadas de InP.

A composição do InGaAsP que compõe os 10 poços quânticos ($In_{0.56}Ga_{0.44}As_{0.938}P_{0.062}$) e as respectivas barreiras ($In_{0.734}Ga_{0.266}As_{0.571}P_{0.429}$) é tal que não haja *stress / strain* entre a liga quaternária e o InP. A largura dos poços é de 100 Å e das barreiras é de 200 Å. A profundidade dos poços é a diferença entre a energia do *gap* da barreira e a do poço quântico. Com a largura e a profundidade dos poços é possível calcular o nível quantizado para elétrons na banda de condução, E^{e1}, e o nível quantizado para buracos pesados na banda de valência, E_{h1}. Esses valores são calculados no apêndice B e mostrados na tabela 3.2 junto com os outros valores utilizados no cálculo da emissão espontânea e do ganho para poços quânticos 52.

Tab. 3.1: Valores utilizados nas simulações de ganho material para poços quânticos.

Grandeza	Valor	Unidade
T	300	K
k_b	$1.38\text{x}10^{23}$	m^2Kg/s^2K
c	$3\text{x}10^{8}$	m/s
n_{eff}	3.3	-
h	$6.63\text{x}10^{-34}$	m^2Kg/s
q	$1.6\text{x}10^{19}$	C
E_g (QW)	0.761	eV
E_g (Barreira)	0.91	eV
Eg (InP)	1.4236	eV
Massa do elétron (m)	$9.31\text{x}10^{-31}$	Kg
m_c (QW)	0.0481*m	Kg

m_c (Barreira)	0.0608*m	Kg
m_v (QW)	0.431*m	Kg
m_v (Barreira)	0.511*m	Kg
Δ	0.335	eV
Profundidade do poço	0.0745	eV
E^{e1}	0.786	eV
E_{h1}	-0.0056	eV
$\left\|I_{h1}^{e1}\right\|^2$	0.9439	-
ΔE_c	0.2734	eV
ΔE_v	0.4102	eV
τ_{in}	0.1	ps

As curvas de emissão espontânea e do ganho material em função da densidade de portadores encontram-se na figura 3.5. Todo o cálculo que demonstramos nas seções anteriores contabiliza apenas um poço quântico. Para incluir os outros basta multiplicar pelo fator 10, considerando que os portadores se distribuem uniformemente ao longo de todos eles, mesmo que na prática possa não ser verdade.

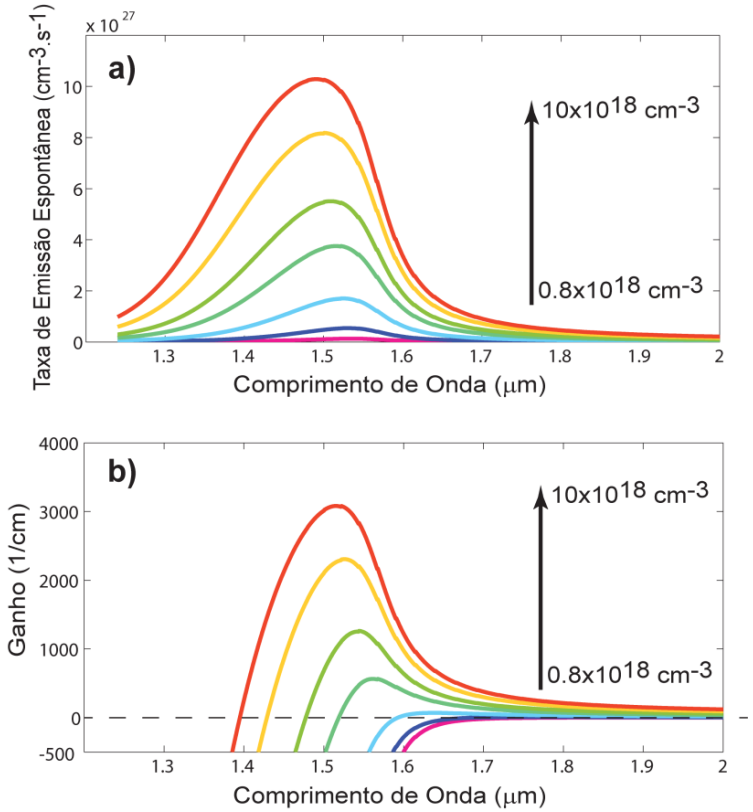


Fig. 3.5: Curvas da (a) emissão espontânea e do (b) ganho do meio com 10 poços quânticos em função do comprimento de onda para uma densidade de portadores variando linearmente entre $0.8x10^{18}$ e $10x10^{18}$ cm^{-3}no meio ativo.

As curvas da emissão espontânea (figura 3.5 (a)) e do ganho (figura 3.5 (b)) para poços quânticos mostram basicamente o mesmo comportamento que um meio de ganho *bulk*, com algumas diferenças que justificam a motivação de usar poços quânticos como meio de ganho para nanoalsers. Essas diferenças são mostradas na seção seguinte.

3.9 Uma comparação entre o material *bulk* com o de múltiplos poços quânticos

A primeira coisa que se nota ao comparar as figuras 3.3 (b) e 3.5 (b) é que o material com múltiplos poços quânticos proporciona um ganho material maior com a mesma densidade de portadores. Isso é consequência da emissão espontânea ser maior no meio com múltiplos poços quânticos, além de apresentar uma densidade de portadores de transparência menor, conforme mostra a curva tracejada em ambas as figuras. No *bulk*, n_0 encontra-se entre $2x10^{18}$ e $4x10^{18}$ cm^{-3} enquanto que no meio com múltiplos poços quânticos entre $1x10^{18}$ e $2x10^{18}$ cm^{-3}.

Outra diferença notável é o menor deslocamento do máximo do ganho com o aumento da densidade de portadores no meio com múltiplos poços quânticos. A razão é que a densidade de estados eletrônicos é constante para um mesmo nível de energia. Assim, o poço quântico se mostra mais adequado ao ser inserido em uma cavidade ressonante, já que com o aumento da densidade de portadores o deslocamento do máximo do ganho será muito pequeno. No projeto de uma cavidade ressonante com um meio *bulk*, deve-se levar em consideração a variação do máximo do ganho com o aumento da densidade de portadores para obter um melhor desempenho do laser.

Uma boa maneira de se comparar os dois materiais é analisar o ganho em função da densidade de portadores para um mesmo comprimento de onda. Suponhamos então que projetamos uma cavidade ressonante cuja ressonância é em 1550 nm. Se considerarmos que o meio de ganho da cavidade é um *bulk*, ou então a sequência de poços quânticos, é preciso saber o ganho em função da densidade de portadores para esse determinado comprimento de onda, pois ele será responsável por gerar a emissão estimulada. Essa curva de ganho encontra-se na figura 3.6

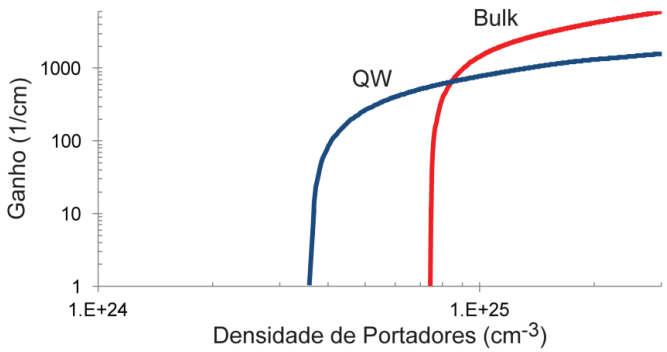


Fig. 3.6: Ganho material na escala logarítmica em função da densidade de portadores no comprimento de onda de 1550 nm.

Conforme escrito anteriormente, a figura 3.6 mostra que o meio com poços quânticos (QW) atinge a transparência antes do meio *bulk* (Bulk), com aproximadamente a metade da densidade de portadores. Assim, para certo comprimento de onda, o meio com poços quânticos apresenta um ganho muito maior que o *bulk* para a mesma densidade de portadores.

Com esses resultados, chegamos à mesma conclusão que a atual comunidade científica, especialmente na área de nanolasers: os poços quânticos são a solução para redução da corrente de limiar e consequentemente o desenvolvimento de um nanolaser operando a temperatura ambiente. Porém, dada as enormes perdas por radiação e absorção no metal que ocorrem nos nanolasers, o ganho necessário e a consequente inversão de população são muitos altos. Com essa informação em mãos e reanalisando as curvas da figura 3.6, conclui-se que se um ganho elevado for necessário para atingir o limiar, os poços quânticos perdem todas as suas vantagens e o meio *bulk* parece ser uma solução melhor para o problema dos nanolasers.

Além disso, conforme comentamos anteriormente, para altas densidades de portadores nos poços quânticos, a distância entre os quase-níveis de Fermi calculadas pelas expressões 3.43 é tal que permite a população das barreiras. Se há portadores nas barreiras existe emissão espontânea e, portanto ganho material. Por isso também mostramos o cálculo da emissão espontânea e do ganho nas barreiras na figura 3.7, já que deveremos levar isso em consideração na análise do desempenho do nanolaser que faremos nos próximos capítulos.

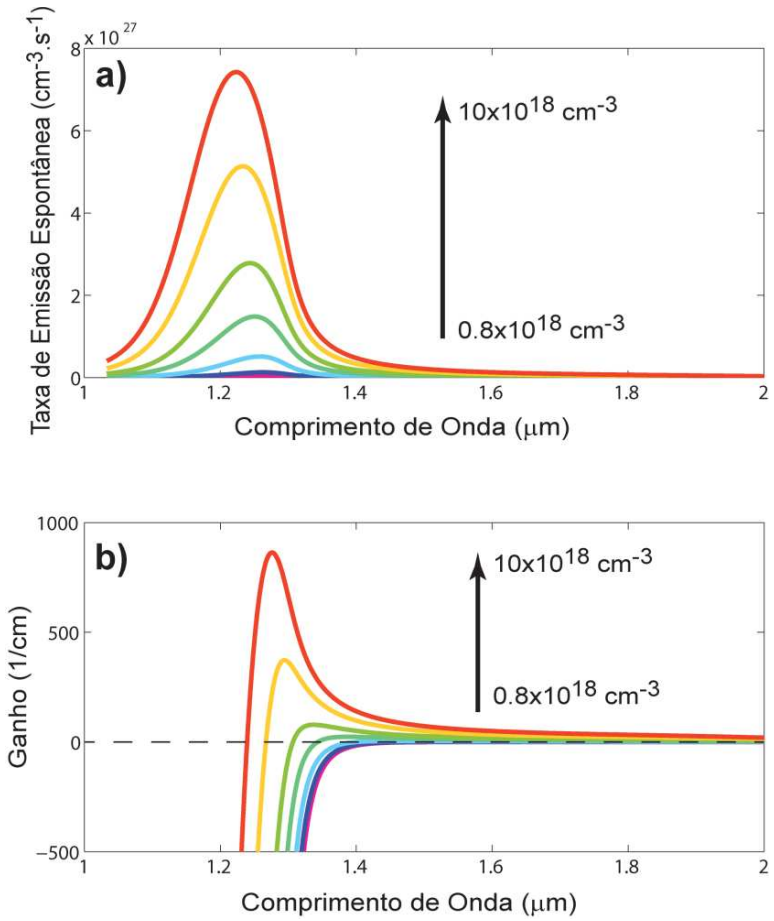


Fig 3.7: Curvas da (a) emissão espontânea e do (b) ganho das barreiras que formam um meio com 10 poços quânticos em função do comprimento de onda quando a densidade de portadores nos poços quânticos varia entre $0.8x10^{18}$ e $10x10^{18}$ cm^{-3} no meio ativo.

O cálculo da emissão espontânea e do ganho mostrados na figura 3.7 é para a densidade de portadores nos poços quânticos. Ou seja, quando os poços apresentam essa densidade de portadores os quase-níveis de Fermi estão separados de tal maneira que passa a haver emissão espontânea e ganho nas barreiras. Logo, há mais uma possível desvantagem para o uso de poços quânticos em nanolasers: uma possível perda de portadores para as barreiras, o que pode aumentar ainda mais a corrente de limiar dos nanolasers.

Uma última vantagem do meio *bulk* é o fator de confinamento calculado no capítulo 2, que é duas vezes maior do que para um meio com múltiplos poços quânticos, reduzindo o ganho modal necessário para obter um nanolaser com meio *bulk*.

3.10 Conclusão

Neste capítulo mostramos todo o desenvolvimento do cálculo da emissão espontânea e do ganho material para dois meios ativos: um *bulk* e um com 10 poços quânticos. Comparando os dois

materiais, mostramos que para baixas densidades de portadores injetados no meio de ganho os poços quânticos apresentam maior ganho devido ao menor n_0, além de um menor deslocamento no comprimento de onda do máximo ganho. Porém, encontramos dois problemas no uso dos poços quânticos em nanolasers: para altas densidades de portador, geralmente requeridas para o limiar dos nanolasers, o ganho do *bulk* é maior; e, para essas altas densidades de portadores os meios com poços quânticos passam a ter emissão nas barreiras, consumindo portadores.

No próximo capítulo, uniremos os resultados do capítulo 2, onde obtivemos o ganho de limiar das nanocavidades ressonantes, com os resultados desse capítulo. Incluiremos a solução das equações de transporte para obter de fato a corrente de limiar desses nanolasers e realmente entender as vantagens e desvantagens dos dois meios de ganho, em busca de um projeto otimizado para nanolasers com bombeio eletrônico.

4. Injeção de portadores em dispositivos optoeletrônicos

Para obtermos o potencial e o campo elétrico, assim como a distribuição espacial da densidade de portadores de carga, para condições de equilíbrio num dispositivo semicondutor, temos que resolver auto-consistentemente as equações de Maxwell com a estatística de Fermi-Dirac para as bandas de valência e condução envolvidas e para as impurezas cuja distribuição depende da posição. Mais ainda, podemos obter a distribuição espacial das densidades de corrente, quando fora do equilíbrio, ou seja, em um regime onde um potencial externo é aplicado sobre o dispositivo. Também necessitamos de algum modelo de transporte relacionando campo elétrico e densidade de corrente e, por fim, precisamos incluir as probabilidades de recombinação de portadores, tanto envolvendo fótons como fônons. Este problema pode ser extremamente complexo, principalmente quando se lida com heterojunções, principalmente em dimensões comparáveis com o comprimento de De Broglie do elétron. Livros textos mostram estruturas simples onde a análise nos ajuda a ter melhor compreensão de sistemas mais complexos de forma qualitativa. No entanto, estes sistemas demandam simulações sofisticadas para qualquer informação quantitativa. Neste capítulo, simularemos o sistema completo de nanolasers de dupla heteroestrutura utilizando o software SILVACO (Módulo ATLAS) [53]. Com os resultados relacionando corrente de injeção e densidade de portadores na região ativa, completamos a simulação dos lasers utilizando os resultados obtidos nos capítulos 2 e 3 com o intuito de obter uma estrutura otimizada.

4.1 Equação de Poisson

Em nosso problema, vamos nos restringir ao problema estacionário para obter a relação entre corrente e campo elétrico através do modelo simples de Drude [47]. As equações principais que resolveremos são a de Poisson, continuidade (também derivada das equações de Maxwell), e transporte, todas considerando a neutralidade local das cargas.

A equação de Poisson é dada por [32]:

$$\nabla.(\varepsilon\nabla\Phi) = -\rho \qquad (4.1)$$

onde ε é a constante dielétrica do meio e ρ densidade de cargas, ambos dependentes da posição; Φ é o potencial escalar eletrostático. A densidade total de carga em certa região inclui a densidade de elétrons n, a densidade de buracos p, a densidade de doadores ionizados N_D^+ e a densidade de aceitadores ionizados N_A^-:

$$\rho = e(p - n + N_D^+ - N_A^-) \quad (4.2)$$

A partir do potencial eletrostático é possível calcular o campo elétrico que influencia o transporte dos portadores. As condições de contorno surgem das derivadas das equações de Maxwell calculadas nas interfaces, lembrando que as interfaces podem ter cargas ou correntes superficiais, porém a solução na interface deve ser contínua. Por fim, a condição de contorno sobre as extremidades, em nosso caso dois terminais para injeção de elétrons por um lado e de buracos por outro, é que a diferença de potencial aplicado entre esses dois terminais multiplicada pela carga elementar é igual à diferença entre os quase-níveis de Fermi entre elétrons e buracos (diferença do potencial químico entre os dois).

4.2 Equações de transporte de portadores

As equações de transporte dos portadores, assumindo que eles respeitam a distribuição de Boltzmann e o modelo linear de Drude, são escritas como [45]:

$$\overrightarrow{J_n} = q\mu_n n\vec{E} + qD_n\nabla n \qquad (4.3\text{-}1)$$

$$\overrightarrow{J_p} = q\mu_p n\vec{E} + qD_p\nabla p \qquad (4.3\text{-}2)$$

onde $\overrightarrow{J_n}$ e $\overrightarrow{J_p}$ são as densidades de corrente para elétrons e buracos, μ_n e μ_p são as mobilidades para elétrons e buracos, $\vec{E}$ é o campo elétrico calculado a partir do potencial obtido resolvendo a expressão 4.1 e D_n e D_p são os coeficientes de difusão para elétrons e buracos. O primeiro termo das expressões 4.3 é referente à corrente de deriva e o segundo termo devido à corrente de difusão. Sabendo as densidades de corrente, é possível saber a taxa de portadores ao longo das regiões do material.

4.3 Equações de continuidade

A equação de continuidade para uma densidade total de corrente J_T é [32]:

$$\nabla.\overrightarrow{J_T} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0 \qquad (4.4)$$

Considerando que a densidade de impurezas ionizadas é independente do tempo, incluindo termos de taxa de geração G e de recombinação R de portadores, e separando a equação da continuidade para elétrons (n) e buracos (p), obtemos:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - R_n + \frac{1}{q}\nabla.\overrightarrow{J_n} \qquad (4.5\text{-}1)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p - R_p + \frac{1}{q}\nabla.\overrightarrow{J_p} \qquad (4.5\text{-}2)$$

onde G_n e G_p são as taxas de geração de elétrons e buracos, e R_n e R_p as taxas de recombinação de elétrons e buracos respectivamente. A geração de portadores é dada pela injeção através do bombeio eletrônico, e a recombinação de portadores resulta em emissão espontânea ou estimulada de radiação.

4.4 Relações auxiliares e condições de contorno

Para resolver as expressões 4.1, 4.3 e 4.5 de forma auto-consistente, deve-se levar em conta que a densidade de portadores segue uma distribuição de Fermi-Dirac e depende da densidade de estados eletrônicos. A densidade de estados eletrônicos depende simplesmente das propriedades do material e da energia envolvida [47]. Já a distribuição de portadores, que segue uma distribuição de Fermi-Dirac, depende dos quase-níveis de Fermi mencionados no capítulo 3. A variação desses quase-níveis se dá com o potencial eletrostático calculado pela equação de Poisson, que depende da densidade portadores. Essa relação caracteriza o problema a ser resolvido como auto-consistente.

Para solucionar esse problema devemos utilizar alguma condição de contorno inicial do sistema. Essa condição é aplicada aos eletrodos do dispositivo a ser simulado, que são considerados contatos ôhmicos ideais. Na superfície dos contatos ôhmicos ideais prevalecem as relações:

$$\varphi = \varphi_0 + V_{ap} \qquad (4.6\text{-}1)$$

$$n = n_0 \qquad (4.6\text{-}2)$$

$$p = p_0 \qquad (4.6\text{-}3)$$

Essas relações significam que as densidades de portadores na superfície do eletrodo são iguais às densidades de portadores intrínseca do material que forma uma junção com o metal do contato. Ou seja, o sistema apresenta neutralidade de cargas e está no equilíbrio. Consequentemente, a diferença de potencial entre os eletrodos é dada pela soma do potencial aplicado V_{ap} que aplicamos entre os eletrodos com a do próprio potencial embutido da estrutura, φ_0. No entanto, outra vez, o potencial aplicado multiplicado pela carga elementar nos dá a diferença entre os quase-níveis de Fermi para elétrons e buracos (em equilíbrio essa diferença é nula e os quase-níveis de Fermi convergem para o nível de Fermi do sistema).

O problema é então resolvido utilizando o SILVACO, um simulador que utiliza o método de elementos finitos para simular auto consistentemente as equações de Poisson, transporte e continuidade utilizando as condições de contorno apresentadas e a estatística de Fermi-Dirac. No caso de poços quânticos, a equação de Schroedinger também é resolvida para considerar os níveis quantizados e a diferente densidade de estados eletrônicos.

Na sequência mostraremos os resultados obtidos através dessas simulações, que consistem em obter o diagrama de bandas, a corrente injetada, a distribuição de portadores injetados e o consumo de energia, todos sob diferentes condições de tensão aplicada. Com o comportamento elétrico e nossos cálculos do ganho óptico em função da densidade de portadores, é possível otimizar o nanolaser de forma completa.

4.5 Estrutura das camadas e diagrama de bandas para as estruturas lasers

Conforme mencionado nos capítulos anteriores, projetaremos duas cavidades, uma com um meio de ganho *bulk* e a outra com um meio de ganho com múltiplos poços quânticos (MQW – *multiple quantum wells*, do inglês). O esquema das estruturas com as respectivas concentrações, dopagens e espessuras das camadas epitaxiais encontram-se na tabela 4.1 e 4.2, no caso de MQW e *bulk*, respectivamente.

Tab. 4.1: Camadas epitaxiais e suas características (meio de ganho com MQW).

Camada	Material	Espessura (A)	Repetição	Dopagem
12	InGaAs	1250	1	Zn (p ~ $2x10^{19}$ cm^{-3})
11	InP	300	1	Zn (p ~ $5x10^{18}$ cm^{-3})
10	InP	1700	1	Zn (p ~ $1x10^{18}$ cm^{-3})
9	$In_{0.734}Ga_{0.266}As_{0.571}P_{0.429}$	600	1	—
8	$In_{0.56}Ga_{0.44}As_{0.938}P_{0.06}$	100	1	—
7	$In_{0.734}Ga_{0.266}As_{0.571}P_{0.429}$	200	9	—
6	$In_{0.56}Ga_{0.44}As_{0.938}P_{0.06}$	100	9	—
5	$In_{0.734}Ga_{0.266}As_{0.571}P_{0.429}$	600	1	—
4	InP	1250	1	Si (n ~ $1x10^{18}$ cm^{-3})
3	InP	8750	1	Si (n ~ $5x10^{18}$ cm^{-3})
2	$In_{0.733}Ga_{0.227}As_{0.493}P_{0.507}$	10000	1	Si (n ~ $2x10^{19}$ cm^{-3})
1	InP	1000	1	—
0	Substrato de InP	—	—	Fe (semi-isolante)

O meio ativo da estrutura da tabela 4.1 consiste na sequência de camadas 5 a 9, onde temos poços quânticos de 100 Å com *gap* de energia em 1630 nm, confinados por barreiras de 200 Å com *gap* de energia em 1300 nm. A camada número 11 é para formação de contato ôhmico e a camada 2 é utilizada para parar a corrosão das camada de InP durante o processo de fabricação, conforme discutiremos no capítulo 6. As camadas são dopadas dessa maneira para formar uma junção *P-i-N* para injeção eficiente de portadores no meio ativo, que é a região intrínseca da estrutura [54].

Tab. 4.2: Camadas epitaxiais e suas características (meio de ganho com *bulk*).

Camada	Material	Espessura (A)	Repetição	Dopagem
8	InGaAs	1250	1	Zn (p ~ $2x10^{19}$ cm^{-3})
7	InP	300	1	Zn (p ~ $5x10^{18}$ cm^{-3})
6	InP	1700	1	Zn (p ~ $1x10^{18}$ cm^{-3})
5	$In_{0.56}Ga_{0.44}As_{0.938}P_{0.06}$	4000	1	—
4	InP	1250	1	Si (n ~ $1x10^{18}$ cm^{-3})
3	InP	8750	1	Si (n ~ $5x10^{18}$ cm^{-3})
2	$In_{0.733}Ga_{0.227}As_{0.493}P_{0.507}$	10000	1	Si (n ~ $2x10^{19}$ cm^{-3})
1	InP	1000	1	—
0	Substrato de InP	—	—	Fe (semi-isolante)

O meio ativo da estrutura da tabela 4.2 consiste de um meio *bulk* de 400 nm com *gap* de energia em 1630 nm. A camada número 8 é para formação de contato ôhmico e a camada 2 é utilizada para parar a corrosão das camada de InP durante o processo de fabricação, conforme discutiremos no capítulo 6. As camadas são dopadas dessa maneira para formar uma junção *P-i-N* para injeção eficiente de portadores no meio ativo, que é a região intrínseca.

O diagrama de bandas dessas duas estruturas no equilíbrio e no regime de injeção de portadores (tensão externa aplicada de 0.8 V) encontram-se na figura 4.1.

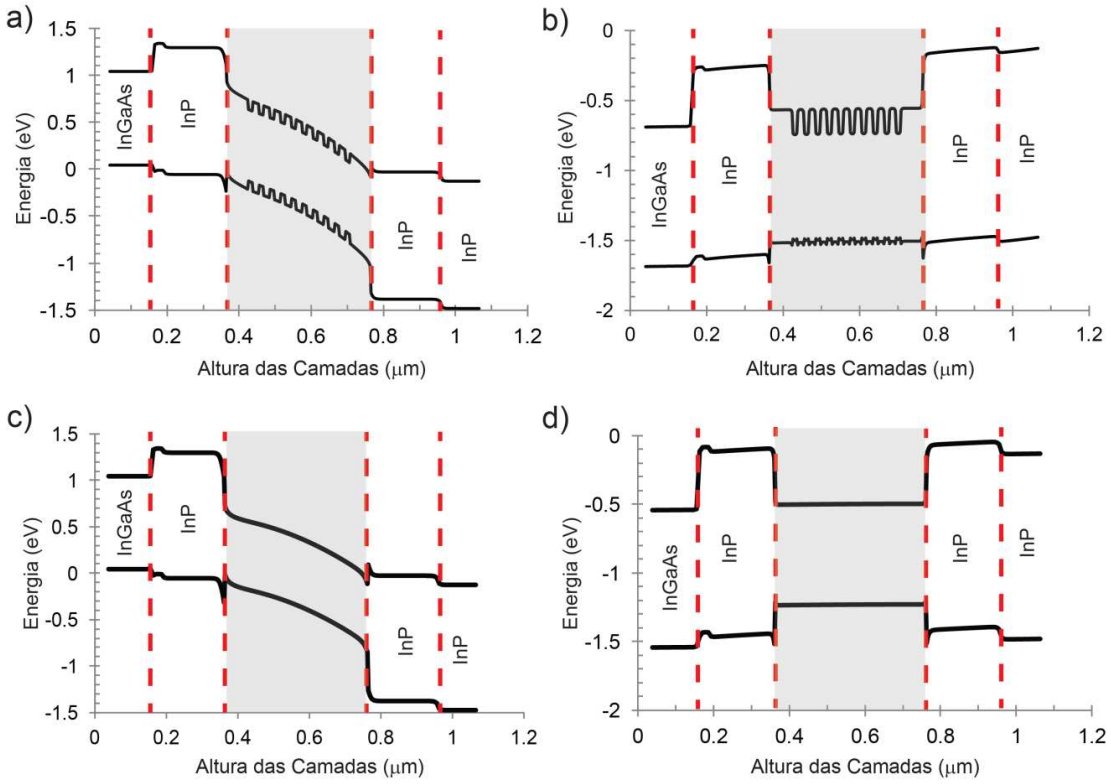


Fig. 4.1: Diagramas de bandas das estruturas obtidos com o SILVACO para o meio de ganho (a), de

MQW no equilíbrio (b) de MQW com uma tensão aplicada de 0.8 V, (c) *bulk* no equilíbrio e (d) *bulk* com uma tensão aplicada de 0.8V. A área hachurada indica o meio ativo.

O valor de 0.8 V foi escolhido por ser o *gap* de energia do material. A partir desse valor o meio se torna transparente e a banda de condução passa a ser preenchida pelos elétrons em uma primeira aproximação. Em todos os diagramas da figura 4.1 as camadas 0, 1 e 2 não foram incluídas, pois serão removidas durante o processo de fabricação. A região hachurada indica a região ativa da estrutura e os diferentes materiais são separados pelas linhas vermelhas tracejadas. As barreiras ou potenciais criados entre um material e outro são devidos aos diferentes *gaps* de energia e diferentes funções trabalho envolvidos [54]. As diferenças de potencial criadas em um mesmo material são devidas às diferentes dopagens que mudam a posição dos níveis de Fermi dos materiais isolados e em equilíbrio. Nas figuras 4.1 (a) e 4.1 (c), temos uma situação de equilíbrio, sem bombeio eletrônico e podemos ver a formação de uma junção *P-i-N*, onde o lado esquerdo (*P*) permite a injeção de buracos até a barreira entre a região central hachurada (*i*) e a região da direita (*N*). O lado direito (*N*) permite a injeção de elétrons até a barreira entre a região central hachurada (*i*) e a região da direita (*P*). Os portadores injetados na região ativa devem atravessar uma pequena e estreita barreira *Schottky*, mostrada pelas descontinuidades nas junções entre diferentes materiais [55].

As figuras 4.1 (b) e 4.1 (d) mostram os diagramas de banda para a estrutura de MQW e *bulk*, respectivamente, na situação de injeção de portadores via bombeio eletrônico. A escala de energia nessas duas figuras é diferente devido ao referencial de potencial utilizado no cálculo das estruturas de banda. Nesse regime, as estruturas permitem a injeção de portadores que ficam confinados no meio ativo e podem recombinar estimulada ou espontaneamente.

4.6 Injeção de portadores

Com as barreiras e diferenças de potencial obtidas no cálculo da estrutura de banda, podemos utilizar novamente o SILVACO para a solução autoconsistente de todas as equações mostradas que regem a dinâmica dos portadores na estrutura. Aplicamos uma diferença de potencial entre as duas extremidades da estrutura através de contatos ôhmicos ideias para obter a corrente que percorre a estrutura e as densidades de corrente ao longo das diferentes regiões.

Como dimensões da cavidade, utilizamos os valores otimizados obtidos no capítulo 2. Relembrando, esses valores são: espessura dos metais, t_{metal} = 225 nm; altura do meio ativo, $h_{núcleo}$ = 400 nm; altura do pedestal superior, h_{ps} = 375 nm; altura do pedestal inferior, h_{pi} = 200 nm; espessura da camada para contato, h_{cont} = 125 nm; espessura do isolante, R_{iso} = 200 nm; e raio do meio ativo, R_c = 190 e 180 nm para a amostra MQW e *bulk*, respectivamente. Concluímos no capítulo 2, que, quanto menor o raio do pedestal, menor o ganho de limiar, porém deixamos em aberto essa grandeza para ser tratada agora. Isso porque, até então, havíamos considerado apenas a otimização em termos do confinamento do modo eletromagnético, sem levar em conta a injeção de portadores no meio ativo, que deve piorar quanto menor for a

dimensão da cavidade. Agora, mostraremos os resultados das curvas de corrente em função da tensão aplicada aos eletrodos das cavidades (curvas IxV) para diferentes raios de pedestal, conforme figura 4.2.

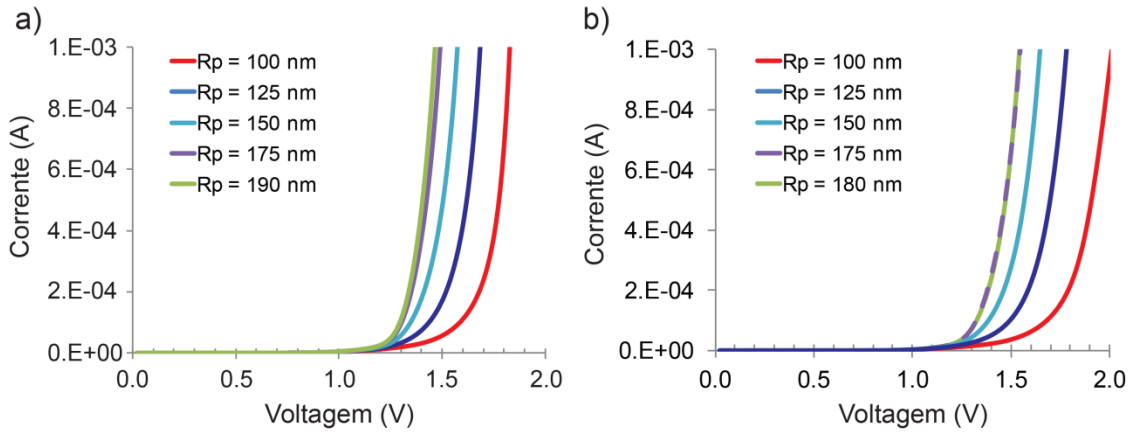


Fig. 4.2: Curvas IxV para diversos raios de pedestal de uma estrutura com meio (a) de MQW e (b) *bulk*.

As curvas IxV contidas na figura 4.2 foram simuladas para um raio de pedestal máximo igual ao raio do núcleo, que é o meio ativo. Independentemente da estrutura escolhida, as duas curvas apresentam a mesma tendência: com a redução do raio do pedestal, é necessária uma maior diferença de potencial para obter uma determinada corrente. Isso ocorre devido à redução da secção transversal por onde a corrente flui. Tal redução resulta em um aumento da resistência elétrica em série do dispositivo e uma consequente redução da corrente elétrica para uma mesma tensão aplicada.

No capítulo 2 calculamos o ganho de limiar em função do raio dos pedestais, e no capítulo 3 o ganho material disponível em função da densidade de portadores presentes no meio de ganho, *bulk* ou de MQW. Para obter as curvas da figura 4.2, foi necessário calcular a densidade de portadores em todas as regiões do dispositivo; logo é possível saber a densidade de portadores no meio ativo para cada corrente obtida. No capítulo 2 calculamos o ganho de limiar e no capítulo 3 calculamos o ganho material em função da densidade de portadores. Unindo os resultados do capítulo 2 e 3 com este último, podemos obter então a densidade de portadores de limiar, N_{th}, necessária para que o ganho material atinja o valor do limiar. Consequentemente, obtemos a corrente de limiar, I_{th}, em função dos raios do pedestal, conforme mostra a figura 4.3.

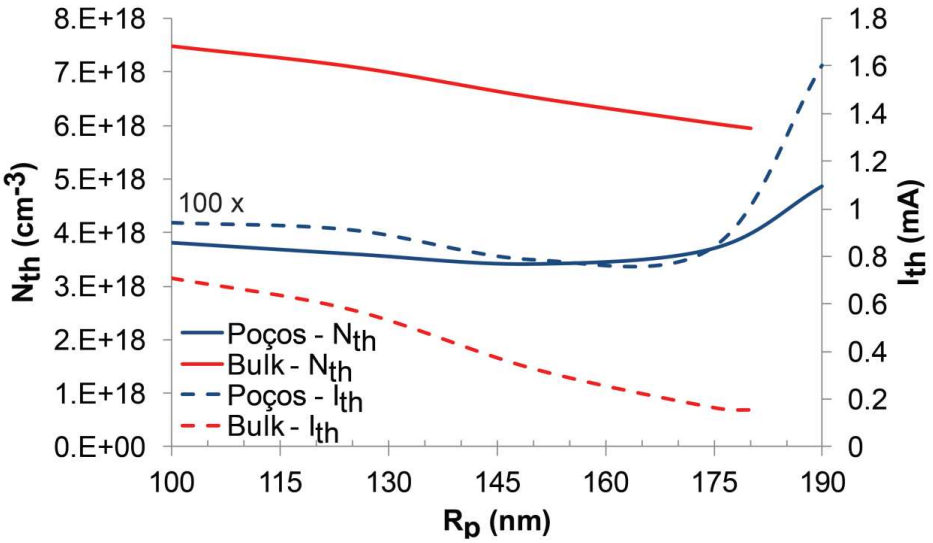


Fig. 4.3: Densidade de portadores de limiar (curvas sólidas) e corrente de limiar (curvas tracejadas) em função do raio do pedestal para um dispositivo com meio ativo de múltiplos poços quânticos (curvas azuis) e *bulk* (curvas vermelhas).

Comparando a densidade de portadores de limiar entre os dois dispositivos, curvas sólidas da figura 4.3, vemos que realmente um meio de ganho com MQW resulta em uma menor densidade de portadores de limiar. Consequentemente, a corrente de limiar para a amostra com MQW é muito menor do que para a amostra com meio *bulk*, chegando a ser duas ordens de grandeza menor, conforme observamos ao comparar a curva tracejada em azul para o dispositivo com MQW com a curva tracejada em vermelho para o dispositivo *bulk*. Vale notar que o valor da curva tracejada em azul foi multiplicado por um fator 100.

O esperado é que a corrente de limiar siga a mesma tendência que a densidade de portadores de limiar já que as duas grandezas estão diretamente relacionadas [24]. Essa tendência é seguida no meio *bulk* conforme indicam as curvas vermelhas. Porém, as curvas azuis para o meio com MQW indicam uma variação muito maior da corrente de limiar com o raio do pedestal conforme ele se aproxima do raio do núcleo. Além disso, notamos um mínimo nas curvas de limiar em função do raio do pedestal no caso do meio com MQW, mostrando que há uma condição de otimização dos nanolasers.

Entendemos o aumento da densidade de portadores de limiar e corrente de limiar com a redução dos raios através da figura 4.2, que comprova que reduzir os raios dos pedestais implica em maior resistência para injeção de portadores no meio ativo. Para entender o aumento após a condição de mínimo, devemos ver quão distante do máximo da curva de ganho material (na densidade de portadores de limiar) está o comprimento de onda ressonante conforme mudamos o raio do pedestal, lembrando que a variação do raio resulta em grande variação do comprimento de onda ressonante da cavidade. As curvas mostrando tais comparações encontram-se na figura 4.4.

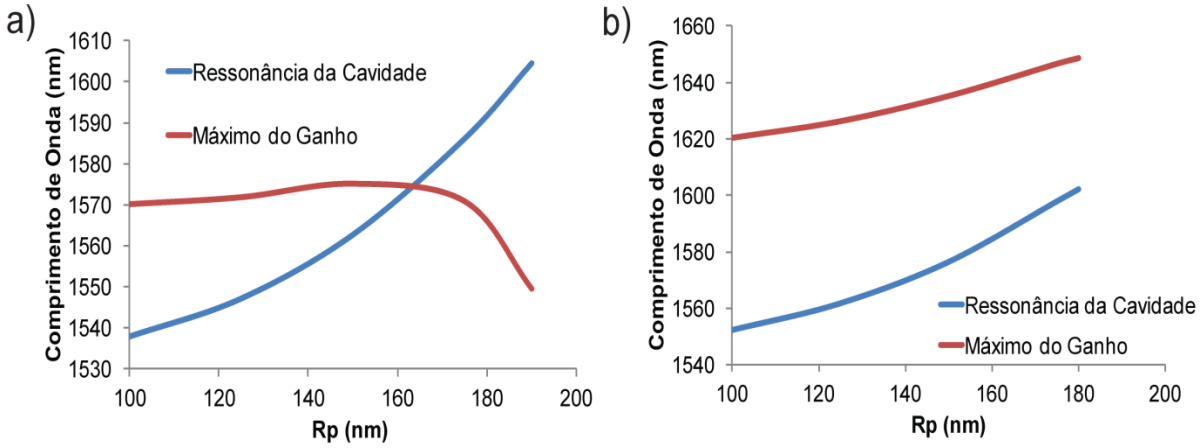


Fig. 4.4: Curvas do comprimento de onda ressonante da cavidade (em azul) e do comprimento de onda do máximo ganho (em vermelho) em função do raio do pedestal do dispositivo com meio ativo (a) de MQW e (b) *bulk*.

As curvas em azul nas figuras 4.4 (a) e 4.4 (b) foram calculadas durante o processo de otimização do modo eletromagnético confinado na cavidade, resultado principal do capítulo 2. Conforme explicado anteriormente, aumentando o raio dos pedestais é possível confinar comprimentos de onda mais longos. Já as curvas em vermelho nas figuras 4.4 (a) e 4.4 (b) indicam o comprimento de onda do máximo da curva de ganho calculada com a densidade de portadores de limiar com o raio de pedestal em questão para o dispositivo. No caso dos múltiplos poços quânticos, figura 4.4 (a), inicialmente não há uma variação significativa do máximo do ganho com respeito ao comprimento de onda. Isso porque a densidade de estados eletrônicos é constante e os efeitos de preenchimento de banda muito pequenos. A partir de certo raio de pedestal, por volta de 160 nm, o comprimento de onda ressonante passa pelo máximo da curva de ganho e começa a se afastar cada vez, indo para energias menores onde o ganho passa a diminuir rapidamente. Com esse resultado é possível entender melhor as curvas da figura 4.3: para raios de pedestal muito pequenos, o limitante para o limiar é a injeção de portadores na cavidade devido à resistência imposta pelo material de reduzida seção transversal; já para raios de pedestal próximos ao raio do núcleo ativo, o comprimento de onda ressonante passa a ficar cada vez mais distante do máximo de ganho material, o que significa que mais portadores são necessário para atingir a condição de limiar.

Já para o dispositivo com meio ativo *bulk*, figura 4.4 (b), há uma variação do máximo de ganho com respeito ao comprimento de onda devido ao efeito de preenchimento de banda, já que a densidade de estados eletrônicos escala com a energia. Pelos valores limites de raio de pedestal e núcleo que escolhemos para otimizar a cavidade, o comprimento de onda ressonante da cavidade ainda está se aproximando do comprimento de onda do máximo do ganho material. Assim, para nanolasers com meio ativo *bulk*, reduzir muito o raio do pedestal não é a melhor solução já que isso implica num aumento das condições de limiar devido ao aumento da resistência para injeção de portadores e devido ao quão distante do máximo de ganho disponível

está o modo ressonante. Esse resultado em conjunto com o menor ganho provido pelo meio *bulk* também ajuda a explicar porque a corrente de limiar para um dispositivo com meio *bulk* é tão maior.

Com a densidade de portadores calculada em cada região da heteroestrutura, também é possível saber a densidade de corrente ao longo da estrutura conforme mostra a figura 4.5.

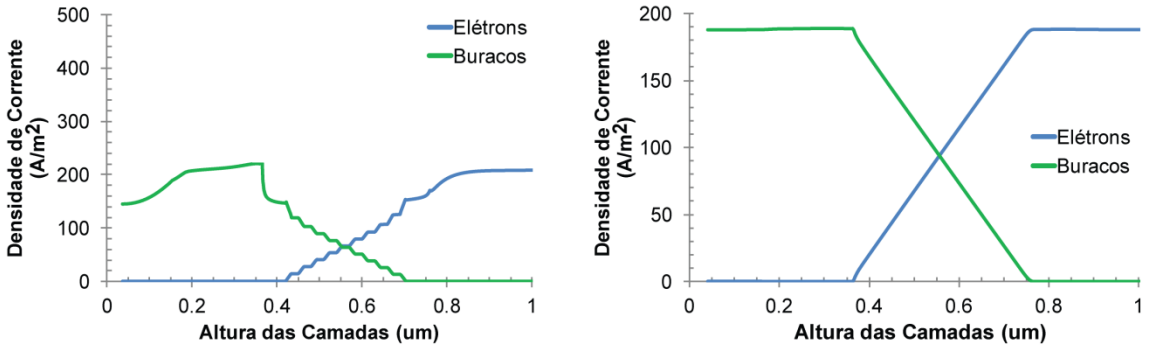


Fig. 4.5: Densidade de corrente de elétrons (curva em azul) e de buracos (curva em verde) ao longo da heteroestrutura para o dispositivo (a) com MQW e (b) *bulk*.

A figura 4.5 (a) mostra a densidade de corrente ao longo da estrutura para o dispositivo com múltiplos poços quânticos enquanto que a figura 4.5 (b) é para o dispositivo *bulk*. As curvas em azul são para a corrente de buracos e as curvas em verde para a corrente de elétrons. Todas as curvas foram obtidas aplicando uma diferença de potencial de 0.8 V entre as extremidades da heteroestrutura. Pela extremidade dopada tipo *P* das estruturas, lado esquerdo, observamos uma corrente de buracos e praticamente nenhuma corrente para elétrons. Pela extremidade *N* das estruturas, lado direito, observamos uma corrente de elétrons e praticamente nenhuma corrente para buracos. Na região intrínseca de ambas as estruturas a densidade de corrente de elétrons e de buracos reduz até chegar a zero devido à recombinação entre elétrons e buracos, mostrando que os dispositivos são eficientes para recombinação radiativa de portadores. No caso dos poços quânticos a redução das densidades de corrente ocorre gradualmente quase que como degraus, pois os portadores recombinam nos poços quânticos. Já no dispositivo *bulk* as densidades de corrente diminuem ininterruptamente ao longo do meio ativo.

4.7 Potência consumida e efeitos de aquecimento

Além de reduzir a densidade de portadores e a corrente de limiar, é muito importante reduzir a potência dissipada durante a operação de um nanolaser já que os efeitos térmicos são significativos devido ao tamanho reduzido das cavidades; pequenas variações na temperatura geram grande deslocamento do comprimento de onda emitido pelo meio ativo [49]. Afastando ainda mais o máximo do ganho com respeito ao comprimento de onda da cavidade, maior será a densidade de portadores e corrente de limiar. Com as curvas IxV da figura 4.2 é possível obter a

potência consumida através da expressão $P = IV$, cujo comportamento em função do raio do pedestal encontra-se na figura 4.6.

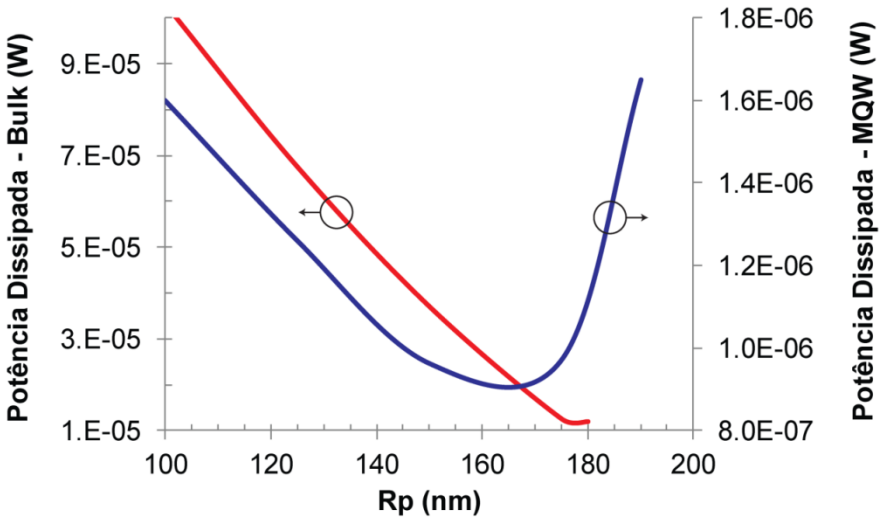


Fig. 4.6: Potência total dissipada em função do raio do pedestal para o dispositivo com meio ativo de MQW (curva em azul) e *bulk* (curva em vermelho).

A curva em vermelho na figura 4.6, de um dispositivo com meio ativo *bulk*, mostra que a potência consumida pelo dispositivo diminui linearmente com o aumento do raio do pedestal, o que é de se esperar já que a dissipação nesse caso é proporcional à resistência elétrica em série da estrutura que muda com a área da seção transversal. Logo, em termos de potência consumida, um nanolaser com o meio ativo *bulk* é melhor sem a formação de um pedestal, ou seja, a cavidade deve constituir apenas de um pilar dielétrico.

Já no caso da potência consumida em um dispositivo cujo meio ativo é de MQW, curva em azul na figura 4.6, temos um comportamento similar ao da corrente de limiar. Para raios de pedestais menores que certo valor (165 nm neste caso) é necessário aplicar uma grande diferença de potencial entre as extremidades da cavidade para gerar corrente suficiente para levar portadores ao meio ativo, novamente devido à resistência. A partir de certo valor (165 nm neste caso), como o máximo do ganho começa a ficar distante do comprimento de onda ressonante da cavidade, é necessária uma alta corrente elétrica para injetar portadores o suficiente na região ativa.

É interessante também saber qual a variação de temperatura causada pela potência dissipada devido à injeção de portadores. Considerando o pior dos casos, onde toda a corrente elétrica é dissipada em forma de calor pela cavidade, obtemos através de uma simulação por elementos finitos o resultado da figura 4.7 (a).

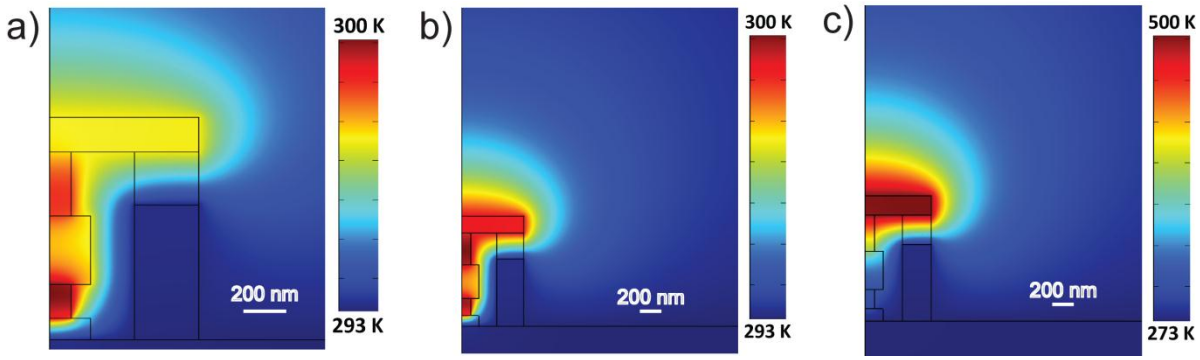


Fig. 4.7: Mapas térmicos para o dispositivo *bulk* considerando contatos ôhmicos (a) ideais, (b) com Rc = $1x10^{-7}$ Ωm^2 e (c) com Rc = $1x10^{-5}$ Ωm^2. Neste caso o raio do pedestal é de 150 nm.

Escolhemos mostrar o resultado para o *bulk* apenas como ilustração do efeito de auto-aquecimento, já que este dispositivo apresenta uma potência dissipada uma ordem de grandeza maior do que o outro. Na figura 4.7 (a) vemos que para uma potência dissipada de 0.3 μW o aquecimento é de menos de 10 K no pedestal inferior, próximo à região de injeção de portadores. Se considerarmos agora um contato ôhmico não ideal, mas com a melhor resistência específica obtida na literatura (para a liga com a qual faremos o eletrodo), R_c = $1x10^{-7}$ Ωm^2, o aquecimento continua menor que 10 K, porém o aquecimento aumenta no pedestal superior, próximo à região de injeção de portadores, como mostra a figura 4.7 (b) [56]. Porém, é muito difícil fabricar bons contatos ôhmicos para injeção de portadores em estruturas tão pequenas, muitas vezes ficando ordens de grandeza abaixo de um bom contato. Por exemplo, se considerarmos um contato com R_c = $1x10^{-5}$ Ωm^2, o aquecimento aumenta significativamente para quase 100 K na região ativa, chegando a 200 K na região do contato, como mostra a figura 4.7 (c). Assim, vemos quão importante é otimizar a injeção de portadores para reduzir os efeitos de auto-aquecimento que também podem ser gerados por outras fontes de dissipação e podem prejudicar a performance de um nanolaser metálico-dielétrico, chegando até a inibir a emissão estimulada.

Neste ponto, ao contrário de qualquer nanolaser projetado e desenvolvido até então, temos dois dispositivos otimizados levando em conta não só o confinamento do modo eletromagnético, mas também levando em conta a injeção de portadores no meio ativo. Para a cavidade com um meio ativo *bulk*, escolhemos um raio de pedestal de 180 nm, que resulta na menor densidade de portadores de limiar, corrente de limiar e potência consumida. Já para a cavidade com um meio ativo de múltiplos poços quânticos, escolhemos um raio de pedestal de 150 nm, pois está dentro de uma região com baixo consumo de potência e cria uma maior robustez no processo de fabricação do dispositivo. Isso porque uma das etapas de fabricação mais crítica e difícil de ser calibrada é a corrosão do InP para formar os pedestais.

4.8 Um resumo da otimização

Para entender melhor o resultado final da otimização dos dois dispositivos é preciso visualizar em conjunto a otimização da cavidade e a da injeção de portadores. Começaremos analisando o ganho material disponível em um regime de baixa e de alta injeção para as duas heteroestruturas, MQW e *bulk*, conforme ilustra a figura 4.8.

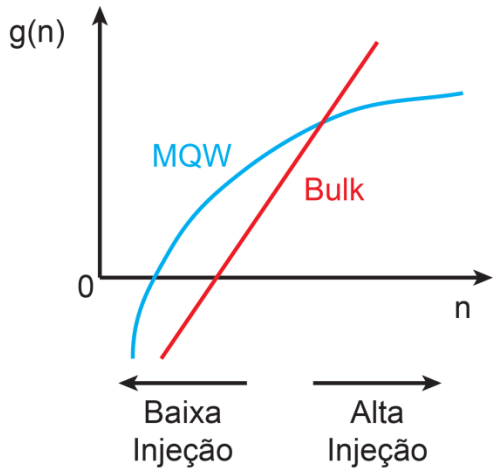


Fig. 4.8: Ilustração do ganho material em função da densidade de portadores para um meio ativo de MQW, em vermelho, e um *bulk*, em azul.

As curvas da figura 4.8 ilustram o comportamento do ganho material em função da densidade de portadores no meio ativo, resultado obtido no capítulo 3. Devido à menor densidade de portadores de transparência (densidade na qual as curvas de ganho passam pelo zero), o ganho do meio MQW (curva em azul) é maior do que o ganho do meio *bulk* (curva em vermelho) para um regime de baixa injeção. Em capítulos anteriores, comentamos que dadas as altas perdas por radiação desse tipo de cavidade e consequentemente um alto ganho de limiar, os materiais *bulk* poderiam ser melhores do que os MQW, pois esperávamos estar trabalhando em um regime de alta injeção de portadores, no qual o ganho do meio *bulk* passa a ser maior do que o ganho do meio MQW. Entretanto, o resultado da figura 4.4 comprova que ainda estamos em um regime de baixa injeção, onde a densidade de portadores de limiar para o meio de MQW é da ordem de 3.5×10^{18} cm^{-3}. Já para o meio *bulk* observamos uma densidade de limiar aproximadamente duas vezes maior, mas que não justifica a corrente de limiar obtida, 100 x maior. A princípio, o meio de ganho de MQW parece ser a melhor solução, porém temos alguns comentários a serem feitos.

Para conseguirmos simular a injeção de portadores nas heteroestruturas utilizamos uma malha cuja resolução é de 25 Å, enquanto que os poços quânticos possuem 100 Å de espessura. Assim, temos um erro de ± 12.5 Å no cálculo de portadores dentro dos poços, ou seja, estamos superestimando a densidade de portadores nos poços quânticos já que podemos estar incluindo

portadores que estão, na verdade, dispostos nas barreiras, cuja densidade de portadores na condição de limiar já é da ordem de $6.5x10^{18}$ cm^{-3}.

Outra justificativa, e talvez a mais razoável para a discrepância entre as correntes de limiar, é a recombinação superficial, que varia com n^2. Logo, quanto maior a densidade de portadores de limiar, maior será a corrente de limiar, já que muitos portadores recombinarão com estados de superfície.

Por último, devemos comentar que o SILVACO não leva em consideração a interação radiação-matéria de forma adequada, não permitindo que avaliemos a condição de limiar de fato. Ou seja, tratamos apenas das características eletrônicas das heteroestruturas. Assim, faremos uma análise comparativa entre as duas cavidades considerando a existência de modos ressonantes na cavidade. Para tal, mostramos na figura 4.9 as curvas do ganho de limiar em função do comprimento de onda ressonante junto com o ganho material em função do comprimento de onda calculado para a corrente de limiar dos dispositivos otimizados.

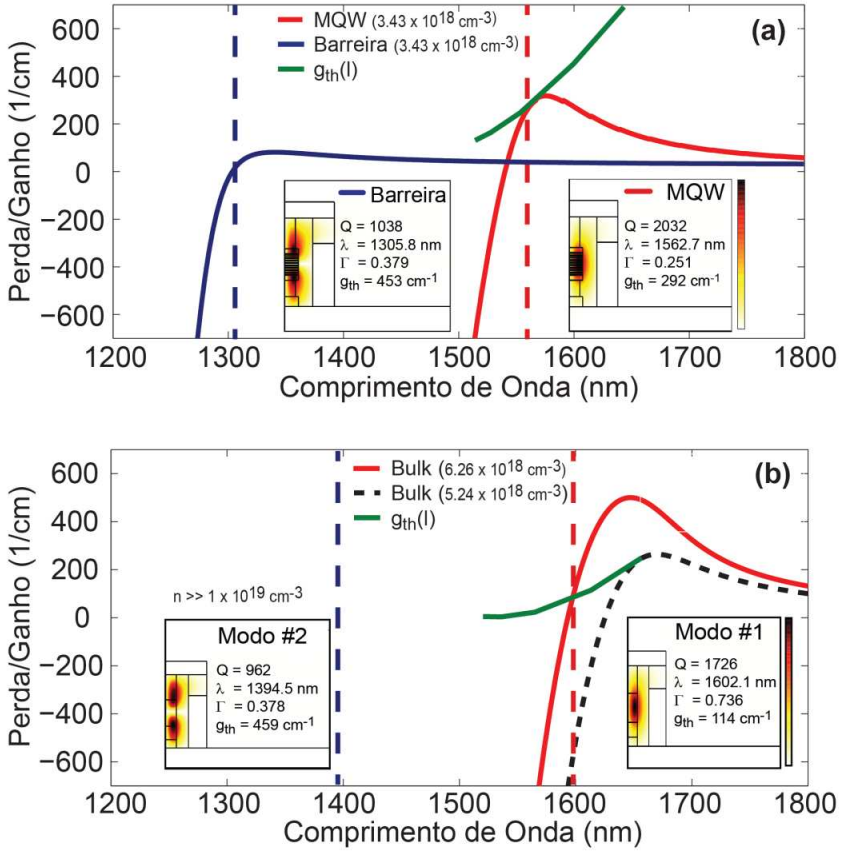


Fig. 4.9: Curvas de ganho em função do comprimento de onda para a densidade de portadores de limiar para o modo fundamental (curva em vermelho) e para o segundo modo ressonante (curva em azul) no caso de (a) MQW e (b) *bulk*. As curvas em verde são o ganho de limiar em função do comprimento de onda ressonante da cavidade. Nos *insets* temos os modos ressonantes e suas respectivas características, onde a escala de cor indica a intensidade do campo elétrico. As linhas tracejadas em vermelho e azul indicam o comprimento de onda ressonante do primeiro e segundo modo confinado respectivamente.

No capítulo 2 otimizamos as cavidades e obtivemos uma relação entre o ganho de limiar e o raio do pedestal. Essa relação também pode ser expressa em termos do comprimento de onda ressonante da cavidade, e é mostrada na figura 4.9 através das curvas verdes para o dispositivo com múltiplos poços quânticos e *bulk*, fig. 4.9 (a) e (b) respectivamente.

Já neste capítulo, otimizamos os nanolasers como um todo, considerando a cavidade eletromagnética e a injeção de portadores no meio ativo, e chegamos a duas cavidades otimizadas, uma para múltiplos poços quânticos e outra para *bulk*. Com a corrente de limiar de cada uma delas, sabemos a densidade de portadores de limiar, que é de $3.43x10^{18}$ cm^{-3} para o modo confinado no nanolaser com meio de ganho de MQW e $6.26x10^{18}$ cm^{-3} para o modo confinado no nanolaser com meio de ganho *bulk*. As curvas em vermelho mostram então o ganho material disponível em função do comprimento de onda para essa densidade de portadores de limiar. Para essas cavidades otimizadas, a linha tracejada em vermelho indica o comprimento de onda ressonante. Vemos que no caso do nanolaser com meio de ganho de MQW, fig 4.9 (a), o ganho de limiar (curva verde) tangencia a curva de ganho (curva vermelha) exatamente no comprimento de onda ressonante da cavidade (linha tracejada vermelha). Isso significa que nosso projeto está realmente otimizado, pois o ganho de limiar está próximo do máximo da curva de ganho. Já para o nanolaser com meio de ganho *bulk*, fig. 4.9 (b), o ganho de limiar (curva verde) ultrapassa a curva de ganho (curva vermelha) no comprimento de onda ressonante (linha tracejada vermelha) muito abaixo do máximo de ganho. Isso significa que a cavidade não está realmente otimizada. O motivo é o limite superior do raio do núcleo que usamos no capítulo 2. A curva verde mostrada foi calculada além do limite imposto para esse raio, o que nos permite verificar que ela tangencia uma curva de ganho calculada com $5.24x10^{18}cm^{-3}$ portadores no meio ativo, linha em preto tracejada na figura 4.9 (b). Porém, o comprimento de onda referente a essa cavidade seria maior que 1650 nm, estando longe do nosso interesse. Sendo assim, continuaremos a trabalhar com o dispositivo de meio de ganho com MQW otimizado e com o dispositivo de meio de ganho *bulk* parcialmente otimizado.

Devemos lembrar que no capítulo 2, ao calcular o modo ressonante para cada uma das cavidades, havia um modo de segunda ordem inerente ao tipo de cavidade. No caso do nanolaser com meio de ganho *bulk*, esse segundo modo apresenta um ganho de limiar muito alto, que só pode ser atingido com uma densidade de portadores maior que $1x10^{19}cm^{-3}$, conforme mostra o *inset* da esquerda na figura 4.9 (b). Já no caso do nanolaser com meio de ganho de MQW, como existe a probabilidade dos portadores estarem nas barreiras, quando a densidade de portadores nos poços for de $3.43x10^{18}$ cm^{-3}, a barreira já apresenta uma curva de ganho como a curva em azul na figura 4.9 (a). Para essa cavidade em questão, o comprimento de onda ressonante do modo de segunda ordem encontra-se dentro da região de ganho provido pela barreira, conforme mostra o *inset* da esquerda na figura 4.9 (a). Isso implica em recombinação de portadores e emissão no comprimento de onda da barreira que, no caso do projeto permitir, pode se tornar um laser.

Independentemente de a cavidade permitir ou não um modo ressonante na barreira, o fato da barreira começar a ser preenchida por portadores, conforme os poços são preenchidos em um regime de alto bombeio, indica que haverá um aumento da corrente de limiar do modo do poço devido à perda de portadores para a barreira, criando uma grande desvantagem para o uso de MQW como meio de ganho em nanolasers desse tipo, já que portadores serão distribuídos entre os poços e as barreiras. Para levar em consideração a emissão espontânea e estimulada nas barreiras aplicaremos um modelo de reservatório de portadores às equações de taxa tipicamente utilizadas para nanolasers, levando em consideração um tempo de vida dos portadores nas barreiras e nos poços. Esse modelo será desenvolvido e aplicado no próximo capítulo, onde poderemos chegar a uma conclusão sobre a influência do meio de ganho no desempenho de nanolasers de semicondutor metálico-dielétricos.

4.9 Conclusão

Neste capítulo mostramos o resultado da solução auto-consistente das equações de Poisson, de transporte e de continuidade aplicadas em nossas heteroestuturas. Unindo esse resultado com as propriedades dos modos eletromagnéticos confinados em uma cavidade formada por essa heteroestrutura e com o ganho material calculado anteriormente, mostramos pela primeira vez um projeto otimizado de um nanolaser metálico-dielétrico que considera não só a otimização do modo eletromagnético, mas que também leva em conta a injeção de portadores e consequentemente a dissipação térmica na cavidade.

Obtivemos um nanolaser metálico-dielétrico totalmente otimizado para o caso de um meio ativo com MQW e parcialmente otimizado para o caso de um meio ativo *bulk*. A princípio o dispositivo com meio de ganho de MQW apresenta melhores resultados do que o meio *bulk*, porém ainda não conseguimos explorar o desempenho dos nanolasers considerando de fato a interação da matéria com o modo eletromagnético que leva à emissão estimulada de radiação.

No próximo capítulo resolveremos as equações de taxa para os nanolasers otimizados neste capítulo, obtendo de fato a variação de portadores e a potência emitida em função da corrente injetada na cavidade, de forma que poderemos comparar de fato o desempenho dos dois nanolasers propostos.

5. Desempenho dos nanolasers

Neste capítulo utilizaremos todos os resultados calculados anteriormente para as duas cavidades, uma com meio de ganho de múltiplos poços quânticos e a outra com meio de ganho *bulk*, para resolver as equações de taxa que descrevem o comportamento dos lasers, em termos da densidade de portadores e de fótons. Os resultados que serão aqui apresentados resultaram em uma publicação recente de minha autoria [57].

No caso do dispositivo com meio de ganho de múltiplos poços quânticos, utilizamos um modelo de reservatório para incluir a variação dos portadores nas barreiras nas já conhecidas equações de taxa. Mostraremos que, enquanto um nanolaser semicondutor metálico-dielétrico com meio *bulk* tem o limiar do modo fundamental alcançado, o nanolaser com um meio de múltiplos poços quânticos apresenta saturação da emissão do modo fundamental (modo dos poços) devido ao surgimento da emissão de um segundo modo (modo das barreiras), contrariando os resultados obtidos no capítulo 4 que previam um menor limiar para o meio ativo de poços quânticos.

5.1 Equações de taxa: o caso *bulk*

Consideremos uma cavidade ressonante que tenha i modos ressonantes, cada um com uma frequência ω_i e um fator de qualidade Q_i. O tempo de vida do fóton dessa cavidade será $\tau_i = \frac{Q_i}{\omega_i}$ [32]. A densidade de fótons p_i no modo i é:

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{p_i}{\tau_i} = -\frac{\omega_i}{Q_i} p_i \qquad (5.1)$$

Considere que nesta mesma cavidade seja possível ter ganho e emissão estimulada de radiação com uma taxa R_{est}^i para o modo i. Como há emissão estimulada, deve haver emissão espontânea. Consideramos então que uma parcela β_i dessa emissão espontânea total, R_{esp}, ocorre no modo i da cavidade. A equação completa para a densidade de fótons fica:

$$\frac{dp_i}{dt} = \Gamma_i \beta_i R_{esp} + \left(R_{est}^i - \frac{\omega_i}{Q_i}\right) p_i \qquad (5.2)$$

onde Γ_i é o fator de confinamento para o modo confinado i. Os fótons que são emitidos (saem da cavidade), que são os fótons que podemos medir, aparecem externamente com uma taxa:

$$\frac{dp_i^{ext}}{dt} = -\frac{\omega_i}{Q_i} p_i \qquad (5.3)$$

Nossa cavidade é formada por um meio semicondutor que apresenta ganho material e emissão estimulada de radiação. Ambos aumentam com a separação dos quase-níveis de Fermi,

$\Delta\mu$, que aumenta com a injeção de portadores, n, através da injeção de uma corrente elétrica I. Considerando que a densidade de elétrons e buracos é igual, como já fizemos no cálculo do ganho, a taxa da densidade de portadores é escrita como:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{I}{qV} - R_{NR} - R_{esp} - R_{est}^{i} p_i \qquad (5.4)$$

onde R_{NR} é taxa de recombinação não radiativa de portadores, escrita como [58]:

$$R_{NR} = \frac{Av_s}{V} n + Cn^3 \quad (5.5)$$

O primeiro termo da expressão 5.5 é a recombinação superficial de portadores e o segundo termo a recombinação por efeito Auger. A é a área da superfície exposta e V o volume do meio ativo. C é o coeficiente Auger de recombinação. Para a velocidade de recombinação superficial utilizamos o valor de $5\text{x}10^4$ cm/s e para o coeficiente Auger, $1.1\text{x}10^{-31}$ cm^6/s, valores escolhidos considerando a composição da nossa liga de InGaAs [24].

Resolvendo as duas expressões, 5.2 e 5.4, podemos obter a variação da densidade de portadores e de fótons em função da corrente injetada na cavidade. Isso é feito resolvendo o problema no tempo até o sistema atingir seu estado estacionário. Como medimos a potência P emitida pelo nanolaser, e não a densidade de fótons, é mais interessante mostrar os resultados das simulações utilizando a expressão:

$$P_{ext} = \hbar\omega_i V p_i^{ext} \qquad (5.6)$$

Com esse sistema de equações já podemos simular o nanolaser que utiliza um meio de ganho *bulk*, para o qual devemos considerar dois modos a serem resolvidos, que são os dois modos ressonantes da cavidade, calculados anteriormente. Os resultados da simulação para esse dispositivo encontram-se na figura 5.1:

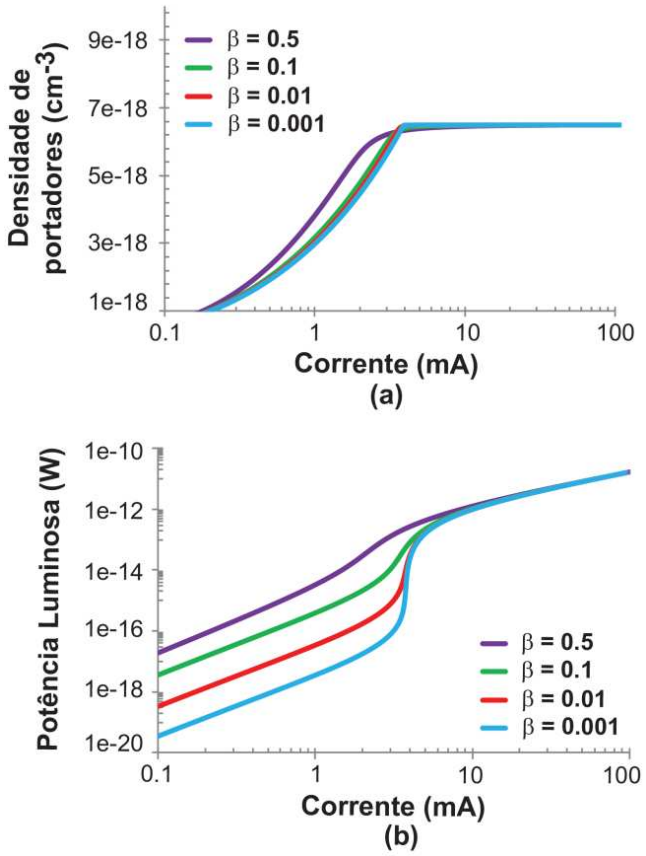


Fig. 5.1: (a) Curvas da densidade de portadores e (b) curvas log-log da potência luminosa em função da corrente injetada no dispositivo com meio ativo *bulk*. As cores indicam os vários β's utilizados na simulação.

As curvas da figura 5.1 (a) mostram a variação da densidade de portadores com a corrente injetada na cavidade para diversos β's. As curvas foram simuladas para os dois modos ressonantes da cavidade, considerando que eles possuem o mesmo fator de acoplamento de emissão espontânea. Como os dois modos obtêm ganho do mesmo material, o máximo β possível é 0.5, considerando que a emissão espontânea acopla igualmente entre os dois modos. Não consideramos o caso onde o fator de acoplamento do modo principal é maior do que o fator de acoplamento para qualquer um dos outros modos confinados. Para correntes baixas observa-se um aumento da densidade de portadores que se torna fixa (*carrier clamping,* do inglês) quando o nanolaser atinge seu limiar, que é por volta de 3 mA. Conforme aumentamos o acoplamento da emissão espontânea no modo laser (β), a transição da emissão espontânea para estimulada é mais suave, conforme visto no ponto de inflexão da curva.

As curvas em escala log-log da potência luminosa emitida em função da corrente injetada na cavidade para os diversos β's são mostradas na figura 5.1 (b). Para pequenas correntes há apenas emissão espontânea, que é proporcional ao acoplamento da emissão espontânea no modo

fundamental. Aumentando a corrente até aproximadamente 3 mA observamos o limiar do nanolaser e a emissão estimulada passa a dominar os processos de recombinação radiativa. Isso é notado pela linearidade da curva após o limiar, cuja inclinação é praticamente igual à inclinação da região com emissão estimulada para baixas correntes. A pequena diminuição dessa inclinação está relacionada ao efeito da recombinação superficial de portadores que é dominante em cavidades tão pequenas. A região que contém a inflexão da curva, possibilitando identificar o limiar, caracteriza um regime de emissão espontânea amplificada. Após o limiar, o travamento da densidade de portadores em conjunto com o crescimento linear da potência indica que a partir desse ponto, cada par de portador inserido na cavidade recombina, dando origem a um fóton, uma característica típica de um laser. Novamente, quanto maior o acoplamento da emissão espontânea no modo ressonante, mais sutil a transição da emissão espontânea para a estimulada. Conforme notamos nas curvas, não há nem sinal do segundo modo ressonante. No caso da densidade de portadores isso é óbvio, já que ambos os modos compartilham o mesmo meio de ganho e portando dividem a mesma densidade de portadores. Já no caso da potência emitida, obtemos valores ordens de grandeza menor para o segundo modo, que não chegará jamais ao seu limiar, já que os portadores travam quando o modo fundamental chega ao seu limiar devido à recombinação estimulada.

Esses resultados indicam que o segundo modo ressonante inerente a esse tipo de cavidade não é um problema no caso de utilizarmos um meio de ganho *bulk*. Para tratarmos o nanolaser com um meio de ganho de múltiplos poços quânticos, é necessário incluirmos a existência de portadores na região das barreiras, conforme mostraremos na seção seguinte.

5.2 Equações de taxa: a barreira como um reservatório de portadores

Os poços quânticos começaram a ser utilizados como meio de ganho em lasers de semicondutor devido à pequena densidade de transparência que proporcionavam [59,60]. Em consequência, eles podiam prover um maior ganho material com uma menor densidade de portadores, utilizando então uma menor corrente elétrica. Com isso foi possível reduzir o tamanho das cavidades. Porem, a redução excessiva da cavidade levava a uma inesperada alta da corrente de limiar, mesmo com os altíssimos ganhos providos pelas sequências de poços quânticos [61]. Logo em seguida, Reisinger et. al. explicou que apesar dos poços quânticos permitirem correntes de limiar ultra-pequenas, quase insensíveis ao comprimento da cavidade para lasers de centenas de microns, eles podem ser indesejados para cavidades muito pequenas devido a três processos: recombinação nos vales L da banda de condução (um vale com transição indireta para a banda de valência), recombinação Auger e fuga de portadores pelas barreiras [62].

O primeiro mecanismo foi proposto por Sugimura e envolve o preenchimento do vale L da banda de condução, no qual os elétrons podem recombinar não radiativamente com buracos através da participação de fônons da rede [63]. Como a densidade de estados eletrônicos é maior no vale L do que no vale Γ (no qual a transição entre as bandas é direta) devido à diferente massa

efetiva, em um regime de alta injeção, começa a haver a saturação do ganho na transição de interesse devido ao preenchimento desses estados eletrônicos inacessível em um regime de baixa injeção de portadores.

O segundo mecanismo considera a recombinação não radiativa em um processo que envolve três portadores [64]. Esse processo é responsável pelos lasers de InGaAsP serem fortemente dependentes da temperatura, o que pode levar à saturação da potência da luz emitida pelo laser com o aumento da corrente [65]. Tal efeito é inerente ao material, e a única maneira de evitá-lo é reduzindo efeitos de auto-aquecimento nos nanolasers, a não ser que utilizemos materiais com maior *band gap*, cujos coeficientes Auger são menores. Porém não conseguiríamos ter emissão em comprimentos de onda dentro da banda C.

O terceiro mecanismo é a fuga de portadores pelas barreiras [62]. Com a alta densidade de portadores necessária para o limiar, a separação dos quase-níveis de Fermi é tão grande que os portadores atingem o nível eletrônico das barreiras. Estando nas barreiras, os portadores podem se deslocar por deriva ou difusão, saindo do meio ativo. Mais ainda, eles podem recombinar radiativamente na região das barreiras dando origem à emissão em outros comprimentos de onda que não o modo ressonante fundamental. Além disso, dependendo da profundidade de poço quântico, o alto nível de bombeio pode permitir a transição entre outros níveis de energia quantizados, o que significa um deslocamento no comprimento de onda emitido. Tais deslocamentos do comprimento de onda do ganho podem ser extremamente inibidores de um nanolaser, cujo comprimento de onda ressonante é muito específico do design da cavidade.

Todos esses efeitos já haviam sido explicados, caracterizados e considerados as causas das altas correntes de limiar em lasers de poços quânticos de cavidade reduzida (dezenas de microns) principalmente na década de 90. Porém tais modelos nunca foram aplicados em nanolasers de semicondutor, o que pode explicar porque vários pesquisadores, se não todos na área, sugerirem os poços quânticos como o melhor meio de ganho. Entretanto, nunca um nanolaser metálico-dielétrico com poços quânticos e bombeio eletrônico foi demonstrado. Nossa tarefa era então mostrar que possivelmente este problema deve ser um problema fundamental para nanolasers. Essencialmente, o problema é que os poços quânticos, apesar de proverem ganho sob baixa inversão de população e, portanto, gerarem as menores densidades de corrente limiar reportadas em lasers grandes, são bastante limitados quando um alto ganho é necessário, que é o caso dos nanolasers.

No nosso modelo, não incluiremos os efeitos de preenchimento da banda L. A recombinação Auger já é considerada dentro do termo de taxa de recombinação não radiativa, R_{NR}, inserido na equação de taxa de portadores. Nossa contribuição será inserir o efeito da fuga de portadores pelas barreiras. O efeito de preenchimento dos estados eletrônicos da barreira é analisado empregando um modelo de reservatório para portadores proposto por Rideout et. al. [31]. Nesse modelo, consideramos dois reservatórios para portadores: um para os portadores confinados nos poços e outro para portadores que não estão confinados e, portanto, estão na

região das barreiras. Esses dois reservatórios podem trocar portadores com constantes de tempo τ_{cap} and τ_{esc}, para captura e fuga, respectivamente. O tempo de captura descreve o deslocamento do portador da barreira para o poço enquanto que o tempo de fuga é relacionado à situação oposta. Um esquema dessa troca de portadores é mostrado na figura 5.2.

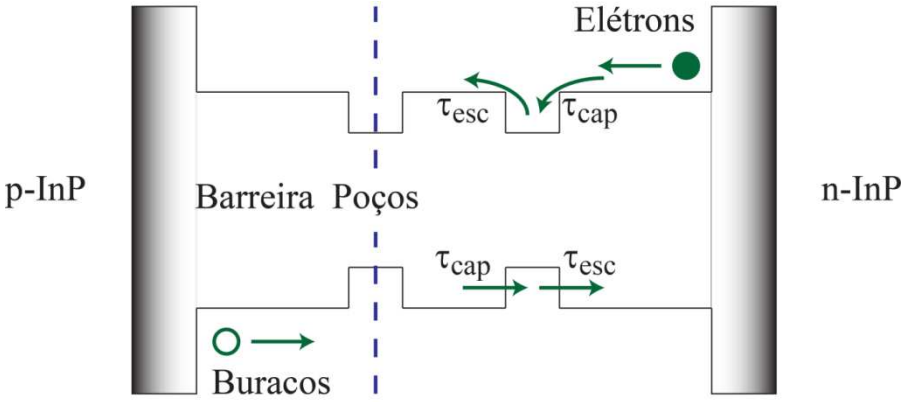


Fig. 5.2: Esquema da injeção de portadores, buracos e elétrons, na região de múltiplos poços quânticos considerando a dinâmica de captura e fuga de portadores.

Esses dois tempos característicos são descritos por transições quânticas assistidas por fônons, tunelamento, emissão termiônica e difusão clássica de portadores [44]. As transições assistidas por fônons descrevem as transições para o vale da banda L e tem pequena contribuição. O tunelamento depende da altura efetiva da barreira e de sua largura, bem como do campo elétrico aplicado [66]. A emissão termiônica depende fortemente da altura efetiva da barreira [67]. A difusão clássica é descrita pela equação de transporte mostrada no início do capítulo 4. Embora haja todas essas dependências, utilizaremos um valor médio constante para os tempos de captura e fuga, pois nossa ideia é obter o desempenho desse nanolaser e não descrever completamente todos os efeitos que causam a captura / fuga de portadores. Os valores que escolhemos já foram utilizados por outros autores. Cabe enfatizar que um estudo mais completo desses nanolasers aplicados à modulação necessitaria de uma análise mais completa dessa dinâmica.

Para aplicar esse modelo, construímos um conjunto de 4 equações de taxa: uma equação de taxa para fótons no comprimento de onda dos poços, uma para fótons no comprimento de onda da barreira, uma para portadores nos poços e uma para portadores nas barreiras. Considerando uma distribuição uniforme e homogênea de portadores ao longo dos poços e das barreiras, consideramos o conjunto dos 10 poços como um só volume, bem com as barreiras. Assim, temos as 4 equações de taxa:

$$\frac{dn_b}{dt} = \frac{I}{qV_b} - R_{NR} - R_b - \frac{n_b}{\tau_{cap}} + \frac{n_{QW}}{\tau_{esc}}\left(\frac{V_{QW}}{V_b}\right) - v_g p_b g_b \tag{5.7}$$

$$\frac{dn_{QW}}{dt} = \frac{n_b}{\tau_{cap}}\left(\frac{V_b}{V_{QW}}\right) - R_{NR} - R_{QW} - \frac{n_{QW}}{\tau_{esc}} - v_g p_{QW} g_{QW} \tag{5.8}$$

$$\frac{dp_b}{dt} = \Gamma_b \beta_b R_b + \left(\Gamma_b v_g g_b - \frac{\omega_b}{Q_b}\right) p_b \tag{5.9}$$

$$\frac{dp_{QW}}{dt} = \Gamma_{QW} \beta_{QW} R_{QW} + \left(\Gamma_{QW} v_g g_{QW} - \frac{\omega_{QW}}{Q_{QW}}\right) p_{QW} \tag{5.10}$$

onde n_b e n_{QW} são as densidades de portadores nas barreiras e nos poços, respectivamente, V_b e V_{QW} os volumes da região de barreiras e poços, respectivamente, R_b e R_{QW} são a emissão espontânea nas barreiras e nos poços, respectivamente, p_b e p_{QW} são as densidades de fótons nas barreiras e nos poços, respectivamente, v_g é a velocidade de grupo, g_b e g_{QW} são o ganho nas barreiras e nos poços, respectivamente, e β_b e β_{QW} são os fatores de acoplamento da emissão espontânea com o primeiro e o segundo modo ressonante, de frequências ω_b e ω_{QW} respectivamente.

Para a dependência do ganho óptico e da taxa de emissão espontânea com a densidade de portadores injetados, utilizamos os resultados do capítulo 3. Os valores da velocidade de recombinação superficial e do coeficiente Auger são os mesmos utilizados nas simulações para o dispositivo com meio de ganho *bulk*. Para os tempos característicos de captura e fuga, τ_{cap} e τ_{esc}, utilizamos valores teóricos encontrados na literatura, de 60 e 300 ps respectivamente [49]. Com tempos característicos tão pequenos garantimos o equilíbrio térmico dos portadores, o que garante que podemos utilizar as equações de taxa descritas.

Novamente resolvemos o problema dinamicamente até o sistema atingir seu estado estacionário, e utilizamos a relação (5.6) para mostrar os resultados em termos da potência emitida e não da densidade fotônica. Os resultados da simulação para o dispositivo com MQW encontram-se na figura 5.3.

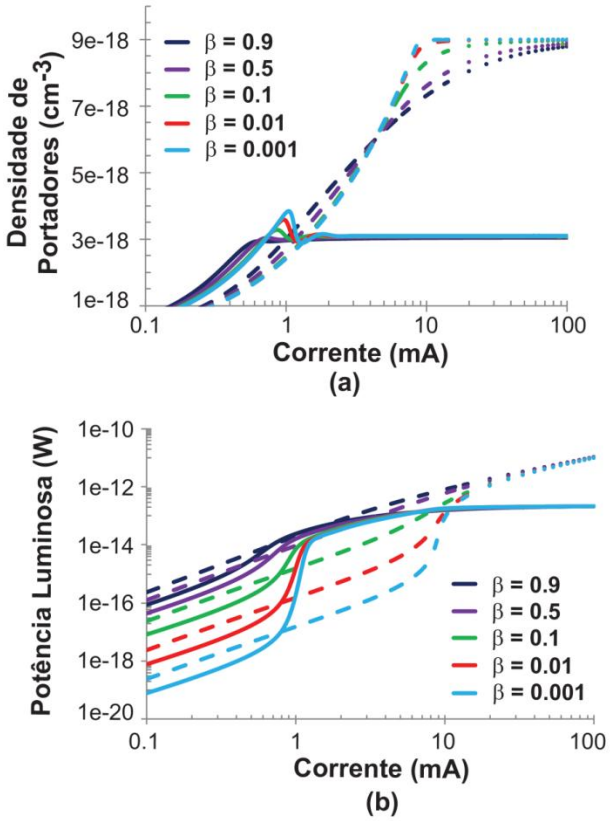


Fig. 5.3: (a) Curvas da densidade de portadores e (b) curvas log-log da potência luminosa em função da corrente injetada no dispositivo com meio ativo de múltiplos poços quânticos. As linhas sólidas são para o modo do poço quântico e as linhas tracejadas são para o modo da barreira. As cores indicam os vários β's utilizados na simulação.

No caso desse dispositivo com múltiplos poços quânticos, podemos utilizar valores maiores para o termo de acoplamento da emissão espontânea, já que temos dois materiais diferentes provendo ganho para cada um dos modos ressonantes da cavidade, um com comprimento de onda dentro do ganho material dos poços e outro com comprimento de onda dentro do ganho material das barreiras, representados pelas curvas sólidas e tracejadas, respectivamente. Por isso utilizamos um β de até 0.9.

Nas curvas da figura 5.3 (a) observamos a variação da densidade de portadores em função da corrente injetada na cavidade. Para correntes baixas vemos um aumento da densidade de portadores nos poços, que sempre é maior do que a densidade de portadores nas barreiras. Aumentando a corrente até por volta de 0.4 mA começamos a observar o travamento da densidade de portadores nos poços. A princípio pode-se observar as curvas e julgar que o modo ressonante dos poços atingiu seu limiar, porém nota-se que não há saturação da densidade de portadores nas barreiras e sim no poço. Isso não deveria ocorrer caso o primeiro modo realmente tivesse alcançado seu limiar. Novamente a saturação é mais sutil quanto maior for o acoplamento

da emissão espontânea. Notamos também oscilações inesperadas na densidade de portadores nos poços próxima à sua saturação. Tais oscilações são provenientes de uma nova dinâmica que surge no problema. Essa oscilação é referente ao transporte de portadores entre poços e barreiras e vice-versa. Para entender o que realmente acontece nesse caso devemos analisar em conjunto o que acontece com a potência de luz emitida pela cavidade.

As curvas da figura 5.3 (b) mostram a variação da potência luminosa dos dois modos emitida pela cavidade em função da corrente elétrica. Para pequenas correntes novamente vemos apenas emissão espontânea de radiação, que é proporcional ao acoplamento da emissão espontânea com o modo ressonante e é maior para a barreira, pois seu modo ressonante apresenta um Q menor do que o modo do poço quântico. Como o fator de qualidade de uma cavidade indica o tempo de vida de um modo fotônico, quando menor for seu valor, maior a radiação que escapa da cavidade. Aumentando a corrente injetada para uma faixa de 0.5 a 1 mA, entramos em um regime de emissão espontânea amplificada para o modo dos poços quânticos, enquanto que o modo das barreiras continua em um regime de eletroluminescência. Aumentando um pouco mais a corrente elétrica, há a impressão de que o modo dos poços quânticos atinge seu limiar, porém, a potência luminosa não aumenta linearmente como o esperado para um laser. Ao invés disso a emissão satura e se mantém com uma potência constante. Enquanto isso, com o aumento da corrente a emissão do modo das barreiras passa pelo regime de emissão espontânea amplificada e atinge seu limiar por volta de 10 mA. Neste caso, a potência emitida continua a aumentar linearmente com o aumento da corrente na situação de pós-limiar.

Da análise em conjunto das curvas da figura 5.3 podemos concluir que, no caso de um dispositivo com meio de ganho de múltiplos poços quânticos, há uma saturação da emissão do modo dos poços devido ao surgimento da emissão de um modo das barreiras, que consegue atingir seu limiar. Se fosse possível obter um material com mais ganho ou então projetar uma cavidade com perdas menores (o que reduziria o ganho de limiar), todas as curvas sólidas da figura 5.3 (b) se deslocariam para a esquerda e a corrente de limiar seria menor, talvez evitando a emissão no modo da barreira. Nesse mesmo cenário, mas na situação oposta, se nossa cavidade apresentasse perdas maiores ou então se nosso material provesse menos ganho, todas as curvas sólidas da figura 5.3 (b) se deslocariam para a direita, indicando um aumento da corrente de limiar, que significa que esse laser dificilmente funcionaria, ao menos no modo dos poços de interesse. Como esse problema de preenchimento dos estados eletrônicos das barreiras é inerente ao meio de ganho de múltiplos poços quânticos, e como qualquer desvio das propriedades de confinamento do modo eletromagnético para esse tipo de nanolaser é fortemente dependente das dimensões da cavidade, qualquer desvio do valor otimizado durante um processo de fabricação pode resultar em baixo desempenho e até inibição da cavidade operando como um laser.

Os resultados para o desempenho dos nanolasers obtidos aqui contrariam os resultados obtidos no capítulo 4. Porém, no capítulo anterior há duas questões importantes a serem revisitadas. A primeira trata da fuga nas barreiras que o modelo de reservatório prevê tão bem e que na solução numérica do SILVACO talvez não tenhamos a resolução necessária para separar

a densidade no poço e na barreira. Segundo, no capítulo 4, consideramos apenas a injeção de portadores na cavidade sem considerar a existência de modos eletromagnéticos na barreira que podem consumir estes portadores e induzir mais fuga no estado estacionário. Neste capítulo 5, consideramos tanto a perda de portadores para a barreira como a interação dos portadores confinados no meio de ganho, permitindo emissão estimulada de radiação, e concluímos que a presença de um segundo modo ressonante é prejudicial ao desempenho de um nanolaser podendo até inibir o limiar. Uma maneira de eliminar um segundo modo ressonante nas cavidades seria reduzir a espessura do meio de ganho. Entretanto, tal redução diminuiria o fator de confinamento dos modos além de diminuir a região espacial com ganho material, o que acarretaria em um aumento ainda maior do ganho de limiar e consequentemente da corrente de limiar. Assim, concluímos que o um meio de ganho *bulk* é mais adequado para nanolasers de semicondutor metálico-dielétrico com bombeio eletrônico. Deve-se observar que não é claro para nós se só o efeito da fuga para a barreira é suficiente para deteriorar o nanolaser com meio ativo de poços quânticos ou se o principal problema é a presença de um modo ressonante com comprimento de onda que pode ser gerado pela emissão da barreira.

5.3 Reservatório de portadores

A figura 5.4 mostra um esquema simples de dois reservatórios acoplados para ilustrar o efeito do preenchimento dos estados eletrônicos das barreiras com consequente saturação do preenchimento dos estados eletrônicos dos poços quânticos.

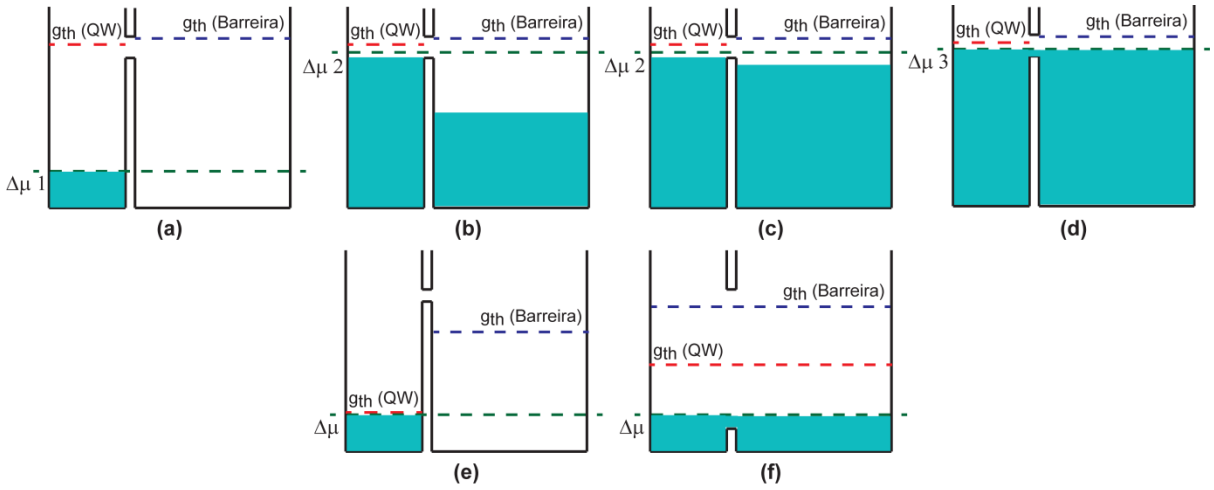


Fig. 5.4: Esquema de um sistema com dois reservatórios acoplados para ilustrar a troca de portadores entre os poços quânticos e as barreiras. A linha em vermelho e em azul representa o ganho de limiar para o modo dos poços e das barreiras, respectivamente, enquanto que a linha em verde representa o nível de bombeio eletrônico Δμ, que aumenta de (a) até (d). As figuras de baixo ilustram um sistema no qual o ganho de limiar para o primeiro modo é (e) menor e (f) maior que a conexão entre os dois reservatórios.

Em todas as figuras o reservatório da esquerda representa os poços quânticos enquanto que o reservatório da direita representa as barreiras. Os reservatórios estão conectados e podem ser preenchidos por portadores até o nível de Fermi, dependente do bombeio, representado pela linha tracejada em verde. Na figura 5.4 (a), o poço quântico começa a ser preenchido até que o nível de bombeio $\Delta\mu 1$ seja alcançado. O preenchimento do reservatório começa para o poço quântico, pois seu *gap* de energia é menor. Quando o bombeio aumenta até certo nível $\Delta\mu 2$, acima da interconexão entre os reservatórios, as barreiras também começam a ser preenchidas como mostra a figura 5.4 (b). Por causa dessa interconexão entre os reservatórios, a densidade de portadores nos poços para de aumentar enquanto houver estados vazios para portadores nas barreiras a serem preenchidos, conforme ilustra a figura 5.4 (c). Apenas quando os dois reservatórios estiverem preenchidos até a região de conexão, em um nível $\Delta\mu 3$, é que o poço passa a ser preenchido novamente, conforme figura 5.4 (d). Entretanto, como a densidade de estados passa a ser muito maior, pois agora temos dois reservatórios a serem preenchidos em conjunto, a variação de portadores em cada reservatório com o aumento de bombeio é muito menor. O limite de preenchimento de cada reservatório é a condição de limiar que acarreta em saturação da densidade de portadores com consequente saturação do ganho material. Essa condição é ilustrada pela linha tracejada em vermelho para o caso do poço e pela linha tracejada em azul para o caso da barreira.

No caso de lasers maiores, o ganho de limiar é muito menor e fica muito abaixo da interconexão com as barreiras, como ilustra a figura 5.4 (e), permitindo o limiar muito antes de a barreira começar a ser preenchida. Mas se temos uma cavidade mal projetada ou um material mal desenvolvido, podemos ter um nível de limiar muito acima da interconexão entre barreira e poço, e o limiar jamais será alcançado, como mostra a figura 5.4 (f). Essa ilustração descreve bem o que acontece no caso de nanolasers de semicondutor, onde o ganho de limiar é tão grande que a interconexão entre poços e barreiras é alcançada facilmente. Independentemente de a barreira estar em um regime de absorção ou amplificação, ela está consumindo portadores.

5.4 Conclusão

Neste capítulo descrevemos brevemente as equações de taxa que utilizamos para simular curvas *LxI* em escala log-log para um dispositivo com meio de ganho *bulk*. Para simular um dispositivo com meio de ganho de múltiplos poços quânticos, desenvolvemos 4 equações de taxa acopladas, para considerar a probabilidade de limiar em um modo ressonante na faixa de ganho provida pela barreira. Comparando o desempenho dos dois dispositivos, chegamos à conclusão de que apenas o *bulk* atinge o seu limiar, apesar de necessitar de uma corrente maior. O dispositivo de múltiplos poços quânticos apresentou saturação da emissão do modo dos poços devido ao surgimento da emissão de um modo de barreira. Assim, acreditamos que um meio de ganho *bulk* é mais adequado no desenvolvimento de nanolasers de semicondutor metálico-dielétricos com bombeio eletrônico. Para dar validade à nossa especulação teórica, no próximo capítulo

fabricaremos dois dispositivos, um com cada meio de ganho proposto. A caracterização dos dois dispositivos será mostrada no capítulo subsequente.

6. Fabricação dos Nanolasers

No capítulo anterior finalizamos as simulações para comparar o desempenho de dois nanolasers de semicondutor metálico-dielétrico, um com meio de ganho de múltiplos poços quânticos e outro com meio de ganho *bulk*. Concluímos que um meio material *bulk* é a melhor escolha para projetos mais robustos de nanolasers.

Neste capítulo, com o objetivo de comparar experimentalmente o desempenho entre os dois nanolasers, descreveremos todo o processo de fabricação dos mesmos. Todas as etapas aqui descritas foram realizadas na sala limpa do CALIT2 (*California Institute for Telecomunication and Information*), que fica na *University of California at San Diego* (UCSD), lugar onde realizei um estágio sanduíche de seis meses. Parte da fabricação foi feita em conjunto com a então também aluna de doutorado, Qing Gu. A fabricação consistiu em dois projetos distintos: o *nanopatch* que descrevemos até então e um laser metálico-dielétrico com emissão de superfície vertical pelo substrato. Com relação ao *nanopatch*, surgiram dificuldades inesperadas nos últimos passos de sua fabricação, conforme descreveremos no final deste capítulo. Por isso, escolhemos outro projeto, que já foi demonstrado experimentalmente, para verificar nossa hipótese da saturação do ganho nos poços quânticos devido à fuga de portadores para as barreiras [19]. Fabricamos dois dispositivos desse tipo, um com meio de ganho *bulk* e o outro com múltiplos poços quânticos. Passaremos então a descrever as etapas da fabricação, primeiro para o nanolaser que caracterizamos. Depois descreveremos as etapas da fabricação dos *nanopatch*, para expor os desafios que apresentam. Cabe comentar que as fotos que mostraremos ao longo da descrição do processo de fabricação não são sempre do mesmo dispositivo. Escolhemos adequadamente para melhor apreciação do processo de fabricação.

6.1 Nanolaser de semicondutor metálico-dielétrico

O esquema que ilustra esse dispositivo encontra-se na figura 6.1.

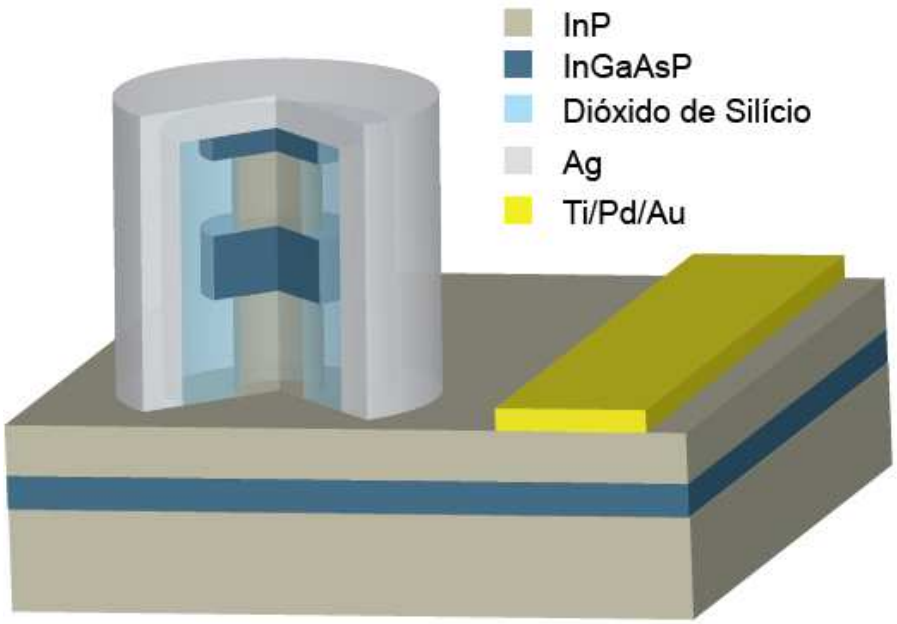


Fig. 6.1: Esquema de um nanolaser de semicondutor metálico-dielétrico com emissão vertical pelo substrato.

A amostra com as camadas epitaxiais foi crescida sobre InP pela companhia Oepic Inc.. No caso da estrutura com um meio de ganho *bulk* há algumas diferenças entre a estrutura epitaxial que utilizamos durante as simulações e as camadas crescidas pela empresa. A camada de 1 μm de p^{+}-$In_{0.733}Ga_{0.227}As_{0.493}P_{0.507}$ foi reduzida para 0.135 μm, a camada de 1 μm de p-InP foi reduzida para 0.85 μm e a camada de 0.2 μm de n-InP foi aumentada para 0.47 μm. Além disso, o meio ativo mudou de 400 nm de espessura para 300 nm. Essas alterações são justificadas apenas pela disponibilidade das amostras. Entretanto, nenhuma dessas alterações afeta a eficiência de injeção de corrente nem as propriedades dos modos eletromagnéticos confinados pela cavidade. Continuamos tendo dois modos confinados na estrutura, competindo pelos portadores em um mesmo meio de ganho. A amostra com múltiplos poços quânticos é idêntica à qual descrevemos durante as simulações. A amostra é incialmente clivada em pequenos pedaços de 12 x 10 mm para então iniciarmos a fabricação que descreveremos em detalhes a seguir. Para melhor acompanhar as etapas de fabricação que serão descritas, a figura 6.2 contém um esquema ilustrando o processo com suas etapas principais.

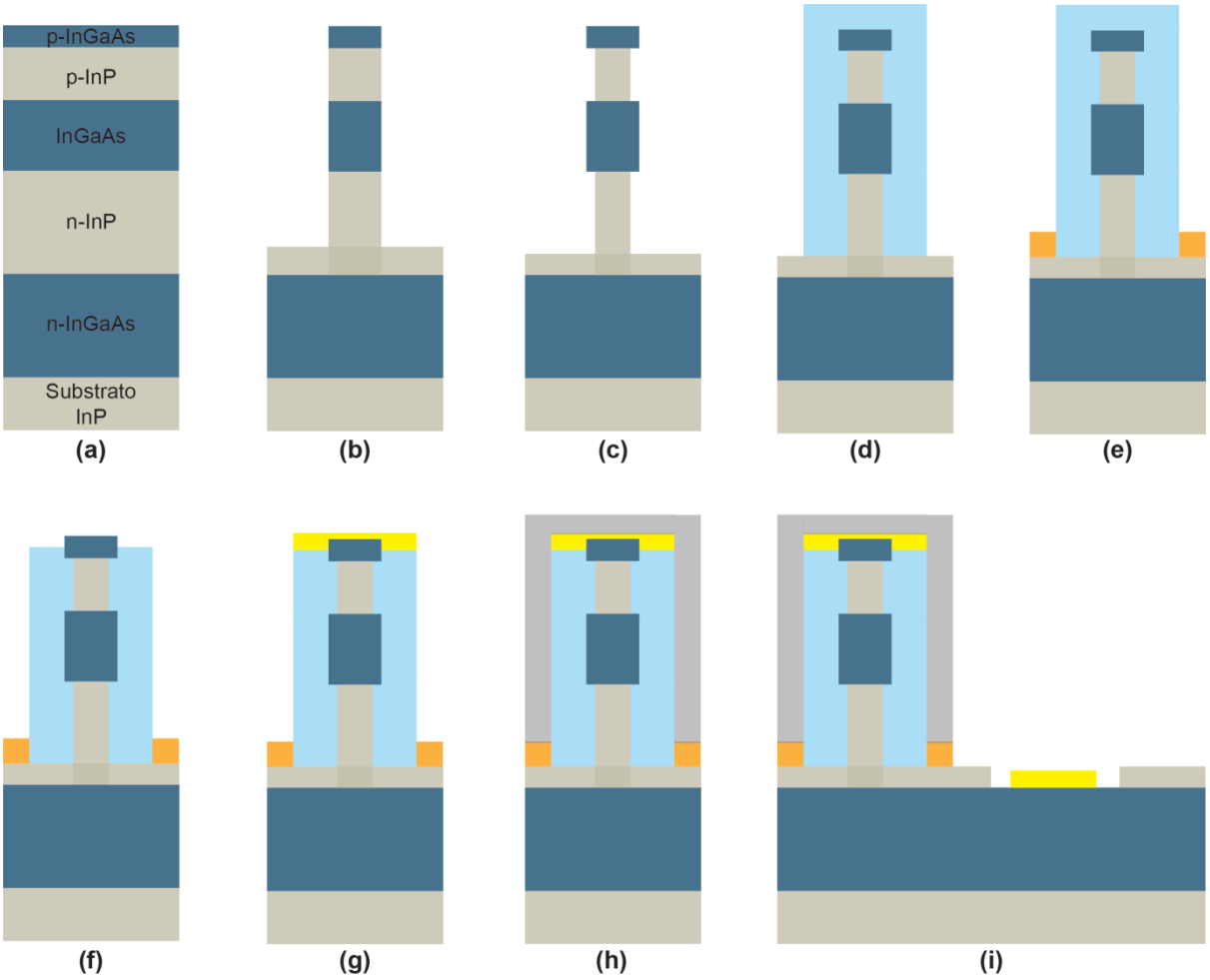


Fig. 6.2: Desenho esquemático com a seção transversal da amostra ilustrando os passos realizados durante o processo de fabricação dos nanolasers. (a) Amostra após a limpeza orgânica. (b) Formação dos pilares dielétricos. (c) Formação dos pedestais. (d) Deposição de isolante ao redor da cavidade. (e) Deposição de Cr / Au para adesão. (f) Remoção do isolante do topo do pilar dielétrico. (g) Deposição de contato ôhmico sobre o topo do pilar dielétrico. (h) Deposição de prata ao redor da cavidade. (i) Formação de contato ôhmico sobre a camada de InGaAsP para contato. No caso da amostra com MQW o meio de InGaAs é substituído por InGaAsP/InGaAsP.

Limpeza Orgânica

A amostra é colocada em um banho de acetona dentro de um ultrassom durante 5 minutos. A acetona é então substituída por metanol e a amostra volta para esse banho com ultrassom por mais 5 minutos. Enxaguamos a amostra com álcool isopropílico (IPA) seguido de água deionizada. Por último a amostra é colocada em uma placa quente a 200 °C durante 10 minutos para desidratação. Essa etapa está ilustrada na figura 6.2 (a).

Formação da cavidade dielétrica

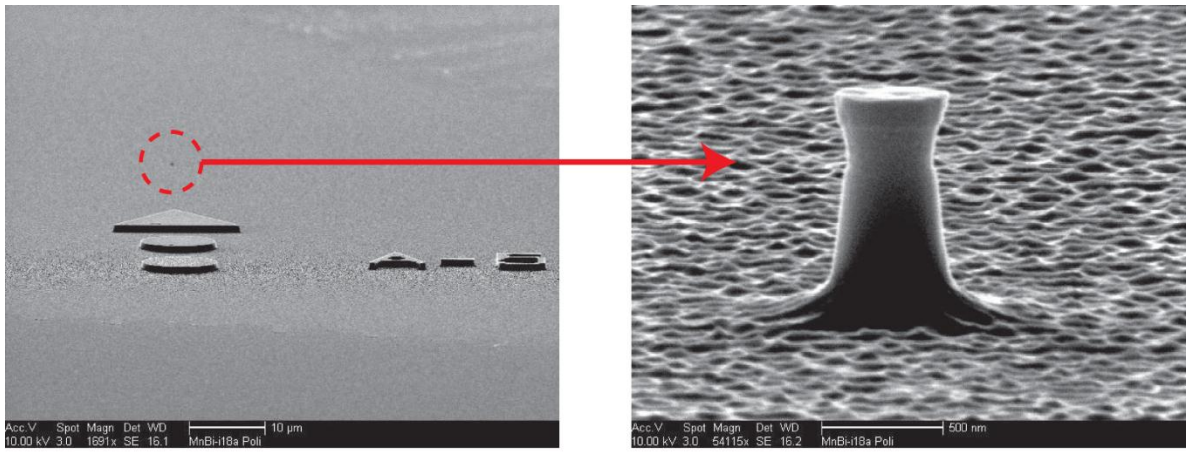
Essa primeira etapa consiste em formar uma nanocavidade suspensa pelos pilares de InP através de litografia por feixe de elétrons e corrosões seca e úmida.

O eletrorresiste utilizado é uma mistura de HSQ (Fox 16) com MIBK (*Methyl isobutyl ketone*). Essa mistura é feita com massas iguais, que no nosso caso foi de 18 g de cada componente. A solução é espalhada sobre a amostra com um *spinner* a 2000 rpm durante 1 minuto, com uma aceleração de 4000 rpm/s. Secamos a solução espalhada sobre a amostra colocando-a sobre uma placa quente a 170 ºC durante 4 minutos, obtendo uma espessura final de aproximadamente 100 nm. A amostra é então colocada dentro da câmera de um sistema de litografia por feixe de elétrons, RAITH 50.

As configurações do feixe utilizado são: 30 KeV e 100 pA. A dose necessária para sensibilizar a solução de eletrorresiste é de 1000 $\mu C/cm^2$. Utilizamos um campo de escrita de 100 x 100 μm. O padrão escrito é de círculos de 100 a 1000 nm de raio.

A revelação é feita colocando a amostra em TMAH (*Tetramethylammonium hydroxide*) durante 30 s. Essa solução é removida enxaguando a amostra em IPA por 60 s. Os padrões circulares que resultam após a revelação, que é o resultado da reação entre o eletrorresiste com o revelador é uma substância vítrea, muito resistente a ataques químicos [68].

Para formar os pilares, conforme ilustrado na figura 6.2 (b), realizamos uma corrosão a seco utilizando um RIE-TRION (*Reactive Ion Etching* - do inglês). Primeiro a câmara é limpa com um plasma de O_2, (50 sccm de O_2, 50 mTorr, 150 W, 20 ºC, durante 20 min.). Na sequência condicionamos a câmara utilizando o gás a ser utilizado na corrosão, metano (10 sccm de CH_4, 40 sccm de H_2, 30 mTorr, 150 W, durante 20 min.). Finalmente realizamos a corrosão com 6 sccm de CH_4, 10 sccm de H_2, 15 sccm de Ar, 30 mTorr, 150 W, durante 20 min.. Após a corrosão, sem retirar a amostra da câmara realizamos um plasma de oxigênio para remover um resídou polimérico que fica redepositado sobre a superfície da amostra (40 sccm de O_2, 30 mTorr, 150 W, durante 2 min.). O eletrorresiste é removido com uma solução de BOE (*Buffer Oxide Etching* – do inglês), diluída em 6:1, durante 50 s. Enxaguamos a amostra com água deionizada e secamos com um jato de N_2. A amostra após a formação do pilar dielétrico pode ser visualizada com um microscópio eletrônico de varredura (SEM, *Scanning Electron Microscope* – do inglês), conforme mostramos na figura 6.3.

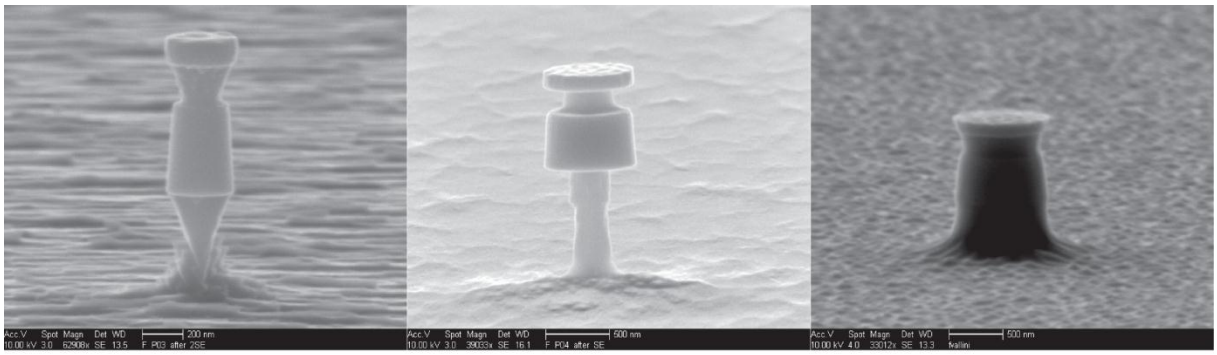


(a) (b)

Fig. 6.3: Imagens obtidas com um SEM da amostra após formação do pilar dielétrico. (a) Seta corroída para identificar a posição do nanolaser sobre a amostra com a respectiva numeração que indica seu raio. (b) Imagem do nanolaser após a corrosão para formação pilar dielétrico.

A imagem da figura 6.3 (a) mostra a forma utilizada para encontrar os nanolasers durante a microscopia: uma seta apontando para o dispositivo que está a 50 µm de distância da ponta da seta. Também numeramos os dispositivos para saber seu diâmetro inicial. Com uma magnificação de 54000 x podemos obter a imagem de um pilar dielétrico como mostra a figura 6.3 (b). No topo observamos a camada de InGaAs para contato, seguida do InP que é ligeiramente corroído lateralmente ao longo desse processo, que deveria ser anisotrópico. Há uma região mais larga que é o meio ativo, seja qualquer uma das duas amostras, e finalmente chega-se ao InP novamente. Neste caso o pilar tem uma altura de 1.1 µm.

A próxima etapa consiste em uma corrosão úmida seletiva do InP para formação dos pedestais, conforme ilustrado na figura 6.2 (c). Essa corrosão é feita com duas soluções diferentes, onde cada uma delas tem uma taxa de ataque maior para um dado plano cristalino do InP. Com essa alternância da corrosão é possível obter pilares redondos, sem facetamento do pilar [69],[70]. Além disso, as soluções são a base de ácido clorídrico para que seja seletivo com respeito ao InGaAs e InGaAsP. A primeira corrosão é feita com uma solução de HCl : H_3PO_4 : H_2O (1 : 4 : 5) que tende a ser lenta nos planos (111)A e mais rápida nos outros planos. A segunda corrosão é feita com uma solução de HCl : CH_3COOH : H_2O (1 : 4 : 10) que ataca mais rapidamente os planos (111)A mas é lenta nos outros planos [69]. Essa é uma das etapas mais difíceis da fabricação, pois o raio do pedestal depende do tempo das corrosões. Isso implica que é difícil conseguir dispositivos de tamanhos muito diferentes em uma mesma rodada de fabricação. Além disso, quando queremos obter pedestais com raios muito pequenos, a dificuldade é ainda maior, já que qualquer variação no tempo do ataque pode levar à excessiva corrosão dos pedestais que, com uma resistência mecânica reduzida, se quebram. As imagens de SEM de três amostras diferentes encontram-se na figura 6.4. Nota-se também a tendência de maior corrosão do pilar inferior, uma vez que este é exposto pela grande área aberta da amostra.



(a) (b) (c)

Fig. 6.4: Imagens de SEM da amostra após a sequência de corrosão úmida e seletiva para formação dos pedestais. (a) Uma amostra onde só uma das duas corrosões foi realizada e o facetamento dos pilares fica evidente. (b) Amostra corroída por um tempo longo com as duas soluções. (c) Amostra corroída por um tempo curto com as duas soluções.

A figura 6.4 (a) mostra uma amostra na qual utilizamos apenas uma das soluções na corrosão. O resultado é um grande *undercut* e a formação de facetas no InP, devido à anisotropia da solução com respeito a um plano cristalino específico. Realizando o ataque com as duas soluções, obtemos um resultado melhor, mostrado na figura 6.4 (b), onde o pedestal não está facetado, apesar de possuir algumas irregularidades. A primeira corrosão durou 22 s e a segunda 14 s. O problema é que, como dissemos antes, em uma corrosão até esse ponto, muitos pedestais se quebravam. Por isso, resolvemos diminuir os tempos de corrosão para 5.5 e 3 s, respectivamente. O resultado encontra-se na figura 6.4 (c), onde o pedestal possui um raio ligeiramente menor que o núcleo com o meio ativo. Dessa forma, garantimos que a amostra terá resistência mecânica para suportar os próximos passos, o que nos permite concluir uma rodada de fabricação com sucesso.

Deposição do isolante ao redor da cavidade

O isolante depositado ao redor da cavidade é um filme de SiO_2 depositado por PECVD (*Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition* – do inglês), conforme ilustrado na figura 6.2 (d) (. Os gases precursores utilizados são 42.5 sccm de SiH_4 e 77.5 sccm de N_2O. A base onde a amostra se encontra é mantida a 350 ºC e a câmara está a uma pressão de 1000 mTorr. A potência utilizada é de 20 W, durante 5 minutos e 30 segundos, resultando em um filme de aproximadamente 200 nm de espessura. A imagem obtida com o SEM após essa etapa encontra-se na figura 6.5.

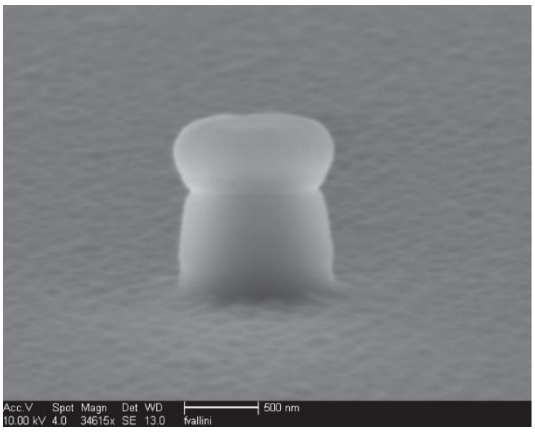


Fig. 6.5: Imagem de SEM do pilar envolto por uma filme de 200 nm de SiO_2.

Antes de depositarmos o filme sobre nossa amostra, sempre fazíamos uma deposição teste sobre um pequeno pedaço de Silício para confirmar a taxa de deposição com um perfilômetro. Com a figura 6.5 confirmamos que a deposição é extremamente conformal.

Deposição da camada metálica ao redor da cavidade

Antes de depositar um filme de prata ao redor da cavidade é necessário fazer os contatos ôhmicos sobre o topo da amostra. Para isso, é necessário removermos o isolante do topo. Porém, antes dessa etapa, depositamos um filme de cromo e ouro sobre o isolante, conforme figura 6.2 (e) para podermos ter a aderência da prata que será depositada ao final desta etapa, já que a aderência da prata sobre dióxido de silício é ruim. O ouro sobre o cromo é necessário para garantir que não ocorra oxidação da superfície de cromo até o momento de deposição da prata.

Espalhamos sobre a amostra o fotorresiste S1813 com o *spinner* a 4000 rpm/s durante 45 s com uma aceleração de 1000 rpm/s. Secamos o fotorresiste colocando a amostra sobre uma placa quente a 115 ºC durante 60 s. Utilizamos então uma fotoalinhadora (Karl Suss MA6) para gravar um padrão que deixa os nanolasers e uma região ao redor deles expostos, ou seja, sem fotorresiste após a revelação. Essa é a região onde queremos manter o cromo e o ouro. A amostra foi exposta à radiação ultravioleta (UV) por 15 s e depois foi colocada em um revelador, MF321, durante 30 s. Após a revelação enxaguamos com água deionizada.

Para remover qualquer resto de fotorresiste sobre as regiões que deveriam estar expostas colocamos a amostra em um plasma barril de oxigênio (100 sccm de O_2, 200 mTorr, 200 W, durante 20 s). Colocamos a amostra dentro da câmara da evaporadora de metais por feixe de elétrons e fazemos vácuo até a pressão base atingir $7.0x10^{-7}$ Torr. Depositamos então uma camada de 200 Å de Cr a uma taxa de 1 Å/s. A pressão na câmara durante a evaporação era de $4.5x10^{-7}$ Torr. Na sequência depositamos um filme de 800 Å de Au a uma taxa de 1.5 Å/s. A pressão da câmara durante a deposição foi de $4x10^{-7}$ Torr. Realizamos então um *lift-off* deixando

a amostra em uma solução de acetona por aproximadamente 50 min.. Enxaguamos a amostra com água deionizada. Nessa etapa o fotorresiste é levado pela acetona junto com o metal sobre ele. Na região sobre os nanolasers e ao redor dele, onde não havia mais fotorresiste, é onde o metal fica depositado.

Na sequência precisamos remover o metal que foi depositado por adesão no topo do pilar, conforme figura 6.2 (f). Ele deve estar apenas na base do pilar envolto pelo isolante. Novamente espalhamos o fotorresiste S1813 sobre a amostra a 4000 rpm durante 45 s com o *spinner* a uma aceleração de 1000 rpm/s. O fotorresiste é secado colocando a amostra sobre uma placa quente a 115 ºC durante 60 s. O fotorresiste fica com uma espessura de aproximadamente 1.3 µm, um pouco maior que a altura do pilar. Para remover o fotorresiste do topo do pilar, apenas reduzimos a altura do fotorresiste como um todo.

A redução do fotorresiste é feita em um RIE Oxford P80. A câmara é limpa com um plasma de oxigênio (50 sccm de O_2, 50 mTorr, 200 W, durante 20 min.) e condicionada para a redução do fotorresiste (40 sccm de O_2, 15 mTorr, 200 W, durante 5 min.). A redução do fotorresiste é então realizada com a mesma receita do condicionamento, porém durante 6 min. 30 s.. Essas duas últimas etapas se iniciam a uma pressão de 45 mTorr que é reduzida para 15 mTorr em um tempo de 6 s, para que o plasma seja formado.

Sem o fotorresiste no topo do pilar removemos o Au e o Cr com duas soluções comerciais. O Au foi removido após 30 s em solução H15 da Fuji e o Cr foi removido após 20 s em solução Etchant 1020. Enxaguamos a amostra com água deionizada e a colocamos em acetona por 3 min. para remoção do fotorresiste residual. A figura 6.6 mostra uma foto obtida com um microscópio ótico após a remoção do Au e do Cr em uma região de teste da amostra.

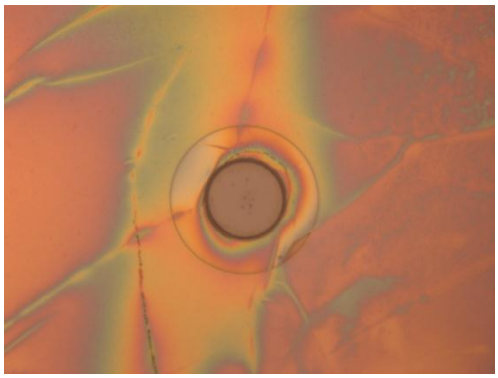


Fig 6.6: Imagem obtida com um microscópio ótico da amostra após a remoção do filme de Au e Cr sobre o pilar com isolante.

A diferença da coloração ao longo do filme de Au/Cr é que a solução corrói parte do fotorresiste e então parte do Au/Cr é corroída junto com o Au/Cr que estava na superfície do pilar com isolante.

Mais uma vez espalhamos o fotorresiste S1813 sobre a amostra a 4000 rpm durante 45 s com o *spinner* a uma aceleração de 1000 rpm/s. O fotorresiste é secado colocando a amostra sobre a placa quente a 115 ºC durante 60 s.

Colocamos a amostra numa câmara de RIE Oxford P80 novamente e reduzimos o fotorresiste com um plasma de oxigênio (40 sccm de O_2, 15 mTorr, 200 W, durante 3 min. 45 s). Na sequência fazemos a corrosão do isolante com um plasma de CHF_3 (25 sccm de CHF_3, 25 sccm de Ar, 35 mTorr, 200 W, durante 7 min.). Removemos o resíduo da corrosão com o mesmo plasma de O_2 anterior e então colocamos a amostra em acetona por 3 min.. A imagem de SEM após a remoção do Cr e do isolante sobre o pilar dielétrico encontra-se na figura 6.7 e está ilustrado na figura 6.2 (f).

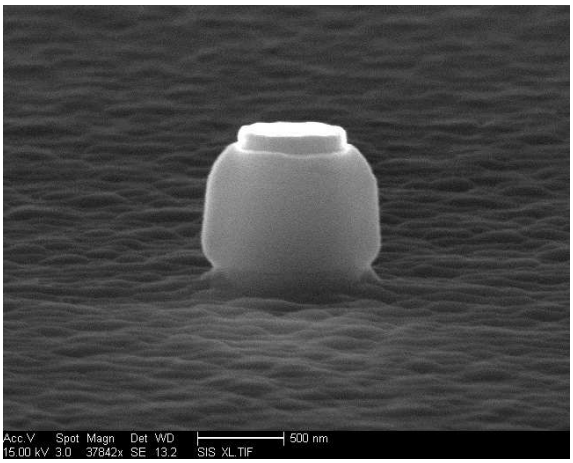


Fig. 6.7: Imagem de SEM da amostra com o Cr/Au e o SiO_2 removidos do topo do pilar dielétrico envolto por SiO_2. O substrato nessa imagem é o Cr.

Agora podemos depositar os metais que formarão o contato ôhmico sobre esse lado da amostra, através de um processo de *lift-off*, conforme ilustrado na figura 6.2 (g). Primeiro limpamos a amostra com um plasma barril (100 sccm de O_2, 0.9 mbar, 150 W, durante 1 min.) e novamente espalhamos o fotorresiste S1813 sobre a amostra a 4000 rpm durante 45 com o *spinner* a 1000 rpm/s e o secamos em uma placa quente a 115 ºC durante 60 s.

O fotorresiste é novamente reduzido com um plasma de O_2, igualmente ao processo anterior de redução. Depois disso colocamos a amostra na evaporadora de feixe de elétrons e esperamos o vácuo atingir uma pressão base de 8.2×10^{-7} Torr. Depositamos filmes de Ti / Pd / Au (200 Å / 200 Å/ 800 Å), a uma taxa de 0.5, 0.5 e 1.5 Å/s, respectivamente. A pressão na câmara em cada deposição foi de 2.0×10^{-7}, 1.7×10^{-7} e 6.1×10^{-7} Torr, respectivamente. Após a deposição colocamos a amostra em acetona durante uma noite. Essa etapa deve ser longa e devemos tomar muito cuidado, pois forçar o *lift-off* com cotonetes ou jatos de acetona pode quebrar os pilares. A imagem da amostra após o *lift-off* encontra-se na figura 6.8.

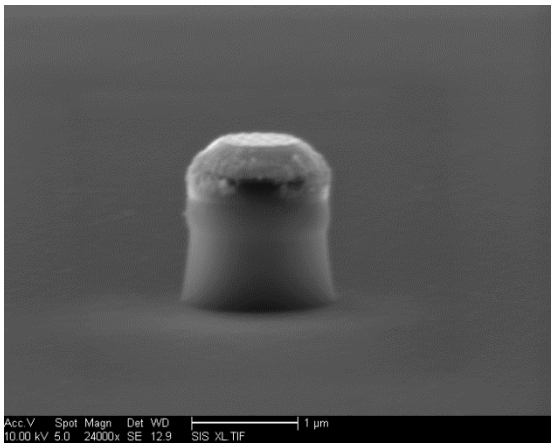


Fig. 6.8: Imagem de SEM da amostra após o *lift-off* de Ti /Pd/Au que deixa os metais sobre o topo do pilar com isolante apenas ao seu redor.

Nesse momento temos apenas uma sequência de três metais depositados no topo do pilar sem o isolante. Para formar o contato ôhmico é preciso formar uma liga entre os três metais. Isso é feito através de um tratamento térmico rápido (RTA – *Rapid Thermal Annealing*, do inglês). Esse tratamento é feito em pequeno forno em um ambiente inerte devido a um fluxo constante de 2 L/min. de N_2. A rampa de temperatura é de 50 ºC/s até atingir 400 ºC, temperatura na qual a amostra permanece por apenas 35 s. Mantendo o fluxo de N_2 a amostra é resfriada até a temperatura ambiente. Tanto as espessuras dos metais bem como a temperatura e o tempo do tratamento térmico foram otimizados pelo método de TLM, mostrado em detalhes no apêndice C.

Finalmente podemos passar para a etapa de encapsulamento da cavidade com prata conforme ilustrado na figura 6.2 (h). Começamos fazendo uma litografia óptica com duas camadas. Primeiro espalhamos o polímero PMGI (*Polymethylglutarimide* – do inglês) em duas etapas: 500 rpm durante 5 s e então a 4000 rpm durante 30 s, onde a aceleração do *spinner* é de 1000 rpm/s. Esse polímero é secado com a amostra sobre uma placa quente a 160 ºC durante 5 min.. Na sequência, espalhamos o S1813 a 4000 rpm durante 45 s iniciando com uma aceleração de 1000 rpm/s. O fotorresiste é seco com a amostra sobre um placa quente a 115 ºC durante 60 s. O PMGI vem primeiro pois possui um perfil adequado para *lift-off*. O objetivo de usar duas camadas de fotorresiste é obtermos uma espessura de resiste que dá uma razão de aspecto que permita o *lift-off* da camada de prata que queremos depositar.

Expomos a amostra ao UV durante 15 s utilizando a mesma máscara de antes. A ideia é criar um espaço para deposição da prata sobre a mesma região onde ficou depositado o Cr/Au na etapa anterior. Após a exposição revelamos o S1813 com MF321 durante 30 s e enxaguamos a amostra com água deionizada. Revelamos então o PMGI com MIF300 durante 60 s e enxaguamos a amostra novamente.

Inserimos a amostra na câmara de um sistema de *sputtering* AJA contendo um planetário para que o metal recubra toda a lateral da cavidade. Abrimos um fluxo de 5 sccm de Ar a 30 mTorr e realizamos um plasma a 30 W durante 10 s para remover resíduos de fotorresiste nas regiões que deveriam estar expostas. Mantendo esse fluxo de Ar na câmara, mas reduzindo a pressão para 3 mTorr, depositamos 300 nm de Ag (17 min.), 15 nm de Ti (10 min.) e 300 nm de Au (5min.). O motivo de colocar o Au é não deixar que a Ag oxide, mas antes é necessária uma fina camada de Ti para aderência da prata no ouro depositado anteriormente. O *lift-off* foi feito colocando a amostra em um removedor PG a 80 ºC durante 2 h 20 min., seguido de acetona para limpar o removedor da amostra.

Por último realizamos um tratamento térmico rápido de 250 ºC durante 4 min., para reduzir defeitos na interface entre a prata e o dióxido de silício [71]. Porém, antes disso, tiramos uma imagem com o SEM para mostrar a cavidade metálica, conforme mostra a figura 6.9.

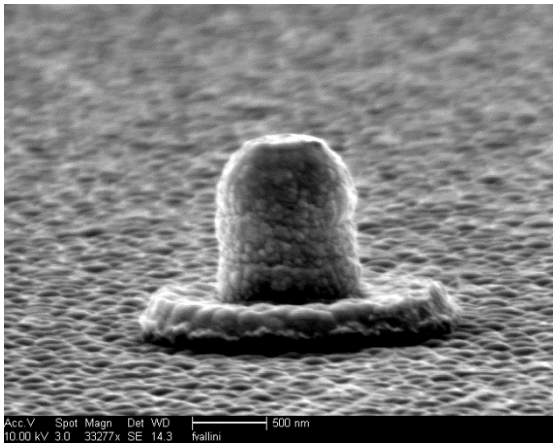


Fig. 6.9: Imagem de SEM da cavidade metálica de Ag /Ti /Au ao redor da cavidade.

Contato inferior

Nesta etapa já temos o contato ôhmico sobre o lado *n* da amostra, lado superior, que também já está coberto pelo isolante e pela camada metálica de prata, que é o cilindro externo no esquema da figura 6.1. Ainda é necessário fazermos um contato ôhmico sobre a parte *p* da amostra. Esse contato é feito sobre a camada de InGaAsP entre o substrato e a primeira camada de InP crescida, conforme ilustrado na figura 6.2 (i).

Para atingir essa camada todo o SiO_2 exposto (que não está protegido pela prata) foi corroído com BOE durante 1 min. e enxaguamos a amostra com água deionizada. Na sequência removemos a camada crescida de InP com uma corrosão úmida de HCl : H_3PO_4 (1 : 1) durante 3 min. e novamente enxaguamos com água deionizada.O contato é feito novamente via *lift-off*. Neste caso o contato é sobre a primeira camada de InGaAsP crescida.

Espalhamos o fotorresiste S1813 a 4000 rpm durante 45 s com o *spinner* a uma aceleração de 1000 rpm/s e secamos o fotorresiste em placa quente a 115 ºC durante 60 s. A

exposição ao UV é feita durante 15 s e a revelação com MF321 durante 30 s e a amostra é enxaguada com água deionizada. A máscara utilizada é para expor o resiste em áreas retangulares mais afastadas do nanolaser, onde serão dispostos os contatos, conforme esquema da figura 6.1. Para remover resíduos de fotorresiste sobre as áreas que deveria estar expostas, a amostra é levada a um plasma barril de oxigênio (100 sccm de O_2, 200 mTorr, 200 W, durante 20 s).

Levamos a amostra para a evaporadora por feixe de elétrons e esperamos a pressão base atingir $8.2x10^{-7}$ Torr. Evaporamos então a mesma sequência de metais utilizados para o outro contato: Ti / Pd / Au (200 Å / 200 Å / 1500 Å) a uma taxa de 0.5, 0.5 e 1.5 Å/s, respectivamente. As respectivas pressões da câmara durante a evaporação foram de $1.9x10^{-7}$, $1.98x10^{-7}$ e $5.3x10^{-7}$ Torr.

O *lift-off* é feito em acetona, na qual a amostra permaneceu por 20 min.. Fazemos então um tratamento rápido no forno com fluxo contínuo de N_2 a 2 L/min. onde aquecemos a amostra com uma rampa de 50 ºC/s até atingir a temperatura de 400 ºC, na qual permanece por 30 s. Assim, temos o dispositivo praticamente pronto. Porém, como as medidas são feitas inicialmente a baixas temperaturas, para não danificar o nanolaser por efeitos de auto-aquecimento, é necessário encapsularmos o chip para inseri-lo dentro de um criostato. Para isso precisamos soldar fios de ouro para fazer o contato no dispositivo.

Wire bonding

Para poder realizar a solda de fios de ouro sobre os contatos do dispositivo é necessário espessar os contatos, para que eles não sejam removidos ao soldarmos o fio.

Espalhamos o polímero PMGI em duas etapas: 500 rpm durante 5 s e então a 4000 rpm durante 30 s, onde a aceleração do *spinner* é de 1000 rpm/s. Esse polímero é seco em uma placa quente a 160 ºC durante 5 min.. Na sequência espalhamos o S1813 a 4000 rpm durante 45 s iniciando com uma aceleração de 1000 rpm/s. O fotorresiste é seco em um placa quente a 115 ºC durante 60 s.

Expomos a amostra ao UV durante 15 s utilizando mais uma vez a mesma máscara de antes. Após a exposição revelamos o S1813 com MF321 durante 30 s e enxaguamos a amostra com água deionizada. Revelamos então o PMGI com MIF300 durante 60 s e enxaguamos a amostra novamente.

Removemos resíduos de fotorresiste sobre as áreas que deveriam estar expostas, com o plasma barril de oxigênio (100 sccm de O_2, 200 mTorr, 200 W, durante 20 s). Colocamos a amostra em um *sputtering* de Au, Denton Discovery 18, com o qual depositamos uma camada de 1 μm de Au. O *lift-off* foi realizado com o removedor PG a 80 ºC durante 2 h e depois colocado

em acetona por mais 10 min. Finalmente a amostra foi enxaguada com água deionizada e seca com um jato de N_2.

O resultado final pode ser visto através de microscopia óptica na figura 6.10 (a), onde os contatos da esquerda são comuns e referentes ao contato inferior.

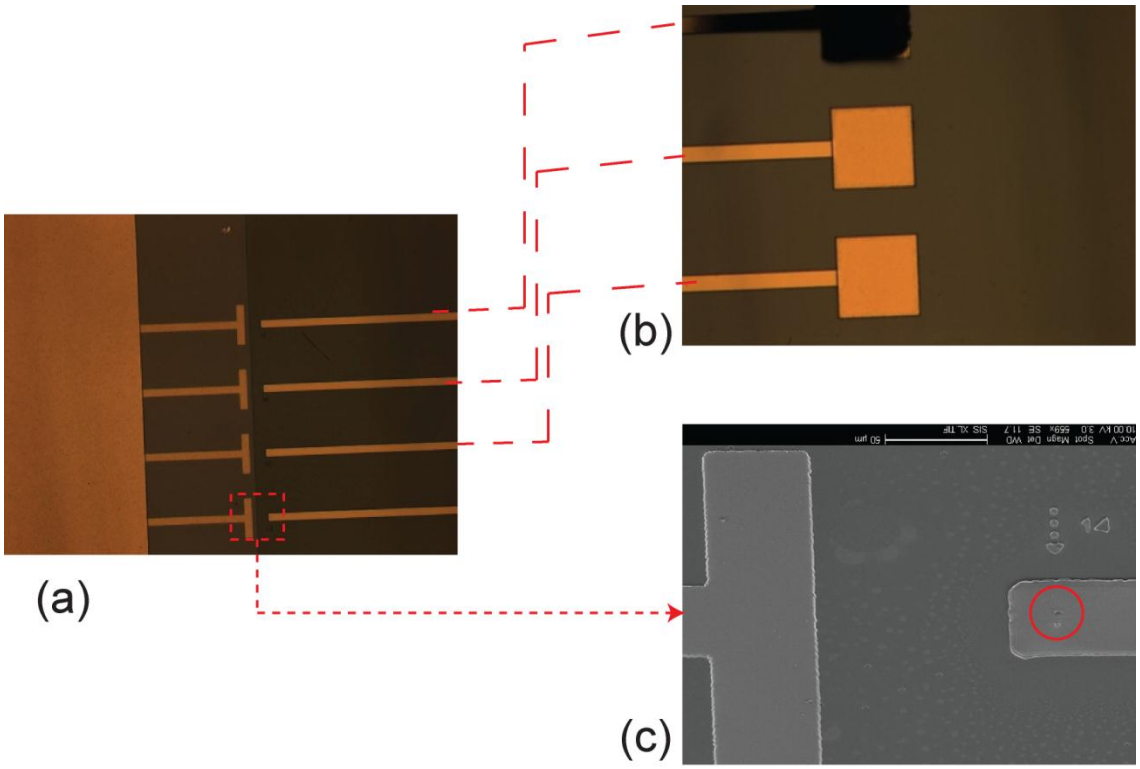


Fig. 6.10: (a) Imagem de microscopia óptica dos contatos inferiores e comuns a todos os dispositivos (esquerda) e dos contatos superiores independentes para cada dispositivo (direita). (b) Imagem de microscopia óptica da continuação das linhas do contato de (a). (c) Imagem de SEM dos dois contatos mostrados. Em destaque, no círculo vermelho, há um nanolaser.

Se seguirmos as linhas da direita da figura 6.10 (a), chegamos aos contatos do lado superior do dispositivo, que estão conectados independentemente a cada nanolaser, como mostra a imagem obtida com SEM dos dois contatos, figura 6.10 (c). O círculo em vermelho da figura 6.10 (c) indica onde está o nanolaser, a 50 μm da ponta da seta de identificação.

A última etapa na fabricação é colar a amostra em um suporte comercial de chips (TO 8). Esse chip possui um furo em seu meio, de maneira que podemos captar a luz emitida pelo substrato, que é colado apenas em suas bordas sobre o chip, com cola prata. Na parte superior ficam à mostra os dois contatos que fizemos, um para o lado *n* e outro para o lado *p*. Com uma *wire bonding* soldamos fios de ouro que ligam esses contatos aos pinos dispostos no suporte TO-8, e finalizamos a fabricação e encapsulamento do nosso dispositivo. O contato superior da figura 6.10 (b) mostra uma região onde o metal foi removido durante o processo de solda do fio de ouro, fato que ocorre frequentemente se o metal do contato não for espesso.

A figura 6.11 mostra a imagem obtida com um SEM dos dois nanolasers fabricados que serão caracterizados, um com meio de ganho de múltiplos poços quânticos, na fig. 6.11 (a), e outro com um meio de ganho *bulk*, na fig. 6.11 (b).

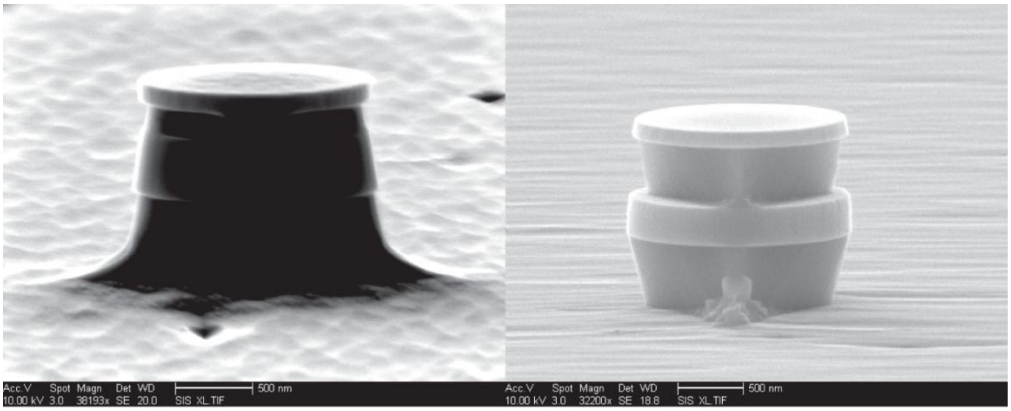


Fig. 6.11: Imagens obtidas com um SEM das cavidades após a corrosão úmida que formas os pedestais. A amostra (a) é a com poços quânticos e a amostra (b) com meio *bulk*. Obs.: Essa foto foi tirada pela aluna de doutorado Qing Gu.

Os dispositivos mostrados na figura 6.11 apresentam aproximadamente 1.4 μm de altura. O dispositivo com múltiplos poços quânticos, mostrado na figura 6.11 (a), apresenta um núcleo com 750 nm de raio, pedestal superior com 690 nm de raio e pedestal inferior com 790 nm. O dispositivo com meio de ganho *bulk*, mostrado na figura 6.11 (b), apresenta um núcleo com 850 nm de raio, pedestal superior com 740 nm de raio e pedestal inferior com 760 nm de raio. Todas as medidas foram realizadas na metade das espessuras de cada região que forma o dispositivo. Apesar desses nanolasers serem maiores do que os propostos teoricamente, ainda são considerados pequenos e são os que não ficaram danificados ao longo do processo de fabricação.

Assim, finalizamos a fabricação dos nanolasers. Nessa rodada foram fabricadas duas amostras, que, conforme explicado anteriormente, uma era com um meio de ganho de múltiplos poços quânticos e a outra com um meio de ganho *bulk*. Antes de passarmos para o capítulo de caracterização dos dispositivos, gostaríamos de comentar os passos extras para fabricar o nanopatch proposto e justificar o porquê de não completarmos tal fabricação.

6.2 *Nanopatch* de semicondutor

A fabricação de um *nanopatch* é praticamente idêntica ao dispositivo fabricado anteriormente, até a etapa de deposição da camada de prata ao redor da cavidade. Devemos lembrar que neste caso, a luz não será captada pelo substrato, mas pela lacuna de SiO_2 entre a prata e o ouro, conforme esquema da figura 6.12.

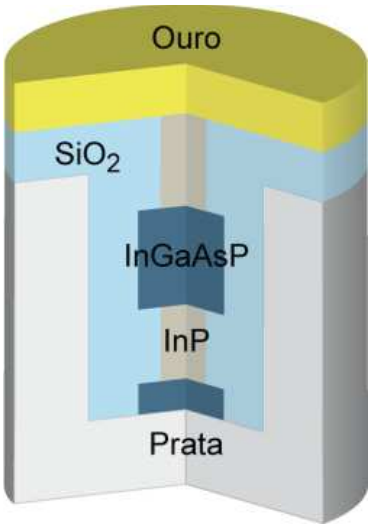


Fig. 6.12: Esquema do *nanopatch* de semicondutor que tentamos fabricar conforme as otimizações realizadas nos capítulos anteriores.

A única diferença é que não depositamos o metal em contatos largos para fazer o *wire bonding* posteriormente. Depositamos tanto os metais para adesão bem como a prata apenas ao redor da cavidade, totalizando os 300 nm de prata, segundo o projeto original, conforme esquema da figura 6.12. Não há metal em largas regiões ao redor da cavidade conforme mostra a figura 6.10 (a), mas apenas onde formamos a cavidade. Na sequência, o que precisamos fazer é: planarização do topo da amostra para a colagem sobre um substrato e realizar um ataque químico do substrato; feito isso chegamos ao pilar superior da figura 6.12, sobre o qual é necessário depositarmos metal para fazer o contato ôhmico. Um esquema do processo de fabricação é ilustrado na figura 6.13 e se inicia logo após a deposição da prata ao redor da cavidade, conforme ilustrado em 6.2 (h).

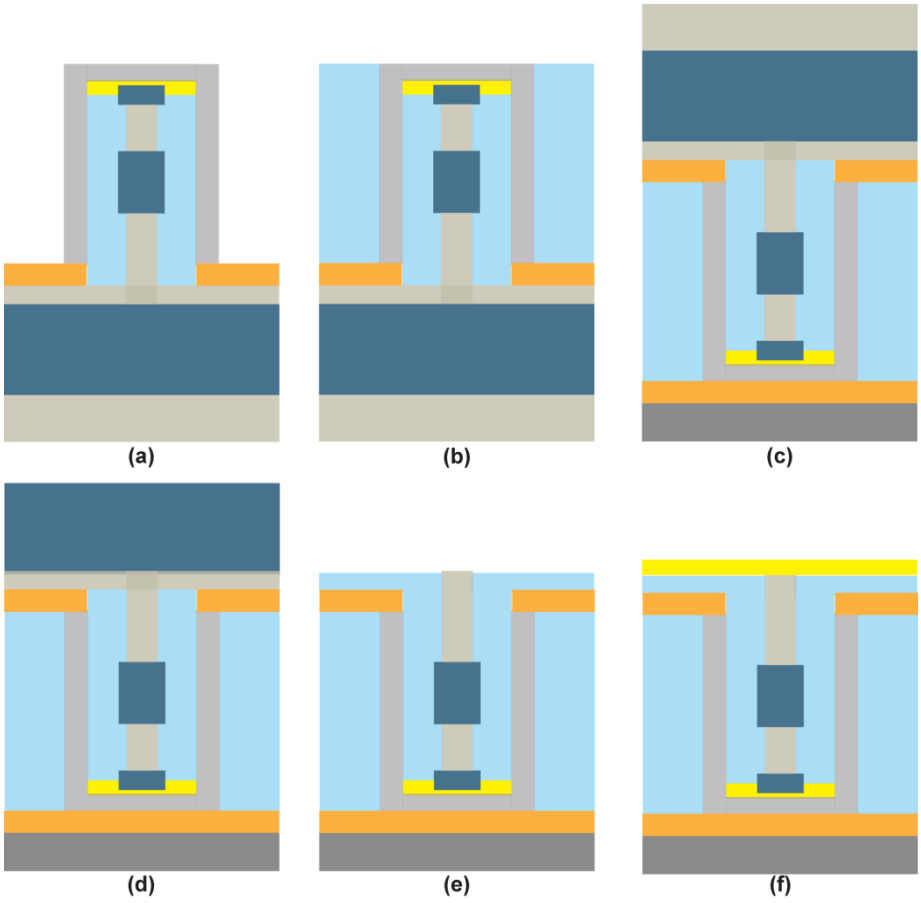


Fig. 6.13: Desenho esquemático com a seção transversal da amostra ilustrando os passos realizados durante o processo de fabricação dos nanopatch. (a) Deposição da prata ao redor da cavidade; até aqui o processo é idêntico aos dos nanolasers descrito anteriormente. (b) Deposição de isolante sobre toda a amostra para planarização da mesma. (c) Colagem da amostra sobre um substrato de silício (cinza escuro na parte inferior da amostra) com Cr / Au para contato. (d) Corrosão do substrato. (e) Corrosão do InP e da camada de InGaAsP com RIE seguida de deposição de isolante sobre o topo do dispositivo. (f) Deposição do contato ôhmico.

Planarização

Para que toda a superfície fique com a mesma espessura, precisa-se realizar um processo de planarização com SiO_2. Depositamos aproximadamente 1.2 μm de SiO_2 com um PECVD (42.5 sccm de SiH_4, 77.5 sccm de N_2O, 1000 mTorr, 20 W, 350 ºC, durante 35 min.), conforme ilustrado na figura 6.13 (b).

Espalhamos o fotorresiste S1813 a 4000 rpm durante 45 s com o *spinner* a uma aceleração de 1000 rpm/s. O fotorresiste é seco em placa quente a 115 ºC durante 60 s.

Colocamos a amostra no RIE Oxford P80 para redução do fotorresiste. Primeiro a câmara é limpa com oxigênio (50 sccm de O_2, 50 mTorr, 200 W, durante 20 min.) e condicionada com a receita do processo (40 sccm de O_2, 15 mTorr, 200 W, durante 5 min.). Realizamos então um processo de 6 min. 30 s com a mesma receita de condicionamento da câmara. Com isso reduzimos o fotorresiste espalhado sobre o SiO_2 que foi depositado conformalmente ao redor do pilar metálico-dielétrico. Sem abrir a câmara já realizamos a corrosão do SiO_2 sobre o topo do pilar metálico dielétrico (25 sccm de CHF_3, 25 sccm de Ar, 35 mTorr, 200 W, durante 47 min.) e removemos qualquer resíduo polimérico proveniente dessa corrosão com um plasma de oxigênio (50 sccm de O_2, 50 mTorr, 200 W, durante 13 min.). Colocamos a amostra em acetona por 2 min., secamos com um jato de N_2 e podemos observar o resultado com um microscópio óptico, conforme figura 6.14.

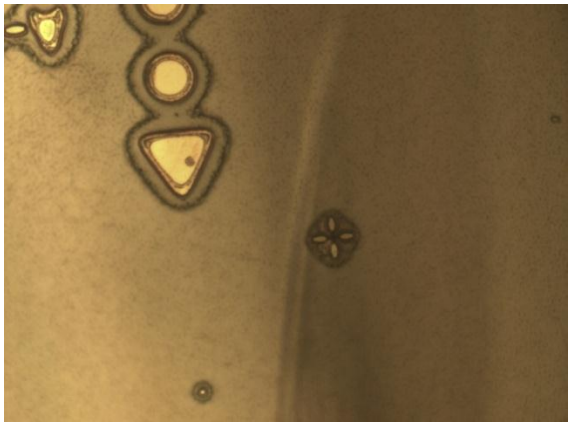


Fig. 6.14: Foto obtida com um microscópio óptico da amostra com um nanolaser indicado pela seta, após o processo de planarização.

Conforme observamos na figura 6.14, há um nanolaser, que é o pequeno ponto circular indicado pela seta. Toda a camada marrom na foto é o dióxido de silício recobrindo toda a amostra com exceção das regiões douradas, que contém o ouro que recobre a prata para evitar sua oxidação. Há um pequeno desnível entre a região de metal e a região recoberta por dióxido de silício, como podemos notar pela interface escura formada entre as duas regiões.

Corrosão do substrato

Colocamos a amostra em um *sputtering* AJA DC e fazemos uma limpeza da superfície com um plasma de Ar (5 sccm de Ar, 3 mTorr, 30 W, durante 10 s), conforme mostra a figura 6.13 (c). Na sequência depositamos uma camada de 10 nm de Ti (5 sccm de Ar, 3 mTorr, 100 W, durante 4 min.) para adesão seguido de 300 nm de Au (5 sccm de Ar, 3 mTorr, 200 W, durante 5 min.). A princípio agora todos os nanolasers estão ligados ao mesmo contato, formado agora pela superfície metálica depositada sobre toda a amostra. Junto com essa amostra colocamos um pedaço de silício com dimensões entre 2 e 3 vezes o tamanho da amostra.

Colamos a amostra com cola epóxi de prata sobre o pedaço de silício no qual também depositamos Ti/Au, de tal forma que o substrato da amostra ficou exposto, conforme podemos visualizar na figura 6.15. A cura da cola é feita em uma placa quente a 65 ºC durante 15 min..

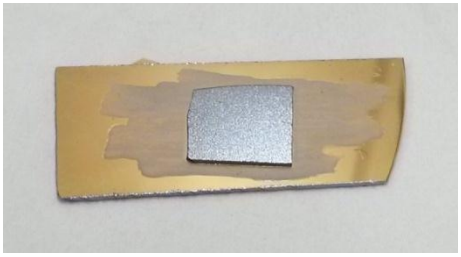


Fig. 6.15: Foto da amostra colada sobre o substrato de Silício com Ti/Au. O substrato da amostra fica exposto.

Todo o substrato de InP é removido com uma corrosão de HCl de duração de 45 min, conforme ilustrado na figura 6.13 (d). seguida de um banho em álcool isopropílico. As fotos da amostra após essa etapa encontram-se na figura 6.16, onde o que estamos vendo é a primeira camada de InGaAsP crescida.

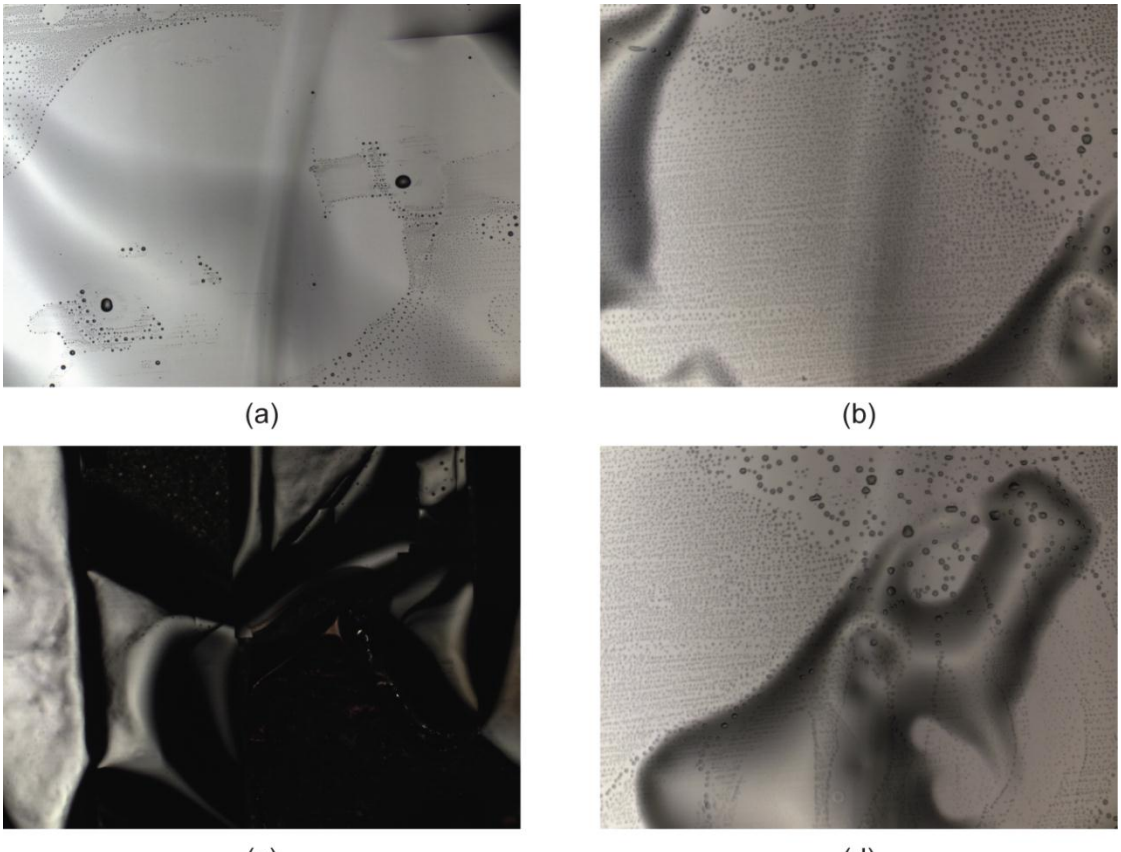


Fig. 6.16: Foto da amostra com o substrato de InP inteiramente removido para diversos casos. (a) Remoção bem sucedida, (b) remoção com bolhas residuais, (c) remoção com descolagem da amostra e (d) remoção com ondulação do filme.

Infelizmente a combinação dessa corrosão com o material usado na planarização e com a forma na qual a amostra foi colada parece não ser das melhores. A quantidade de amostras que resistiam a esse processo de maneira aceitável para continuarmos a fabricação era muito pequena. Um exemplo bem sucedido encontra-se na figura 6.16 (a), onde boa parte da amostra está lisa e sem bolhas residuais. Geralmente, durante esse processo, bolhas residuais da corrosão ficavam dispostas sobre a amostra com o substrato já corroído, conforme mostra a figura 6.16 (b). Isso porque não podíamos secar a amostra adequadamente, já que a camada de material epitaxial restante é da ordem de 1 μm. Outro problema encontrado foi o stress caudado pelo material usado na planarização quando colado com a cola de prata, que resultou na descolagem da amostra ao final da corrosão, conforme figura 6.16 (c). Nestes casos, quando a camada não descolava, ela estufava, conforme fig. 6.16 (d).

Esse foi o motivo pelo qual não conseguimos terminar a fabricação do *nanopatch*. A partir desse ponto era muito difícil continuar o processamento da amostra. Mesmo assim, mostraremos os próximos dois últimos passos, para deixar clara a dificuldade dessa fabricação.

Acessando o contato inferior do nanolaser pelo lado do substrato

Após a remoção de todo o substrato de InP, chegamos à primeira camada de InGaAsP crescida. Removendo essa camada, chegaremos ao pilar de InP formado durante o processo de fabricação, que agora está virado de cabeça para baixo, conforme ilustrado na figura 6.13 (e). Notar que nessa figura a camada de isolante aparece mais espessa no topo, detalhe que será explicado adiante. A corrosão do InGaAsP e de qualquer camada subsequente de InP que existe antes do início do pilar é feita com o RIE-TRION.

Limpamos a câmara com um plasma de oxigênio (50 sccm de O_2, 50 mTorr, 150 W durante 15 min.) e condicionamos a câmara (10 sccm de CH_4, 40 sccm de H2, 30 mTorr, 150 W, durante 20 min.). Realizamos então a corrosão a base de metano (6 sccm de CH_4, 40 sccm de H_2, 15 sccm de Ar, 30 mTorr, 150 W, durante 20 min.) e limpamos os polímeros residuais da corrosão (40 sccm de O_2, 30 mTorr, 150 W, durante 3 min.). As imagens de microscopia óptica após essa etapa encontram-se na figura 6.17.

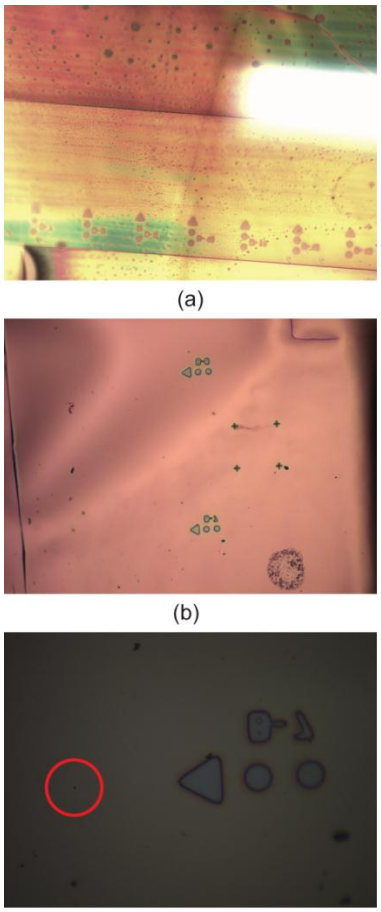


Fig 6.17: Imagens obtidas com um microscópio óptico da amostra após remoção da camada de InGaAsP com aumento de (a) 20 x, (b) 50 x e (c) 100 X. O círculo em vermelho mostra onde encontra-se o nanolaser fabricado do outro lado da amostra. O material ao redor das estruturas fabricadas é o dióxido de silício utilizado na planarização.

A figura 6.17 (a) mostra algo inusitado que ocorreu durante a corrosão do InGaAsP via RIE: corrosão não uniforme observada pela diferente coloração e levantamento de placas durante a corrosão. A figura 6.17 (b) mostra uma amostra cujo resultado foi bom, com poucas placas levantando e com corrosão uniforme do InGaAsP. Podemos ver as setas e marcas de alinhamento fabricadas do outro lado da amostra, antes de a colarmos sobre o novo substrato. Com um aumento maior, de 100 x, podemos identificar os nanolasers do outro lado da amostra, distantes de 50 μm da ponta das setas de referência.

Últimas etapas

Na sequência, depositaríamos isolante para isolamento dos contatos e para abrir a lacuna de emissão de radiação da cavidade, conforme figura 6.13 (e). Por último, conforme figura 6.13 (f), depositamos a mesma liga de metal de antes, Ti/Pd/Au sobre os nanolasers, para criar o contato

ôhmico via um processo de *lift-off* seguido por um tratamento térmico rápido. Porém, devido às irregularidades na superfície da amostra, não conseguimos realizar o *lift-off* para deixar o metal apenas sobre os nanolasers. Caso essa etapa tivesse dado certo, o metal serviria de máscara para corrosão de todo o dióxido de silício sobre a amostra, deixando o dispositivo como o ilustrado no esquema da figura 6.10. Porém, o problema causado pela planarização em conjunto com a corrosão do substrato impossibilitou o final dessa fabricação.

6.3 Conclusão

Neste capítulo descrevemos com detalhes todas as etapas de fabricação de um nanolaser de semicondutor metálico-dielétrico com emissão de luz pelo substrato. Fabricamos dois dispositivos, um com meio de ganho de múltiplos poços quânticos e outro com um meio de ganho *bulk*. A caracterização desses dois dispositivos para demonstrar um nanolaser em operação e para analisar o efeito do meio de ganho no desempenho de um nanolaser será realizada no próximo capítulo. Também mostramos os detalhes da fabricação do laser nanopatch proposto. Infelizmente alguns problemas já identificados, porém ainda sem solução, impossibilitaram a finalização de tal fabricação. Ainda estamos insistindo em tais dispositivos dada sua relevância devido à sua alta capacidade de integração.

7. Caracterização dos nanolasers de semicondutor metálico-dielétrico com bombeio eletrônico

Neste capítulo apresentaremos a caracterização dos dispositivos descritos no capítulo anterior. Realizaremos a caracterização eletro-óptica dos dois nanolasers, com meio de ganho de múltiplos poços quânticos e *bulk*.

Descreveremos a montagem utilizada para obter os espectros de emissão em função da corrente injetada nos nanolasers. Com os espectros, foi possível obter as curvas da potência de luz emitida em função da corrente injetada, e, consequentemente, a corrente de limiar dos nanolasers. Também mostraremos uma análise quantitativa da redução da largura de linha e desvio de comprimento de onda com o aumento do bombeio eletrônico.

Todas essas medidas foram realizadas no laboratório de caracterização de dispositivos fotônicos do *Ultrafast and Nanoscale Optics Group* da UCSD, em conjunto com a também aluna de doutorado, Qing Gu. Com esses resultados poderemos comparar o desempenho dos dois nanolasers além de validar o modelo teórico que utilizamos no capítulo 5. Assim, concluiremos qual meio de ganho é mais interessante para obter uma nanolaser de semicondutor metálico dielétrico com bombeio eletrônico.

7.1 Bancada de medidas

A amostra, conforme descrito no capítulo anterior, está disposta em um suporte comercial para encapsulamento TO-8. Esse suporte é inserido dentro de um criostato com terminações elétricas, mostrado na figura 7.1 (a). Faz-se vácuo dentro do criostato, que é então refrigerado com nitrogênio líquido até a temperatura de 77 K. Este criostato possui uma janela óptica para captura da luz emitida pelo nanolaser, mostrado na figura 7.1 (b).

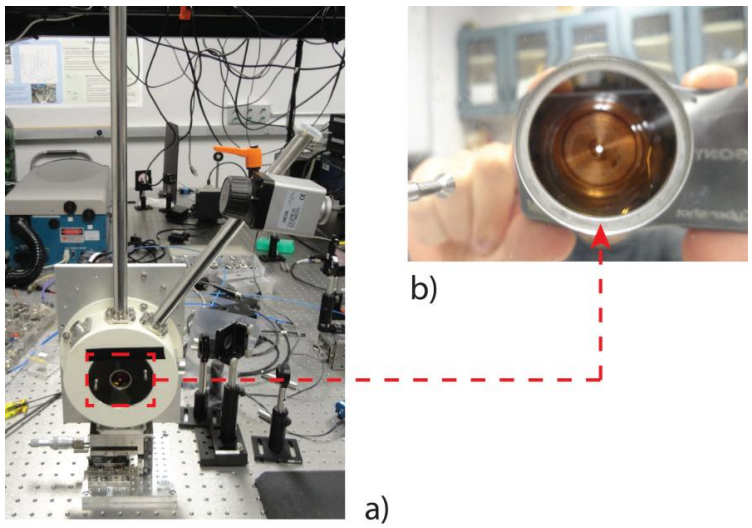


Fig. 7.1: Fotos (a) do criostato utilizado para refrigerar o nanolaser a 77 K e (b) da janela óptica do criostato para captura da luz emitida pelo nanolaser.

O criostato é então disposto em uma bancada de medidas conforme ilustração da figura 7.2.

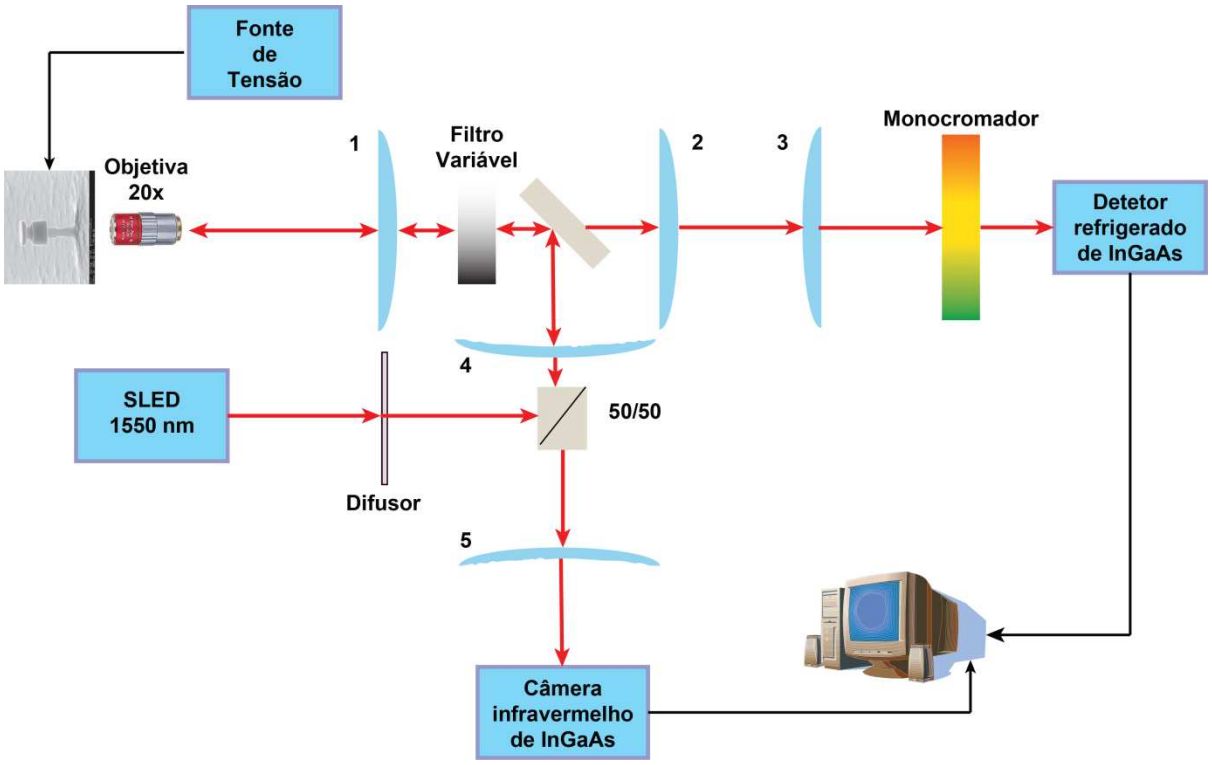


Fig. 7.2: Esquema da bancada de medidas utilizada na caracterização dos nanolaser. O caminho ótico formado pelas lentes 1, 4 e 5 é utilizado para localizar os nanolasers com uma câmera infravermelha com o auxílio de um LED superluminescente em 1550 nm. O caminho óptico formado pelas lentes 1, 2 e 3 é utilizado para obter o espectro dos nanolasers para diversas tensões aplicadas, com o auxílio de um monocromador conectado a um detector refrigerado de InGaAs.

O sistema de medidas ilustrado na figura 7.2 mostra que o bombeio eletrônico é realizado com uma fonte de tensão. Essa fonte está conectada aos terminais externos do criostato, no qual, dentro dele, as conexões chegam até os nanolasers que estão dispostos no suporte TO-8. A luz emitida pelo nanolaser é coletada com uma objetiva de microscópio com aumento de 20 x, própria para uso em comprimentos de onda no infravermelho. Após ser captada pela objetiva, a luz passa por diversos conjuntos de lentes formando um sistema óptico de espaço livre. A tabela 7.1 indica as lentes utilizadas e suas propriedades, seguindo a numeração da figura 7.2.

Tab. 7.1: Lentes utilizadas na bancada de medidas

	Lente	Distância focal (cm)	Camada anti-refletora
1	Plano-convexa	250	1005-1620 nm
2	Plano-convexa	100	1005-1620 nm
3	Plano-convexa	100	1005-1620 nm
4	Côncavo-convexa	75	1005-1620 nm
5	Côncavo-convexa	100	1005-1620 nm

A luz capturada pela objetiva é focalizada com a lente número 1 e passa por um filtro de intensidade neutra variável. Na sequência, há um espelho removível. Com o espelho, jogamos a luz proveniente de um LED superluminoso em 1550 nm sobre a amostra e então conseguimos formar uma imagem do nanolaser em um plano focal na entrada de uma câmera para infravermelho, com assistência das lentes 4 e 5. Assim, realizamos um alinhamento grosseiro para captura da luz emitida pelo nanolaser. Removemos o espelho e a luz é levada ao conjunto de lentes 2 e 3, utilizadas para colimar e focalizar o feixe no monocromador. Na saída do monocromador utilizamos um detector refrigerado de InGaAs para medir a potência óptica em cada comprimento de onda.

7.2 Caracterização optoeletrônica

Ao mesmo tempo em que obtínhamos as curvas IxV, aplicamos tal tensão sobre o dispositivo e medimos a potência da luz emitida e captada pelo monocromador. Construímos então um mapa de cores da potência de luz emitida em função do comprimento de onda e da corrente aplicada nos nanolasers, conforme mostra o gráfico da figura 7.4.

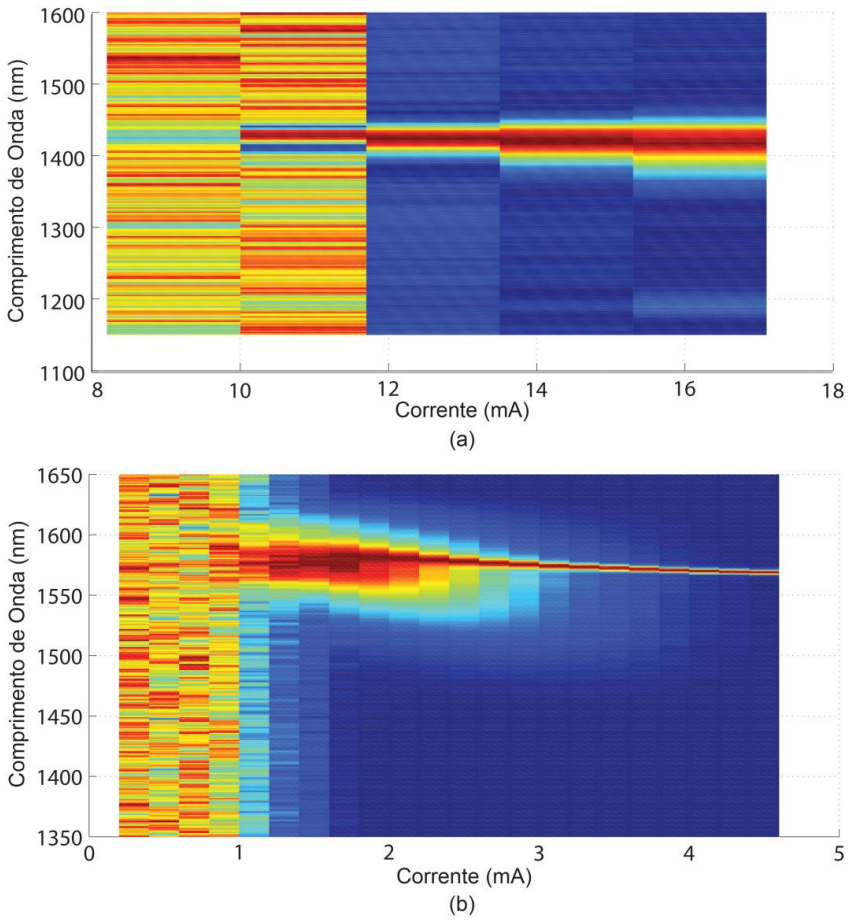


Fig. 7.4: Mapa de cores da potência óptica normalizada em função do comprimento de onda e da corrente aplicada para o nanolaser com meio de ganho (a) de MQW e (b) *bulk*. A escala de cor indica a potência óptica normalizada, onde o vermelho indica potência igual a 1 e azul igual a zero.

Nos dois mapas de cores da figura 7.4 a potência óptica emitida pelos nanolasers está normalizada. As escalas estão diferentes porque os dispositivos apresentam emissão em comprimentos de onda diferentes. No caso da escala de corrente, notamos que o nanolaser com MQW necessita de uma corrente maior aplicada. Não sabemos de fato o que acarretou nessa corrente maior, mas acreditamos ser algum aumento da resistência para injeção após o *wire-bonding*, que pode ter causado alguma alteração na qualidade do contato ôhmico.

O mapa da figura 7.4 (a), do nanolaser com MQW, mostra que para correntes abaixo de 10 mA a emissão é apenas ruído. Entre 10 e 12 mA observamos um modo principal se destacando, porém o nível de ruído ainda é muito alto. Em 12 mA a emissão passa a ser maior que o ruído, porém conforme continuamos a aumentar a corrente, a largura da emissão não diminui como esperado em um laser de semicondutor, mas passa a aumentar [24]. O resultado indica que não há a redução da emissão espontânea, ou seja, a cavidade parece não ser favorável à emissão estimulada em seu modo ressonante. Em conjunto com essa observação, notamos que

acima de 14 mA começa a aparecer uma emissão em um comprimento de onda pouco abaixo de 1200 nm. Os resultados parecem indicar que não há emissão estimulada em tal dispositivo.

Já o mapa da figura 7.4 (b), do nanolaser com meio *bulk*, mostra emissão em forma de ruído para correntes abaixo de 1 mA. Acima desse valor temos emissão espontânea e emissão espontânea amplificada até por volta de 3 mA, onde a largura da emissão principal começa a diminuir, como esperado em um laser de semicondutor [24]. Aproximadamente em 4.5 mA toda a emissão espontânea é suprimida, uma característica notada quando a emissão estimulada predomina no sistema. Além disso, não notamos a presença de emissão em outros comprimentos de onda para esse nanolaser.

Apesar de tais curvas serem aprazíveis para analisar qualitativamente a evolução dos nanolasers em função da corrente aplicada é difícil extrair informações quantitativas, por isso resolvemos escolher algumas correntes e graficar a evolução espectral, conforme mostram os gráficos da figura 7.5.

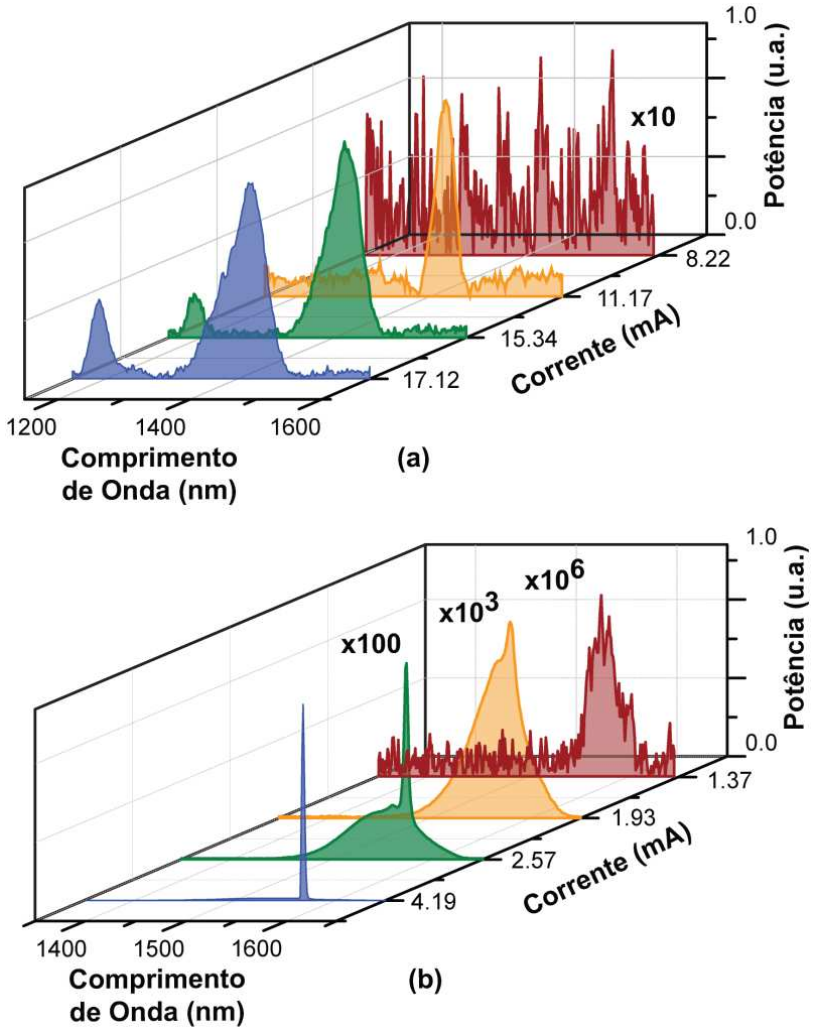


Fig. 7.5: Espectros normalizados dos nanolasers em função da corrente elétrica injetada para o nanolaser com meio de ganho (a) de MQW e (b) *bulk*.

A figura 7.5 (a) mostra a evolução espectral em função da corrente para o nanolaser com MQW no meio de ganho. A emissão espontânea começa a partir de 11.17 mA e em15.34 mA é possível observar uma emissão espontânea amplificada. A partir desse momento, conforme já comentamos antes, era esperado o aumento da emissão com redução da largura de linha, uma característica da transição da emissão espontânea para emissão amplificada, que é o limiar de laser de semicondutor. Porém, em 15.34 mA também observamos o surgimento da emissão espontânea para comprimentos de onda menores, pouco abaixo de 1200 nm. Aumentando a corrente para 17.12 mA, a emissão espontânea no comprimento de onda maior passa a saturar e tem sua largura de linha aumentada ainda mais, ao mesmo tempo em que a emissão espontânea no comprimento de onda menor passa a aumentar. Esses dois comprimentos de onda estão ao redor de 1420 nm e 1200 nm. Como as medidas foram realizadas a temperaturas criogênicas, é esperado esse desvio para comprimentos de onda menores na emissão em comparação com a emissão a temperatura ambiente [24]. Para essa estrutura, o comprimento de onda maior somente tem ganho devido aos poços quânticos, enquanto que o comprimento de onda menor só tem ganho devido às barreiras, por isso concluímos que tais emissões são dos modos de poços e barreiras, respectivamente. Porém, mesmo sem o modo de barreira, a emissão do poço seria saturada devido à fuga de portadores para as barreiras, conforme discutimos no capítulo 5.

Já a figura 7.5 (b) mostra a evolução espectral em função da corrente injetada no nanolaser com meio de ganho *bulk*. A emissão espontânea começa com 1.37 mA e a partir de 1.93 já está acima do nível de ruído. O regime de emissão espontânea amplificada é visível ao redor de 2.57 mA, onde já há um modo se definindo, mas o espectro total de emissão ainda é bem largo. Com apenas 4.19 mA a emissão estimulada sobrepõe a emissão espontânea e o modo fundamental tem seu limiar para um comprimento de onda de 1567 nm. Não observamos a presença de emissão em comprimentos de onda menores, em concordância com o que era esperado pelas simulações realizadas no capítulo 5 com o modelo de reservatório proposto.

A partir dos espectros mostrados na figura 7.5 podemos construir as curvas da potência de luz emitida pelos nanolasers em função da corrente injetada nos mesmos, curvas *LxI*. As curvas *LxI* em escala log-log encontram-se na figura 7.6.

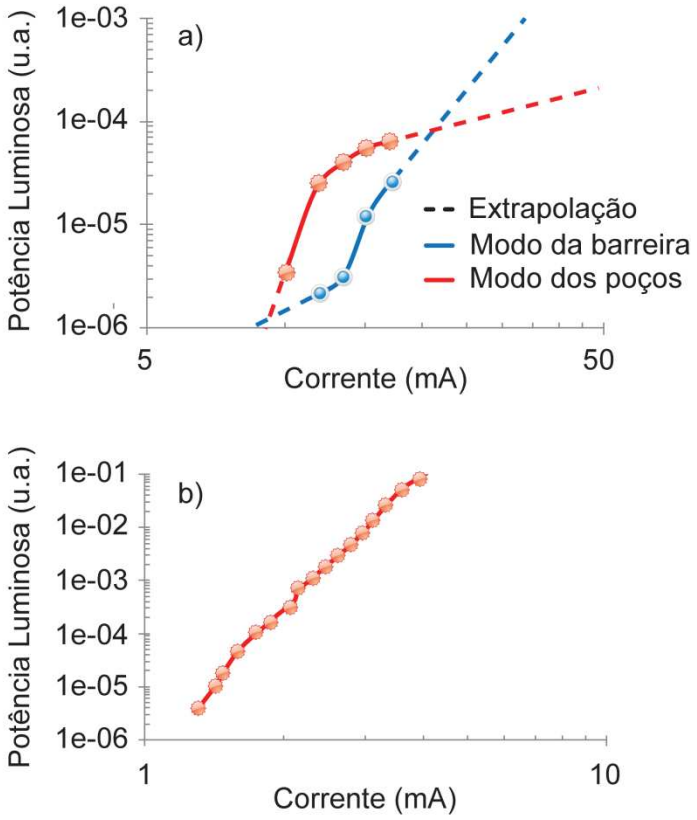


Fig. 7.6: Curvas em escala log-log da potência luminosa em função da corrente elétrica para o nanolaser com meio de ganho (a) de MQW e (b) *bulk*. Os pontos nas curvas são os máximos de potência para cada espectro obtido experimentalmente com diversas correntes.

Os pontos mostrados na figura 7.6 são os máximos da potência para cada corrente injetada na cavidade, extraídos através do mapa espectral da figura 7.4. Neste caso, obviamente as potências não foram normalizadas.

No caso do nanolaser com MQW, curva LxI mostrada na figura 7.6 (a), obtemos os máximos da potência luminosa emitida pelo dispositivo para duas regiões diferentes do espectro, uma na região de ganho dos poços quânticos, pontos vermelhos, e outra na região de ganho da barreira, pontos azuis. As linhas sólidas unindo os pontos experimentais mostram que acima de 10 mA a emissão no poço quântico já começa a saturar, conforme indicada pela linha em vermelho. Ao mesmo tempo a emissão nas barreiras passa a aumentar significativamente, conforme visto pelo aumento da inclinação da curva em azul. Podemos utilizar alguns pontos experimentais para extrapolar as curvas e tentar prever o comportamento do nanolaser para correntes elétricas abaixo e acima do que foi medido experimentalmente.

Para correntes inferiores às utilizadas experimentalmente há uma tendência da emissão da barreira começar maior do que a emissão nos poços quânticos, conforme previmos teoricamente e foi explicado devido ao menor fator de qualidade da barreira, que a princípio perde mais luz não coerente por radiação para o espaço livre. Já para correntes superiores, também observamos

evidências experimentais que foi previsto teoricamente: a saturação da emissão nos poços quânticos devido ao aumento da emissão na barreira. A corrente na qual isso ocorre pode não ser a correta e varia de acordo com os pontos escolhidos para extrapolação. Não conseguimos atingir correntes maiores experimentalmente porque o laser queimava a partir do último ponto medido.

Já o nanolaser com meio de ganho *bulk* obteve um desempenho muito melhor, conforme mostra a curva *LxI* da figura 7.6 (b). Para correntes menores que 2 mA há apenas emissão espontânea e o limiar é atingido para uma corrente um pouco maior que 2 mA, visto através da pequena descontinuidade na curva, uma assinatura da transição da emissão espontânea para a emissão estimulada. Após o limiar, a inclinação da curva também é muito similar à inclinação da curva antes do limiar, mais um indício de que após a descontinuidade temos emissão coerente de radiação. A inclinação das curvas antes e depois do limiar devem ser as mesmas, pois a dependência da emissão espontânea e estimulada com a corrente elétrica, ou seja, com a densidade de portadores, é a mesma, dependendo de n^2 [45].

Para uma análise mais completa também devemos observar o comportamento da largura de linha à meia altura (FWHM – *full width half maximum*, do inglês) e do deslocamento do comprimento de onda com o aumento do bombeio eletrônico. Consideramos o comprimento de onda referente ao máximo valor da emissão e a largura de linha à meia altura desse máximo, com respeito à linha de base. Esses resultados encontram-se na figura 7.7.

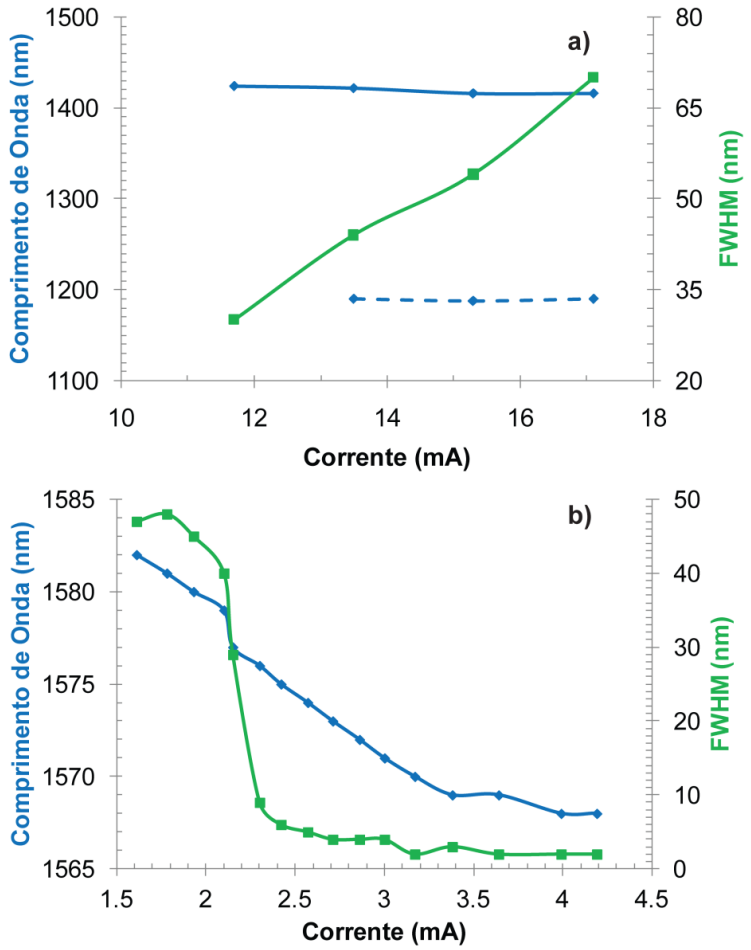


Fig. 7.7: Curvas do comprimento de onda de emissão (em azul) e da largura de linha à meia altura (em verde) do nanolaser com meio de ganho (a) de MQW e (b) *bulk*.

Para baixa injeção observamos uma largura de linha da emissão da ordem de 30 nm para o nanolaser com meio de ganho de MQW, curva em verde da figura 7.7 (a), o que indica que a emissão espontânea está presente em uma ampla faixa de ganho material. Já para o nanolaser com meio de ganho *bulk*, curva em verde da figura 7.7 (b), a largura de emissão é da ordem de 50 nm. Com o aumento da injeção eletrônica a emissão espontânea começa a ser suprimida e a largura de linha diminui, conforme pode ser observada no momento em que a curva em verde da figura 7.7 (b) mostra uma queda abrupta da largura de linha. Entretanto, a largura da emissão para o nanolaser com MQW apenas aumenta com a injeção, indicando a ausência de supressão da emissão espontânea.

A diferença entre os dois nanolasers fica mais clara agora: o nanolaser com meio de ganho *bulk* apresenta redução da largura de linha, uma característica típica de lasers de semicondutor. Essa redução tem um limite conhecido pelo nome de Schawlow-Townes e indica a supressão da emissão espontânea, ou seja, redução do ruído, isso junto com o aumento da emissão coerente proveniente da emissão estimulada [72]. Entretanto, o nanolaser com meio de

ganho de MQW apresenta um alargamento da largura de linha da emissão com o aumento do bombeio indicando que não há emissão estimulada para o modo ressonante da cavidade, ou então, que a emissão espontânea ainda é muito maior do que a contribuição da emissão estimulada para o modo em questão.

Devemos também analisar o comprimento de onda central da emissão. Com o aumento do bombeio eletrônico é esperado um desvio de emissão para comprimentos de onda menores (*blue shif,* do inglês) no caso de um meio *bulk* e uma variação pequena no caso de um meio de MQW, já que os estados energéticos são quantizados e não um contínuo. Para a emissão do nanolaser com meio de ganho de MQW, a curva em azul da figura 7.7 (a) indica que após a emissão espontânea se estabelecer, seu comprimento de onda é praticamente constante. Entretanto, se seguirmos também o comprimento de onda emitido pela barreira, ao redor de 1190 nm (curva tracejada em azul na figura 7.7 (a)), vemos que para um regime de alta injeção eletrônica há emissão junto com o aumento da a largura de linha do modo principal. Isso indica que há uma fuga de portadores para as barreiras, que inicia uma emissão espontânea em comprimentos de onda menores e pode ser responsável pela saturação da emissão do modo ressonante principal. Já a curva em azul da figura 7.7 (b) mostra um claro desvio da emissão do nanolaser com meio de ganho *bulk* para comprimentos de onda menores, que aumenta de maneira contínua e linear com o aumento da injeção eletrônica.

No caso da largura de linha do nanolaser com meio de ganho *bulk*, que funcionou como o esperado, há redução de aproximadamente 10 nm para 2 nm após o limiar. Esses valores de largura de linha foram obtidos com a fenda do monocromador aberta. Se fecharmos a fenda do monocromador, obtemos uma largura de linha de aproximadamente 0.4 nm, valor próximo de outros nanolasers demonstrados na literatura e acima da resolução do monocromador que é de 0.03 nm. Se calcularmos o limite fundamental da largura de linha desse nanolaser, utilizando a expressão da largura de linha de Schawlow-Townes, obtemos um valor fundamental de $\Delta\lambda_{ST} = 0.235\ nm$, ou seja, estamos muito próximos do limite fundamental para esse nanolaser [73,74]. Com relação ao comprimento de onda, medimos um desvio de aproximadamente 10 nm para o azul, na direção dos comprimentos de onda menores. Conforme escrito no parágrafo anterior, esse desvio é característico de lasers de semicondutor e é explicado pelo efeito de preenchimento das bandas, devido ao aumento da densidade de portadores com o bombeio.

Uma análise dos resultados experimentais em conjunto com toda a análise teórica realizada indica que o ganho limiar de um nanolaser com meio de ganho de múltiplos poços quânticos é tão alto que permite o preenchimento de estados da barreira. Ao permitir que portadores estejam presentes na barreira, ocorre recombinação radiativa que leva à saturação da emissão no modo dos poços quânticos. No caso do nanolaser com meio de ganho *bulk*, obtivemos um nanolaser de semicondutor metálico-dielétrico com bombeio eletrônico. Esse nanolaser possui uma corrente de limiar de 2.04 mA, com emissão em 1567 nm e largura de linha de 0.4 nm.

7.3 Uma análise geométrica dos nanolasers

Com os resultados mostrados, ficou claro que somente obtemos um nanolaser de semicondutor metálico-dielétrico com bombeio eletrônico se utilizarmos um meio de ganho *bulk*. No caso de escolhermos um meio de ganho com múltiplos poços quânticos, nossos resultados teóricos mostraram que havia saturação da emissão do modo ressonante no comprimento de onda do poço quântico devido à fuga de portadores para a barreira, que devido ao design escolhido permitia a emissão radiativa em comprimentos de onda referentes à energia do *gap* da barreira.

Como o nanolaser caracterizado possui dimensões diferentes do projeto teórico, resolvemos simular novamente os modos eletromagnéticos confinados na cavidade e suas propriedades. Os novos resultados da simulação dos modos eletromagnéticos para as duas cavidades encontram-se na figura 7.8, e a geometria da cavidade possui dimensões iguais às medidas com um SEM dos nanolasers, após a etapa de formação dos pedestais.

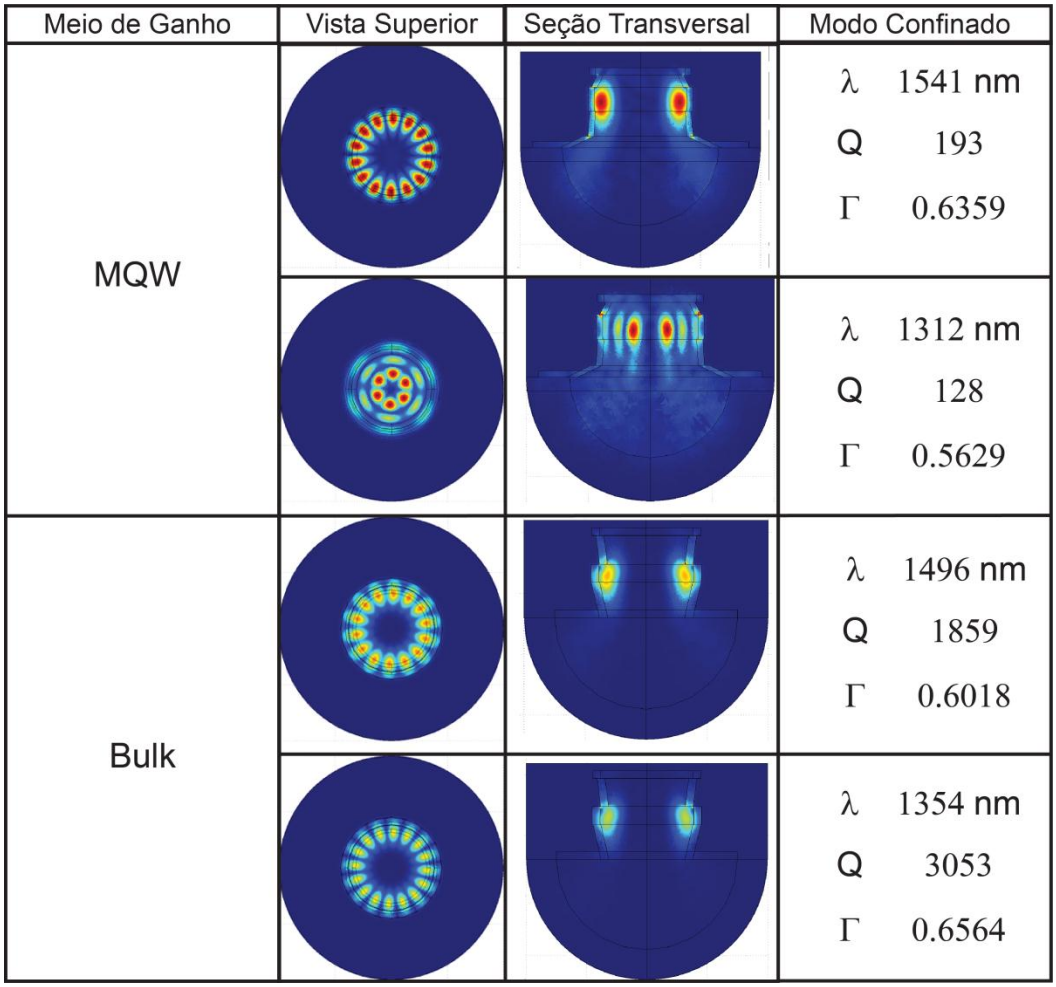


Fig. 7.8: Vista superior e da seção transversal da potência dos modos confinados em um nanolaser com meio de ganho de MQW e *bulk* com suas respectivas propriedades na coluna da direita.

A distribuição espacial dos modos eletromagnéticos simulados para as duas cavidades mostra que todos eles são do tipo WGM, com exceção do segundo modo confinado para o nanolaser com meio de ganho de MQW. Os modos apresentam uma ordem azimutal *M* maior, pois a cavidade possui um raio muito maior do que a cavidade considerada no capítulo 2. Todos os modos tem a maior parte de sua energia distribuída dentro do meio dielétrico, mas parte dela sempre está distribuída ao longo do isolante. De qualquer forma, a penetração de todos os modos dentro da região metálica é praticamente nula. No caso do nanolaser com meio de ganho de MQW, o segundo modo confinado simulado não é do tipo WGM e possui ordem radial 3, fazendo com que a energia eletromagnética fique confinada em uma região mais interna do meio dielétrico. Isso fica claro através de uma visão da potência através de uma seção transversal do dispositivo. Todos eles apresentam energia armazenada apenas na borda do meio dielétrico, com exceção do nanolaser com modo de ordem radial 3, no qual podemos ver 3 nós e 3 máximos.

Um problema observado é que, devido à fabricação, os fatores de qualidade para a estrutura com MQW é 9.6 x mais baixa que para o meio *bulk*. Isto inviabiliza uma comparação direta. No entanto, é possível fazer uma análise indireta, mas convincente, sobre a melhor adequação do material *bulk* para o provimento de ganho em nanolasers. Descrevemos abaixo nossa argumentação. Deve-se salientar que a comparação direta é objetivo de trabalhos futuros.

As propriedades dos modos eletromagnéticos confinados, λ, Q e Γ, encontram-se na coluna da direita da figura 7.8. Para o nanolaser com meio de ganho de MQW obtemos dois modos, um com λ em 1541 nm e outro com λ em 1312 nm, ou seja, o primeiro modo ressonante é possível devido ao ganho proveniente dos MQW enquanto que o segundo é devido ao ganho proveniente das barreiras, já que os poços quânticos não provêm ganho nessa faixa de comprimento de onda, conforme calculado e mostrado na figura 3.5 (b). Entretanto, a geometria da cavidade resultante da fabricação é menos adequada para o confinamento de luz, conforme notamos pelos baixos Q's obtidos na simulação, de 193 e de 128 para o modo de MQW e para o modo de barreira respectivamente. Apesar de ser um fator de qualidade muito baixo, outros grupos de pesquisa, como o de Cun-Zheng Ning, na *University of Arizona*, já demonstraram experimentalmente um nanolaser de semicondutor metálico-dielétrico com bombeio eletrônico à temperatura ambiente com corrente de limiar de aproximadamente 1 mA, cujo Q era de 235 e o Γ de 0.645, valores muito similares aos nossos [29]. A diferença entre o dispositivo proposto por K Ding et. al. é que a cavidade é do tipo *Fabry-Perot* e o meio de ganho é *bulk*.

A cavidade ser *Fabry-Perot* implica em uma redução da taxa de recombinação superficial já que não há pedestais, que, apesar de aumentar significativamente o confinamento de luz na cavidade, acaba expondo a região superior e inferior do meio ativo [75]. O fato do meio de ganho material escolhido ser do tipo *bulk*, mostra mais uma vez que ainda não conseguiram projetar um nanolaser com o uso de múltiplos poços quânticos. Também mostra que é possível atingir o limiar em uma cavidade com fator de qualidade muito baixo, fato que parece ser ao menos até então, impossível com o uso de múltiplos poços quânticos. Em suma, apesar do baixo Q deste laser citado, o nanolaser funcionou. No nosso caso, com MQW, não obtivemos sucesso.

Isto é um forte indicativo da inadequação de ganho provido por MQW para ressonadores que demandam alto ganho. Outros fatores como o descasamento do parâmetro de rede durante o crescimento dos poços, ou mesmo algum stress criado durante o processo de corrosão dos pilares dielétricos podem também ter afetado a qualidade do dispositivo através de alterações das propriedades eletrônicas devido ao stress. Entretanto, acreditamos que tais alterações não seriam tão significativas a ponto de não permitir o funcionamento do dispositivo. Logo, descartamos essa hipótese como responsável pelo não funcionamento dos nanolasers com poços quânticos.

Voltando à nossa cavidade, com meio de ganho de MQW, em comparação com os resultados obtidos por K. Ding et. al., podemos concluir que os poços quânticos são o motivo de não conseguirmos um nanolaser de semicondutor metálico dielétrico com bombeio eletrônico devido ao alto ganho de limiar que permite a fuga de uma alta densidade de portadores para as barreiras [29]. Já para um meio de ganho *bulk* obtemos dois modos ressonantes, onde o segundo modo confinado, com comprimento de onda menor, possui um Q muito maior que o primeiro modo confinado, mas mesmo assim os resultados experimentais mostraram que atingimos o limiar apenas para o primeiro modo. Isso é permitido devido ao perfil da curva de ganho em função do comprimento de onda e da injeção de portadores, conforme mostramos no capítulo 3. Primeiro, há ganho para comprimentos de onda maiores, e antes que haja ganho para o segundo modo, o primeiro já atinge seu limiar.

No caso do nanolaser com meio bulk, o valor teórico simulado para o fator de qualidade é de 1859. Utilizando o comprimento de onda de emissão medido e a largura de linha obtida, calculamos um fator de qualidade de 3917, acima de seu valor no caso da cavidade passiva, o que indica que o dispositivo atingiu seu limiar e se comporta como um laser.

Assim, neste capítulo, além de demonstrarmos o efeito de fuga de portadores para as barreiras em um nanolaser com meio de ganho de MQW, demonstramos um nanolaser com bombeio eletrônico a temperaturas criogênicas.

7.4 Conclusão

Neste capítulo descrevemos toda a caracterização dos nanolasers fabricados e relacionamos os resultados obtidos experimentalmente com toda nossa especulação teórica acerca do efeito do meio de ganho no desempenho de um nanolaser de semicondutor metálico-dielétrico com bombeio eletrônico.

Descrevemos toda a bancada experimental utilizada para a caracterização optoeletrônica dos nanolasers simultaneamente com uma breve caracterização elétrica. Conseguimos obter um nanolaser com corrente de limiar de 2.04 mA, com emissão em 1567 nm e largura de linha de 0.4 nm para o dispositivo com meio de ganho *bulk* operando a 77 K.

No caso do nanolaser com meio de ganho de MQW observamos a saturação da emissão do modo ressonante em comprimento de onda dos poços quânticos devido à fuga de portadores para a barreira que resulta em emissão espontânea em comprimentos de onda referente ao ganho da mesma.

Em uma análise do comportamento dos nanolasers medidos em conjunto com resultados de simulação das duas cavidades e em comparação com outros nanolasers obtidos experimentalmente na literatura, pudemos concluir que um design ruim de cavidade em termos do confinamento do modo eletromagnético não é o principal problema para obter um nanolaser com bombeio eletrônico. Em artigo recente foi demonstrado um nanolaser com um Q tão baixo como nosso nanolasers de MQW operando com bombeio eletrônico à temperatura ambiente [29]. Entretanto o meio de ganho desse dispositivo era *bulk*. Nossos resultados experimentais assistidos por simulações permite então concluirmos que poços quânticos não são a melhor escolha de meio de ganho para nanolasers devido à fuga de portadores para as barreiras. Ainda não é claro se só o fato de ocorrer fuga deteriora a emissão no modo ressonante de interesse ou se o responsável é a existência de um segundo modo consumindo portadores. De qualquer forma esse efeito é inerente da escolha de usar poços quânticos como meio de ganho em lasers cujo ganho de limiar é muito alto.

Em um projeto em andamento estamos fabricando novos nanolasers com os dois meios de ganho para fazer uma análise quantitativa mais elaborada e concluir de fato os resultados que foram aqui mostrados pela primeira vez dentro da área de nanolasers de semicondutor com bombeio eletrônico.

8. Conclusão

Nesta tese mostramos os resultados obtidos durante 4 anos de trabalho em nanolasers de semicondutor metálico-dielétrico com bombeio eletrônico. Podemos resumir esse trabalho em 3 resultados importantes: inclusão da injeção eletrônica no projeto de um nanolaser, fabricação e caracterização de um nanolaser com bombeio eletrônico e o efeito do meio de ganho no desempenho de um nanolaser.

Durante a fase do projeto de um nanolaser, consideramos pela primeira vez o efeito do bombeio eletrônico no projeto da cavidade. Até então, as cavidades eram projetadas para o aumento do seu fator de qualidade e consequente redução do ganho de limiar. Entretanto, conforme mostramos nessa tese, a redução dos pedestais que ensanduicham o meio de ganho implica em um aumento do fator de qualidade, porém dificultam a injeção de corrente elétrica na heteroestrutura devido a um aumento da resistência elétrica com redução da área da seção transversal dos pilares. Como resultado, há também um aumento da potência elétrica dissipada durante a operação dos nanolasers. Mostramos que há um valor otimizado do raio dos pedestais que leva em conta o fator de qualidade em conjunto com a injeção eletrônica. Tal análise foi realizada para nanolasers pela primeira vez nesta tese.

Fabricamos um nanolaser de semicondutor metálico-dielétrico com meio de ganho *bulk* de InGaAs. O dispositivo apresenta um núcleo com 850 nm de raio, pedestal superior com 740 nm de raio e pedestal inferior com 760 nm de raio. O nanolaser foi caracterizado a 77 K e apresentou uma corrente de limiar de 2.04 mA, com emissão em 1567 nm e largura de linha de 0.4 nm. Observamos um deslocamento para o azul da ordem de 10 nm e redução da largura de linha após o limiar conforme segue o modelo de Shawlow-Townes. Assim, obtivemos sucesso no desenvolvimento de um nanolaser metálico-dielétrico com bombeio eletrônico.

Durante o projeto e fabricação dos nanolasers escolhemos trabalhar com dois meios de ganho diferentes. Projetamos então dois nanolasers, otimizando tanto as propriedades do modo eletromagnético bem como as propriedades de injeção eletrônica. Um dos nanolasers possui meio de ganho *bulk* e o outro de múltiplos poços quânticos. O meio *bulk* foi utilizado por já ter sido já demonstrado em outros nanolasers com bombeio eletrônico. Quanto aos poços quânticos, foram sugeridos na literatura como solução para obter nanolasers com bombeio eletrônico à temperatura ambiente, mas desde 2007, ano no qual o primeiro nanolaser metálico-dielétrico foi demonstrado, nenhum nanolaser com poços quânticos e bombeio eletrônico fora demonstrado. Esse fato nos chamou a atenção, então decidimos comparar o desempenho de dois nanolasers similares, porém cada um deles com um desses dois meios de ganho.

Para a cavidade proposta em nossas simulações, do tipo *nanopatch*, observamos que existem dois modos eletromagnéticos confinados dentro da cavidade. No caso de um nanolaser com meio de ganho *bulk* isso não é um problema, já que o primeiro modo, em comprimento de

onda maior, atinge seu limiar fazendo com que haja um *clamping* dos portadores, impedindo o surgimento de um segundo modo ressonante, em comprimento de onda menor. Já no caso do nanolaser cujo meio de ganho é de múltiplos poços quânticos, surge um problema inerente do tipo de estrutura em um regime de alta injeção: a densidade de portadores de limiar faz com que os quase-níveis de Fermi para buracos e elétrons se desloquem a ponto de permitir que os estados eletrônicos da barreira sejam preenchidos. Assim, há uma fuga de portadores dos poços para as barreiras que aumenta o limiar dos nanolasers e consequentemente pode aumentar os efeitos de auto-aquecimento com a injeção de portadores. Além disso, há um segundo modo eletromagnético confinado nessa cavidade, com um comprimento de onda dentro da região que a barreira prove ganho material. A interação radiação-matéria permite que haja emissão espontânea nesse comprimento de onda, o que consome os portadores resultantes da fuga dos poços quânticos. Dependendo do projeto dessa cavidade, conforme mostramos nessa tese, é possível que haja emissão em comprimento de onda referente à barreira, o que inibe a emissão estimulada em comprimento de onda referente aos poços quânticos. Assim, através de um modelo de reservatório de portadores inseridos nas convencionais equações de taxa para lasers de semicondutor, conseguimos demonstrar o efeito da saturação da emissão nos poços quânticos em decorrência da fuga de portadores para as barreiras, fenômeno que não ocorre caso o meio de ganho seja *bulk*.

Além do nanolaser com meio *bulk*, também fabricamos e caracterizamos um nanolaser de semicondutor metálico-dielétrico com meio de ganho de múltiplos poços quânticos. Comparando o desempenho dos dois nanolasers, observamos que no caso do nanolaser com múltiplos poços quânticos ocorre uma saturação da emissão proveniente dos poços no momento em que se inicia a emissão estimulada nas barreiras. Como as cavidades eram diferentes do projeto inicial, simulamos as propriedades eletromagnéticas desse novo design e, comparando com resultados publicados recentemente, concluímos que o uso de poços quânticos é prejudicial no desempenho de um nanolaser, inibindo a emissão estimulada no modo de interesse.

Alguém pode vir a sugerir uma engenharia de poços quânticos para prover alto ganho com reduzida fuga de portadores para as barreiras. A solução mais óbvia seria aumentar a altura das barreiras, porém tal solução criaria mais níveis quantizados e, portanto, outras transições em comprimentos de onda menores competindo pela densidade de portadores injetada nos poços. Para evitar os estados quantizados de maior energia é necessário reduzir a largura dos poços, o que reduz a densidade de estados e o fator de confinamento, aumentando o ganho modal de limiar. A próxima ideia seria aumentar o número de poços quânticos, o que implica em aumentar a não uniformidade de injeção de portadores nos poços. Além disso, com o aumento do número de poços pode ser necessário aumentar o volume do meio ativo levando ao aumento do volume do nanolaser. Outra solução razoável é crescer poços quânticos e barreiras estressados para aumento do ganho material e controle dos níveis de energia quantizados. Entretanto, os defeitos criados na interface dos materiais crescidos com stress podem aumentar a velocidade de recombinação superficial devido a imperfeições criadas após o ataque químico seletivo para

formação dos nano pilares. Tudo isso mostra que pode, em princípio, ser possível controlar a fuga de portadores para as barreiras, mas com um projeto muito mais complexo, que não sabemos se dára certo ou não. Concordamos que um trabalho muito maior ainda deve ser feito para se ter uma resposta conclusiva sobre o uso de poços quânticos em nanolasers. Entretanto, até o momento, nos parece claro que o uso de um meio de ganho *bulk* é muito mais adequado pra o projeto de um nanolaser metálico-dielétrico com bombeio eletrônico operando a temperatura ambiente.

Cabe comentar sobre o resultado desse trabalho aplicado a outros tipos de nanolasers. No caso de nanolasers de fios quânticos, toda essa análise se enquadra muito bem, pois a injeção de portadores em nanofios é ainda mais difícil, de forma que a escolha do meio de ganho é essencial para um bom desempenho, caso a emissão estimulada seja alcançada. Já no caso de nanolasers de cristal fotônico, tal análise não faz muito sentido por dois motivos: um cristal fotônico possui um *footprint* muito grande e maior facilidade para injeção de portadores com reduzido efeito de auto-aquecimento; e os fatores de qualidade dos cristais fotônicos são tão altos que o ganho de limiar é pequeno, o que provavelmente não permite o efeito do preenchimento dos estados das barreiras com as fugas dos portadores dos poços quânticos.

Assim, concluímos que o trabalho realizado durante esse doutorado é de fundamental importância dentro da área de nanolasers na qual as dimensões da cavidade são de fato da ordem ou menores que os comprimentos de onda envolvidos no processo.

Continuação do trabalho

Primeiramente, o ponto mais iminente de meu trabalho implica em realizar a análise comparativa entre os meios de ganho utilizando de cavidades as mais parecidas possíveis. Conforme discutimos nesta tese, nossa comparação experimental utilizou cavidades com Q's muito diferentes. Apesar de nosso resultado ser muito animador, seria mais contundente termos esta comparação o mais direta possível.

Também, ainda há muito a ser realizado em termos da fabricação de nanolasers de semicondutor metálico-dielétrico com o intuito de melhorar o confinamento fotônico e a redução da corrente de limiar.

Na etapa de corrosão química via RIE para formação dos pilares ainda é necessário obtermos uma receita que permita obter pilares menos inclinados, pois a inclinação reduz o fator de qualidade das cavidades.

Um controle maior do ataque químico seletivo para formação dos pedestais ainda deve ser obtido para aumentar a quantidade de nanolasers fabricados que resistem a todas as etapas de fabricação. Além disso, ainda é necessário estudar ataques químicos seletivos que reduzem a

criação de defeitos nas interfaces e consequentemente reduzem a recombinação superficial que aumenta o limiar dos nanolasers de forma significativa.

Uma análise mais detalhada de contatos ôhmicos deve ser feita já que estamos trabalhando em uma escala de tamanho muito menor do que o proposto e demonstrado em qualquer trabalho de desenvolvimento desse tipo de contato. Devemos entender se o modelo ainda é válido para descrever contatos de tamanhos tão reduzidos, onde os efeitos de borda são mais significativos.

No caso da fabricação do *nanopatch*, é necessário obter um melhor material para realizarmos a planarização, reduzindo o stress formado. Também precisamos escolher um material mais adequado para colar a amostra sobre um substrato e consequentemente obter um melhor processamento no substrato da amostra.

Ainda na fabricação, iniciamos agora um estudo do uso de alumina (Al_2O_3), depositado via ALD (*Atomic Layer Deposition* – deposição por camada atômica, do inglês), como substituição ao SiO_2 depositada entre o meio dielétrico e o metal. A deposição por ALD a princípio reduz os estados de superfície e melhora a passivação da superfície. Além disso, esse material possui condutividade térmica de 10 a 40 % melhor do que o SiO_2, portanto reduziríamos também os efeitos de aquecimento no nanolaser. Nesse projeto já temos nanolasers fabricados e medidos, e estamos interpretando os resultados obtidos com assistência de simulações.

A etapa final desse projeto, após termos um laser com bom desempenho operando a temperatura ambiente é realizar a integração em uma plataforma de silício. As estratégias de integração ainda estão abertas, mas provavelmente partiremos para a técnica de *wafer-bonding*. Só não sabemos se a melhor solução será realizar a integração pré ou pós-fabricação.

Como conclusão, gostaria de comentar que tenho uma proposta de retorno à UCSD para um pós-doutorado no qual darei continuidade a esse projeto em colaboração com o LPD IFGW – UNICAMP.

Além dos nanolasers

Além de todo o trabalho sobre os nanolasers realizados nessa tese de doutorado, trabalhei em outros projetos que me renderam algumas publicações e conhecimento na área de dispositivos optoeletrônicos e fotônica em geral.

No início do doutorado trabalhei nos efeitos da fabricação de dispositivos optoeletrônicos utilizando um feixe focalizado de íons (FIB – *Focused Ion beam*, do inglês). Nesse projeto verificamos o efeito da implantação de íons de Ga^+ durante o processo de corrosão com o feixe focalizado de íons. Fabricamos espelhos de lasers de semicondutores e microdiscos lasers para averiguar o aumento das perdas ópticas devido à implantação resultante do processo. Trabalhei

com fabricação de dispositivos, caracterização, simulações com o método de Monte Carlo para prever a profundidade de implantação e simulações térmicas.

Durante o doutorado trabalhei em um projeto de cavidades ressonantes com silício amorfo dopado com érbio para emissão na banda C. Nesse projeto trabalhei na simulação de estruturas multi-camadas para aumento do confinamento da luz. Com a estrutura resultante projetei um cristal fotônico o qual caracterizamos e mostramos o aumento da emissão do érbio devido ao efeito do confinamento No projeto realizei simulações das estruturas de banda em duas e três dimensões e simulei os modos eletromagnéticos confinados. Também trabalhei na caracterização do cristal fotônico com o uso de *tapered fibers*.

Partindo mais para o lado da fotônica, trabalhei em um projeto de ressonadores de silício em anéis acoplados e com aquecedores. O objetivo era controlar o *free spectral range* (FSR) da cavidade através de um efeito Vernier causada pela mudança das ressonâncias de cada anel, de maneira independente devido ao efeito termo-óptico. Neste projeto realizei as simulações dos modos térmicos para conhecer sua distribuição espacial e realizei a caracterização dos dispositivos.

Por último, já no final do doutorado, estou trabalhando em um projeto de moléculas fotônicas que consistem de anéis ressonadores de silício acoplados internamente com outros anéis, de maneira que podemos controlar simultaneamente o fator de qualidade e o FSR das cavidades, em um *footprint* reduzido. Essas moléculas podem ser aplicadas para processamento óptico de sinais como: filtro dos picos satélites da modulação, gerar *slow and fast light*, *multicasting* e modulação além do limite da largura de banda.

Finalizo então essa tese, a qual acredito ter concluído com sucesso, considerando o ponto de vista da escolha de meios ativos bulk e não poços quânticos para nanolasers. Este ponto é essencial para a área uma vez que alerta para um erro conceitual que parece ter permeado o desenvolvimento de nanolasers em anos recentes. Nossa afirmação é que poços quânticos são menos desejáveis se alto ganho é demandado. Ou seja, para nanolasers, a otimização do meio de ganho difere muito de lasers micrométricos, hoje já comerciais que utilizam poços quânticos. Mais ainda, ressalto que este trabalho me permitiu um grande aprofundamento em técnicas de projeto, fabricação e caracterização de dispositivos optoeletrônicos e fotônicos, além de desenvolver aplicações para os mesmos.

Apêndice A. Cálculo do elemento de matriz do dipolo

A regra de ouro de Fermi determina a taxa de transição entre dois estados quantizados quaisquer, ou seja, com ela é possível calcular a probabilidade por unidade de tempo de um fóton ser emitido ou absorvido, *B*, através da transição de portadores entre dois estados [66]:

$$B = \frac{2\pi}{\hbar}\left|H_{mj}\right|^2 \delta\left(E - E_{mj}\right) \qquad \text{(A.1)}$$

onde *E* é a energia do fóton emitido e E_{mj} a energia de transição entre os dois níveis do sistema, *j* representa o estado inicial e *m* o estado final. O termo $\left|H_{mj}\right|^2$ vem da perturbação da matéria por um campo elétrico $\vec{E}$ que permite a emissão espontânea, estimulada e absorção de radiação. Esse termo é escrito como:

$$\left|H_{mj}\right|^2 = \frac{q}{m}\left(\frac{2\hbar}{\varepsilon\omega V}\right)^{1/2} |\langle m|\vec{p}.\hat{e}|j\rangle|^2 \qquad \text{(A.2)}$$

onde ε é a constante dielétrica do meio, $\vec{p}$ é o momento linear do elétron e $\hat{e}$ é a direção da polarização (linear) do campo elétrico.

A expressão A.2 é o elemento de matriz da perturbação do campo eletromagnético $\vec{p}.\vec{A}$ ($\vec{A}$ é o potencial vetor) no hamiltoniano não perturbado do sistema material considerando a aproximação semiclássica. A amplitude do potencial vetor conecta de maneira correta o vetor de Poyinting clássico e o fluxo de fótons multiplicado pela energia de cada fóton. A expressão A.1 é então reescrita como:

$$B = \frac{2q^2}{m^2}\left(\frac{h}{\varepsilon EV}\right)\left|(\vec{p}.\hat{e})_{mj}\right|^2 \delta\left(E - E_{mj}\right) \qquad \text{(A.3)}$$

O que mostra que um fóton absorvido ou emitido durante a transição entre os dois estados *m* e *j* deve ter energia igual à diferença de energia entre esses dois níveis, E_{mj}. Para obter os elementos da matriz de transição que aparece na equação A.3 utilizamos de um método perturbativo para obter as ondas de Bloch próximas ao centro da zona de Brillouin (método k.p) [76]. Essas relações em conjunto com alguns resultados experimentais permitem obter os valores dos elementos de matriz necessários. Como é um método perturbativo, a solução descreve muito bem o sistema apenas para vetores de onda muito pequenos (próximos ao centro da zona de Brillouin) e não descreve corretamente a influência de bandas distantes.

Utilizamos então o modelo de Kane [77]. Esse modelo consiste em obter ondas de Bloch e suas respectivas energias considerando-as como uma combinação linear dos orbitais atômicos

s-p dos quatro elétrons de valência do nível ns^2np^2. O cálculo é feito com o uso do método perturbativo k.p em torno de k = 0 [76]. Em geral, já se utilizam os seis orbitais híbridos oriundos da interação spin-órbita, autovetores dos operadores *J* e *Jz*: $|J, m_j\rangle$, onde *j*=1/2,3/2 e m_j = *j*,*j*-1,...,-*j*. Com isso, obtemos 6 sub-bandas, referentes à banda de valência e duas bandas de condução. Essa base escrita em termos dos orbitais atômicos encontra-se na tabela A.1.

Tab. A.1: Orbitais atômicos u_i com auto-estados ε_i ($k=0$) nos pontos Γ das bandas.

u_i	$\|J, m_j\rangle$	Ψ_{J,m_J}	ε_i ($k=0$)	
u_1	$\left\|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$i\|s\uparrow\rangle$	0	Γ_6
u_3	$\left\|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}\|Z\uparrow\rangle+\frac{1}{\sqrt{6}}\|(X+iY)\downarrow\rangle$	$-\varepsilon_0$	Γ_8
u_5	$\left\|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\|(X+iY)\uparrow\rangle$	$-\varepsilon_0$	Γ_8
u_7	$\left\|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}}\|(X+iY)\downarrow\rangle+\frac{1}{\sqrt{3}}\|Z\uparrow\rangle$	$-\varepsilon_0-\Delta$	Γ_7
u_2	$\left\|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$	$i\|s\downarrow\rangle$	0	Γ_6
u_4	$\left\|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}\|(X-iY)\uparrow\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}\|Z\downarrow\rangle$	$-\varepsilon_0$	Γ_8
u_6	$\left\|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\|(X-iY)\downarrow\rangle$	$-\varepsilon_0$	Γ_8
u_8	$\left\|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}\|(X-iY)\uparrow\rangle+\frac{1}{\sqrt{3}}\|Z\downarrow\rangle$	$-\varepsilon_0-\Delta$	Γ_7

Onde Γ_6 corresponde à banda de condução, Γ_8 aos buracos pesados $\left(m_j = \pm 3/2\right)$ e ao aos buracos leves $\left(m_j = \pm 1/2\right)$ e Γ_7 à banda de *split-off*. Note que o deslocamento em energia dos estados eletrônicos, Δ, já está presente. Esse fator aparece quando consideramos o acoplamento spin-órbita [78].

Os estados atômicos de Bloch descritos na tabela A.1 são auto-estados da Hamiltoniana que descreve uma partícula sujeita ao potencial periódico de uma rede cristalina [79]:

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m}+U(r)+k.p\right]u_k(r)=\left(\varepsilon_k-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)u_k(r) \quad \text{(A.4)}$$

Com a tabela A.1 e a expressão A.4 podemos construir a relação de dispersão em função de *k* para as 8 bandas através da diagonalização de A.4. A matriz a ser diagonalizada é mostrada em A.2.

Tab. A.2: Matriz para a Hamiltoniana de A.4 aplicada às 8 bandas.

	$i\|s\uparrow\rangle$	$\left\|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle$	$\left\|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$i\|s\downarrow\rangle$	$\left\|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle$	$\left\|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$
$i\|s\uparrow\rangle$	$\frac{\hbar^2k^2}{2m}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$P\hbar k_+$	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_-$	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_-$
$\left\|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$-\mathcal{E}_0+\frac{\hbar^2k^2}{2m}$	0	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_-$	0	0	0
$\left\|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle$	$-P\hbar k_-$	0	$-\mathcal{E}_0+\frac{\hbar^2k^2}{2m}$	0	0	0	0	0
$\left\|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	0	0	$-\mathcal{E}_0-\Delta+\frac{\hbar^2k^2}{2m}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_-$	0	0	0
$i\|s\downarrow\rangle$	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_+$	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_+$	$\frac{\hbar^2k^2}{2m}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$P\hbar k_-$	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$
$\left\|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	0	0	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z$	$-\mathcal{E}_0+\frac{\hbar^2k^2}{2m}$	0	0
$\left\|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle$	0	0	0	0	$P\hbar k_+$	0	$-\mathcal{E}_0+\frac{\hbar^2k^2}{2m}$	0
$\left\|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_+$	0	0	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k_z$	0	0	$-\mathcal{E}_0-\Delta+\frac{\hbar^2k^2}{2m}$

Nessa matriz, os termos substituídos para facilitar a escrita são:

$$k_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(k_x \pm ik_y\right) \quad \text{(A.5-1)}$$

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_{\Gamma_6} - \varepsilon_{\Gamma_8} \quad \text{(A.5-2)}$$

$$\Delta = \varepsilon_{G_8} - \varepsilon_{G_7} \quad \text{(A.5-3)}$$

$$P = \frac{-i}{m}\langle S|p_x|X\rangle = \frac{-i}{m}\langle S|p_y|Y\rangle = \frac{-i}{m}\langle S|p_z|Z\rangle \quad \text{(A.5-4)}$$

Devemos notar que os elementos de matriz contidos na equação A.5-4 são os elementos de transição que precisamos obter para inserir em A.2 e calcular a taxa de emissão / absorção de fótons. A matriz contida na tabela A.2 é facilmente diagonalizável se o eixo z do sistema de coordenadas for colocado na direção do vetor de onda. Neste caso, $k_z = k$ e $k_\pm = 0$. Essa escolha é possível porque o sistema é isotrópico e consequentemente os auto-estados e auto-funções dependem apenas do módulo de *k*. Dessa forma o problema se reduz a uma matriz 4x4 para ser diagonalizada. Para tal, o seguinte determinante deve ser nulo:

$$\begin{vmatrix} \lambda(k) & -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k & \lambda(k)+\varepsilon_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda(k)+\varepsilon_0 & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}P\hbar k & 0 & 0 & \lambda(k)+\varepsilon_0+\Delta \end{vmatrix} = 0 \qquad \text{(A.6)}$$

onde $\lambda(k) \equiv E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Essa matriz resulta em uma solução simples e um polinômio de grau três a ser resolvido:

$$\lambda^0_{\Gamma_8 hh}(k) = -\varepsilon_0 \qquad \text{(A.7-1)}$$

$$\lambda(\lambda+\varepsilon_0)(\lambda+\varepsilon_0+\Delta) = \hbar^2 P^2 k^2 \left(\lambda+\varepsilon_0+\frac{2}{3}\Delta\right) \qquad \text{(A.7-2)}$$

Com a equação A.7-1 obtemos a relação de dispersão para a banda de buracos pesados:

$$E_{hh} = -\varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}};\ \frac{1}{m_{hh}} = \frac{1}{m} \qquad \text{(A.8)}$$

Com a equação A.7-2 podemos obter as relações de dispersão para as outras três bandas. Isso é feito assumindo o coeficiente $\hbar^2 P^2 k^2$ muito pequeno de tal maneira que o lado direito na expressão A.7-2 é desprezível, permitindo obter a solução de menor ordem para as três bandas, ou seja, a solução no limite das bandas, onde *k=0*:

$$\lambda^0_{\Gamma_6}(k) = 0 \qquad \text{(A.9-1)}$$

$$\lambda^0_{\Gamma_8 lh}(k) = -\varepsilon_0 \qquad \text{(A.9-2)}$$

$$\lambda^0_{\Gamma_7}(k) = -\varepsilon_0 - \Delta \qquad \text{(A.9-3)}$$

Deve-se notar que todas as soluções apresentam bandas parabólicas com concavidade positiva. Além, a solução A.7-1, do buraco pesado, apresenta concavidade positiva e massa efetiva igual à do elétron livre. Estes problemas do modelo de Kane são resolvidos por Luttinger-Kohn, que considera a perturbação de bandas de energia mais distantes no método k.p [80]. De toda forma, o modelo de Kane prevê de forma surpreendentemente correta a banda de condução que é advinda da equação (A.8-2).

Voltando às equações A.9, a partir desse ponto a solução de primeira ordem para cada uma das bandas é obtida inserindo a solução de ordem zero na equação A.7-2 com exceção do

termo que se anularia com a substituição. Para a banda de condução, por exemplo, obtemos o autovalor:

$$\lambda_{\Gamma_6}^1 = \hbar^2 P^2 k^2 \frac{\left(\varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta\right)}{\varepsilon_0(\varepsilon_0 + \Delta)} \qquad \text{(A.10)}$$

Considerando que o autovalor obtido segue uma dispersão parabólica das bandas também, podemos isolar o fator P^2.

$$P^2 = \frac{\varepsilon_0(\varepsilon_0 + \Delta)}{m^*\left(\varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta\right)} \qquad \text{(A.11)}$$

Onde m^* é a massa efetiva. Nesse caso $m^* = m_c$, pois é a massa efetiva da banda de condução e vale:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_c} = \frac{1}{m} + \frac{4P^2}{3\varepsilon_0} + \frac{2P^2}{3(\varepsilon_0 + \Delta)} \qquad \text{(A.12)}$$

O mesmo procedimento pode ser feito para obter as relações de dispersão das bandas de buracos leve e de *split-off*.

A massa efetiva pode ser medida experimentalmente bem como a energia de acoplamento spin-órbita. Medindo também o *gap* de energia em $k = 0$, que será a diferença entre o topo da banda de valência e o topo da banda de condução, podemos,de forma indireta então, obter o valor de P^2. Considerando também a simetria do problema, nota-se que $P^2 = 3P_i^2$, onde i corresponde a cada uma das transições na equação A.5-4. Aplicando essas considerações e substituindo a expressão A.11 em A.3, chegamos à expressão final para a probabilidade por unidade de tempo de um fóton ser emitido ou absorvido:

$$C(E) = \left(\frac{2q^2h}{\varepsilon EV}\right)\frac{E_g(E_g + \Delta)}{3m^*\left(E_g + \frac{2}{3}\Delta\right)}\delta\left(E - E_{mj}\right) \qquad \text{(A.12)}$$

Apêndice B. Poços quânticos

Um poço quântico de largura *L* pode ser descrito por uma barreira de potencial finita, ilustrada na figura B.1, tal que:

$$V(z) = \begin{cases} V_0, & |z| > L/2 \quad \text{(B.1-1)} \\ 0, & |z| \leq L/2 \quad \text{(B.1-2)} \end{cases}$$

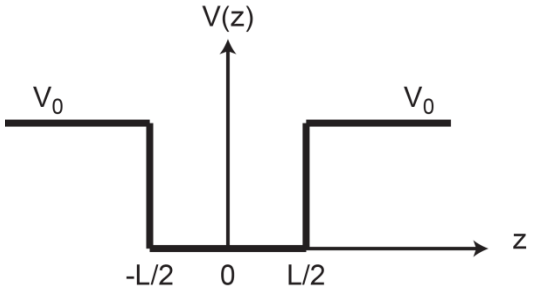


Fig. B.1: Um poço quântico de largura *L* formado por uma barreira de potencial finito V_0.

Para saber os auto-estados do poço, ou seja, os níveis de energia quantizados é preciso resolver a equação de Schroedinger [66]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2} + V(z)\right]\phi(z) = E\phi(z) \quad \text{(B.2)}$$

onde $\phi(z)$ é a função de onda do portador com massa efetiva m^* confinado no poço. A massa do portador no poço é m_w e na barreira m_b [45]. Considerando apenas os auto-estados ligados, com energia entre *0* e V_0, há dois tipos de soluções, ímpares e pares, as quais mostraremos a seguir.

Soluções pares

As soluções pares são do tipo oscilatórias dentro do poço e um decaimento exponencial nas barreiras, escritas da forma:

$$\phi(z) = \begin{cases} C_1 e^{-\alpha(|z|-L/2)}, & |z| \geq L/2 \quad \text{(B.3-1)} \\ C_2 \cos kz, & |z| < L/2 \quad \text{(B.3-2)} \end{cases}$$

Onde C_1 e C_2 são duas constantes e:

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m_b(V_0 - E)}}{\hbar} \quad \text{(B.4-1)}$$

$$k = \frac{\sqrt{2m_w E}}{\hbar} \quad \text{(B.4-2)}$$

Usando as condições de contorno na interface entre a barreira e o poço, onde a função de onda e sua derivada devem ser contínuas, obtemos uma condição de quantização expressa pela equação transcendental:

$$\alpha = \frac{m_b k}{m_w} \tan\left(k\frac{L}{2}\right) \quad \text{(B.5)}$$

Inserindo as expressões B.4 em B.5, pode-se obter os autovalores de energia quantizados.

Com as condições de contorno e com a condição de normalização da função de onda do estado ligado é possível calcular as constantes C_1 e C_2:

$$C_1 = C_2 \cos\left(k\frac{L}{2}\right) \quad \text{(B.6-1)}$$

$$C_2 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{L + \frac{2}{\alpha}\left(\cos\left(k\frac{L}{2}\right)^2 + \frac{m_b}{m_w}\sin\left(k\frac{L}{2}\right)^2\right)}} \quad \text{(B.6-2)}$$

Soluções ímpares

As soluções ímpares também são do tipo oscilatórias dentro do poço e um decaimento exponencial nas barreiras, escritas da forma:

$$\phi(z) = \begin{cases} C_1 e^{-\alpha(z - L/2)}, & z \geq L/2 \quad \text{(B.7-1)} \\ C_2 \sin kz, & |z| < L/2 \quad \text{(B.7-2)} \\ -C_1 e^{\alpha(z + L/2)}, & z \leq L/2 \quad \text{(B.7-3)} \end{cases}$$

Onde C_1 e C_2 são duas constantes, e α e k ainda são descritos pelas expressões em B.4:

Novamente usamos as condições de contorno para a função de onda na interface entre barreira e poço para obter a condição de quantização expressa pela equação transcendental:

$$\alpha = -\frac{m_b k}{m_w} \cos\left(k\frac{L}{2}\right) \quad \text{(B.8)}$$

Inserindo as expressões B.4 em B.8, obtemos os autovalores de energia quantizados.

Com as condições de contorno e com a condição de normalização da função de onda do estado ligado é possível calcular as constantes C_1 e C_2:

$$C_1 = C_2 \sin\left(k\frac{L}{2}\right) \qquad \text{(B.9-1)}$$

$$C_2 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{L + \frac{2}{\alpha}\left(\sin\left(k\frac{L}{2}\right)^2 + \frac{m_b}{m_w}\cos\left(k\frac{L}{2}\right)^2\right)}} \qquad \text{(B.9-2)}$$

Simulação dos níveis quantizados do poço quântico

O poço quântico que utilizamos nos nanolasers é de $In_{0.56}Ga_{0.44}As_{0.938}P_{0.062}$ formado por uma barreira de $In_{0.734}Ga_{0.266}As_{0.571}P_{0.429}$. A largura do poço é de 100 Å e da barreira é de 200 Å. Os valores utilizados na simulação encontram-se na tabela B1.

Tab. B1: Valores utilizados nas simulações do poço quântico.

Grandeza	Valor	Unidade
T	300	K
k_b	$1.38\text{x}10^{23}$	$m^2\ kg/s^2K$
c	$3\text{x}10^8$	m/s
n_{eff}	3.3	-
h	$6.63\text{x}10^{-34}$	m^2kg/s
q	$1.6\text{x}10^{19}$	C
E_g (QW)	0.761	eV
E_g (Barreira)	0.91	eV
Massa do elétron (m)	$9.31\text{x}10^{-31}$	Kg
m_c (QW)	0.0481*m	Kg
m_c (Barreira)	0.0608*m	Kg
m_{vh} (QW)	0.431*m	Kg
m_{vl} (QW)	0.0491*m	Kg
m_{vh} (Barreira)	0.511*m	Kg
m_{vl} (Barreira)	0.0785*m	Kg
Profundidade do poço	0.0745	eV

Para saber a profundidade dos poços, é necessário saber a descontinuidade da banda de condução e da banda de valência entre as duas ligas. No caso de InGaAsP crescido com parâmetro de rede casado com InP, a razão entre a descontinuidade da banda de condução e o *gap* de energia é [81]:

$$\frac{\Delta E_c}{E_g} \sim 0.4 \qquad \text{(B.10)}$$

Assim, para uma dada composição podemos calcular a descontinuidade na banda de condução e em consequência a descontinuidade que deve haver na banda de valência. Sabendo a descontinuidade das duas ligas de InGaAsP que formam o conjunto barreira e poço obtemos a profundidade dos poços de potencial, que são diferentes na banda de condução e na banda de valência, já que as descontinuidades são diferentes em cada banda.

No caso da banda de valência, existem duas bandas, uma para buracos leves e outra para buracos pesados. Assim, no cálculo dos níveis quantizados de energia devemos levar em conta que pode haver níveis quantizados para os buracos pesados diferentes dos para os buracos leves, já que suas massas efetivas são diferentes devido à relação de dispersão das bandas [45]. Entretanto, em nenhum momento consideramos a hibridização das bandas de valência [45].

A figura B2 mostra o diagrama de bandas com a banda de condução e a banda de valência com os respectivos níveis quantizados para cada uma delas.

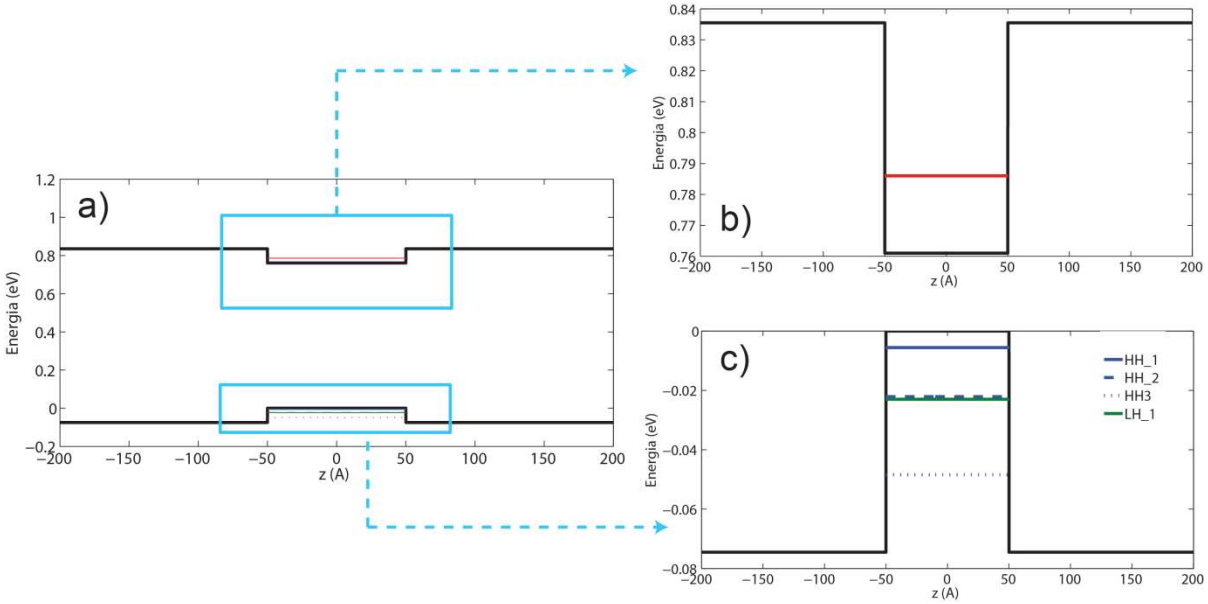


Fig. B.2: (a) Diagrama de bandas dos poços quânticos com os níveis quantizados de energia. Para melhor visualização mostramos um zoom do poço com os níveis quantizados na (b) banda de condução e (c) de valência. A legenda da figura (c) é referente aos buracos pesados (HH) e leves (LH), onde o número indica o estado quantizado.

Na figura B.2 (b) calculamos um nível de energia quantizado para elétrons na banda de condução, com energia 0.786 eV. Na banda de valência calculamos quatro níveis quantizados para buracos: três deles para buracos pesados (curvas azuis) com energias de -0.0056, -0.0221 e – 0.0484 eV, e um para buracos leves (curva verde) com energia de -0.0230 eV. Todos os níveis de energia são calculados considerando o topo da banda de valência na região do poço com energia de 0 eV.

Com os auto-estados é possível calcular a função de onda dos portadores em cada um dos níveis quantizados, conforme figura B.3.

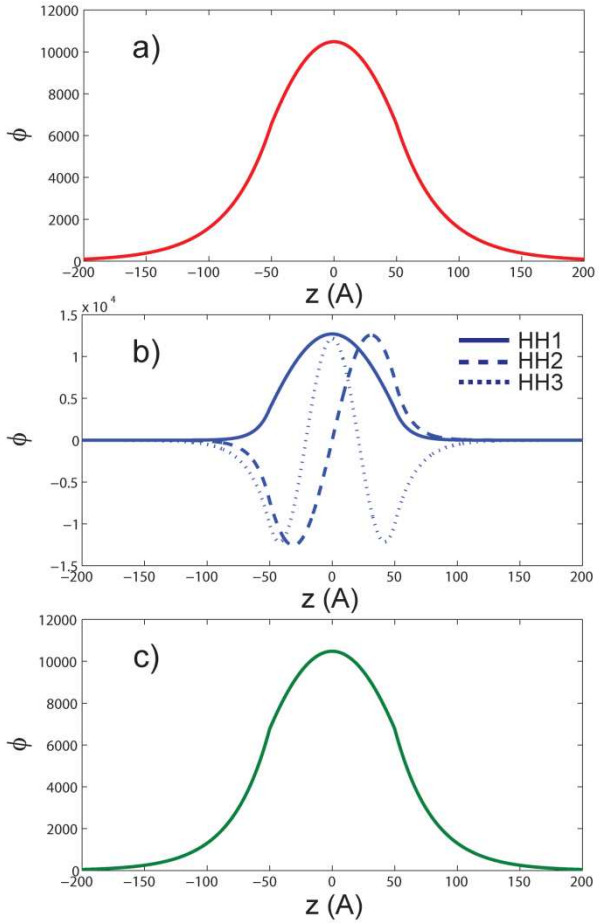


Fig. B.3: Funções de onda dos (a) elétrons, (b) buracos pesados e (c) buracos leves confinados nos poços quânticos. Em (b) os números na legenda indicam o nível do estado quantizado.

A figura B.3 mostra que o número de nós da função de onda é igual ao número do estado quantizado e que quanto maior a massa efetiva da partícula menor o decaimento exponencial da função de onda fora do poço. Isso é visto na figura B.3 (b) onde apenas uma pequena fração da função de onda encontra-se abaixo de -100 Å e acima de 100 Å, a largura do poço.

Como só há um nível quantizado na banda de condução e apenas podem ocorrer transições entre estados com os mesmos números quânticos, desconsideramos o segundo e o terceiro estado da banda de buracos pesados [45]. A massa do buraco leve é muito menor do que a do buraco pesado, portanto a densidade de estados eletrônicos no nível quantizado da banda de buracos leves é muito menor que no nível quantizado de buracos pesados. Por isso vamos desconsiderar a transição entre o nível da banda de condução e o primeiro nível de buracos leves da banda de valência.

Resta então apenas uma transição a ser levada em consideração, que é entre o nível quantizado na banda de condução e o primeiro nível quantizado da banda de valência, que é de buracos pesados. A energia dessa transição, dada pela diferença entre os dois níveis de energia quantizados é de 0.7916 eV, que corresponde a um comprimento de onda de 1566.5 nm.

Ainda é preciso calcular a integral de sobreposição das funções de onda dos elétrons quantizados e dos buracos pesados quantizados, para saber a sobreposição espacial dos mesmos. Isso é feito calculando a integral

$$I_{h1}^{e1} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{e1}^{*}(z)\phi_{h1}(z)dz \qquad \text{(B.11)}$$

Que para a transição em consideração resulta em um valor de 0.9439, ou seja, 94.39 % das duas funções de onda estão sobrepostas.

Com esses resultados em mãos é possível calcular a emissão espontânea e o ganho para um meio ativo com poços quânticos, conforme capítulo 3, no qual usamos todos os valores aqui calculados.

Apêndice C: Modelo de linha de transmissão para medidas de resistividade contato

Teoria

Para poder avaliar a resistência dos contatos para injeção de portadores nos nanolasers utilizaremos o modelo de linha de transmissão (TLM – *Transmission Line Model*, do inglês) [82]. Para aplicar esse modelo consideramos contatos metálicos de largura *W* dispostos sobre uma superfície semicondutora, conforme ilustrado no esquema da figura C.1.

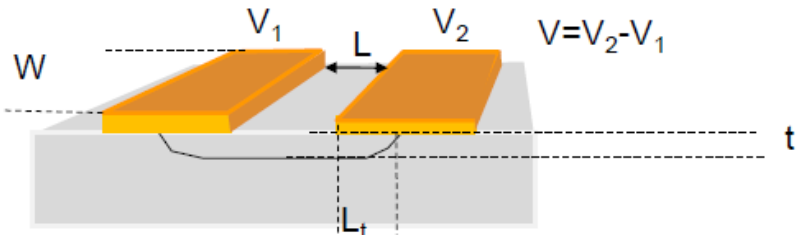


Fig. C.1: Ilustração de dois contatos metálicos (em dourado) de largura *W,* espaçados de uma distância *L* um do outro e dispostos sobre uma superfície semicondutora (em cinza).

A distância entre os contatos é *L* e há uma diferença de potencial $V = V_2 - V_1$ aplicada entre os dois contatos.

O comportamento eletrônico desse contato para injeção de corrente no semicondutor é descrito por um modelo de linha de transmissão. Esse modelo requer três considerações: a corrente entre a interface metal-semicondutora é somente na direção vertical; a espessura da camada de metal e de semicondutor é infinitamente pequena; e o contato deve ser ôhmico (ideal) [82].

Para aplicar esse modelo definimos uma resistência de folha de contato como:

$$\rho_f = \frac{\rho}{t} \qquad \text{(C-1)}$$

Essa resistência é dada em função da espessura da folha de condução, que é a região entre os dois contatos no qual há uma corrente de um contato a outro, e sua unidade é em ohms, mas para diferenciarmos de uma resistência comum, escrevemos em termos de *Ω/□*. Notemos que a resistência de folha é a resistência de uma camada de espessura t para um contato de largura *L* e comprimento *L*, ou seja, num quadrado, daí a notação. Assim, a resistência de uma folha condutora com largura *W*, espessura *t* e comprimento *L* é:

$$R = \rho_f \left(\frac{L}{W}\right) \quad \text{(C-2)}$$

Também definimos uma resistividade específica para o contato, ρ_c. Assim, se a resistividade específica de certo contato for conhecida, bem como sua área, obtemos a resistência de contato para uma área A como:

$$R_C = \frac{\rho_C}{A} \qquad \text{(C-3)}$$

O esquema que ilustra o modelo de linha de transmissão encontra-se na figura C.2.

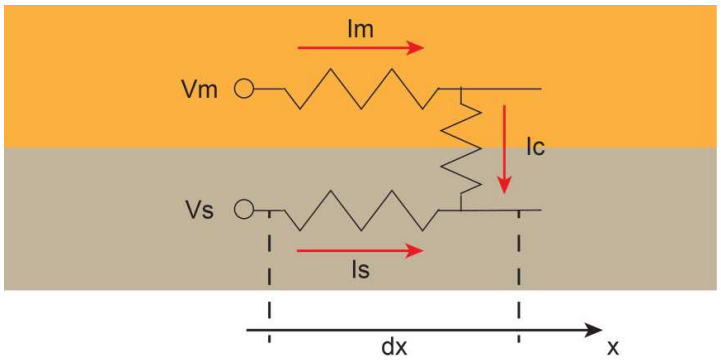


Fig. C.2: Esquema de uma linha de transmissão em uma interface metal (*M*) e semicondutor (*S*).

Consideramos duas camadas condutoras, M e S, formadas por um metal e por um semicondutor com alta dopagem de impurezas (~ $1\text{x}10^{19}\text{cm}^{-3}$) respectivamente. A camada metálica apresenta uma resistência de folha ρ_m e a camada semicondutora uma resistência de folha ρ_s. Consideramos que há uma resistividade específica do contato, ρ_c, entre as duas camadas.

Assumindo que a camada metálica está sob um potencial V_M e que a camada semicondutora está sob um potencial V_S, podemos escrever a corrente ao longo de cada uma dessas duas camadas como:

$$I_M = -\frac{V_M(x+dx) - V_M(x)}{R_M} = -\frac{dV_M(x)}{\rho_M\left(dx/W\right)} = -\frac{W}{\rho_M}\frac{dV_M(x)}{dx} \qquad \text{(C-4.1)}$$

$$I_S = -\frac{V_S(x+dx) - V_S(x)}{R_S} = -\frac{dV_S(x)}{\rho_S\left(dx/W\right)} = -\frac{W}{\rho_S}\frac{dV_S(x)}{dx} \qquad \text{(C-4.2)}$$

E considerando o circuito da figura C.2, a corrente injetada através do contato será:

$$I_C(x) = I_M(x+dx) - I_M(x) = -[I_S(x+dx) - I_S(x)] = \frac{W dx[V_S(x) - V_M(x)]}{\rho_C} \qquad \text{(C-5)}$$

O que significa que a redução da corrente na camada metálica resulta num aumento da corrente na camada semicondutora através de um fluxo de cargas pela interface. A equação C-5 também pode ser vista da seguinte maneira:

$$\frac{dI_M(x)}{dx} = -\frac{dI_S(x)}{dx} = \frac{W[V_S(x)-V_M(x)]}{\rho_C} \quad \text{(C-6)}$$

Para saber a corrente em cada camada é necessário saber o potencial de cada uma delas. O potencial pode ser calculado derivando as equações C-4 e inserindo C-6 em C-4:

$$\frac{d^2V_s(x)}{dx^2} - \frac{\rho_S}{\rho_C}[V_S(x) - V_M(x)] = 0 \quad \text{(C-7.1)}$$

$$\frac{d^2V_M(x)}{dx^2} + \frac{\rho_M}{\rho_C}[V_S(x) - V_M(x)] = 0 \quad \text{(C-7.2)}$$

Subtraindo as duas equações e realizando a substituição $\xi(x) = V_S(x) - V_M(x)$, obtemos a equação:

$$\frac{d^2\xi(x)}{dx^2} - \frac{\rho_M+\rho_S}{\rho_C}\xi(x) = 0 \quad \text{(C-8)}$$

Cuja solução é uma combinação linear de duas funções exponenciais:

$$\xi(x) = V_S(x) - V_M(x) = Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x};\ \beta \equiv \sqrt{\frac{\rho_M+\rho_S}{\rho_C}} \quad \text{(C-9)}$$

Substituindo a expressão C-9 nas equações C-7 e derivando a expressão duas vezes obtemos:

$$V_S(x) = \frac{\rho_S}{\rho_M + \rho_S}\left(Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x}\right) + Cx + D \quad \text{(C-10.1)}$$

$$V_M(x) = \frac{\rho_M}{\rho_M + \rho_S}\left(Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x}\right) + Cx + D \quad \text{(C-10.2)}$$

Com as respectivas correntes em cada camada:

$$I_S(x) = -\frac{W}{\rho_S}\left[\frac{\beta\rho_S}{\rho_S + \rho_M}\left(Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x}\right) + C\right] \quad \text{(C-11.1)}$$

$$I_M(x) = -\frac{W}{\rho_M}\left[\frac{\beta\rho_M}{\rho_S + \rho_M}\left(Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x}\right) + C\right] \quad \text{(C-11.2)}$$

Agora que temos as equações para as tensões e as correntes nas respectivas camadas, podemos aplicar algumas condições de contorno. Considerando que a camada metálica é um

condutor perfeito, sua resistência é nula ($\rho_m = R_m = 0$) e V_S deve ser uma equipotencial. Neste caso, analisando a equação C-10.1, C deve ser nulo e $D = V_S$. Obtemos então 4 novas equações:

$$V_S(x) = (Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}) + V_S;\ \alpha = \sqrt{\frac{\rho_S}{\rho_C}} \quad \text{(C-12.1)}$$

$$V_M(x) = V_S \quad \text{(C-12.2)}$$

$$I_S(x) = -\frac{W\alpha}{\rho_S}(Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x}) \quad \text{(C-12.3)}$$

$$I_M(x) = 0 \quad \text{(C-12.4)}$$

Como há uma resistência na camada semicondutora, a corrente deve ser dissipada ao longo de sua propagação e jamais será infinita, portanto o coeficiente A também deve ser nulo. V_S é uma equipotencial que depende do referencial. Como o que interessa é a diferença de potencial entre as camadas M e S, seu valor é indiferente neste modelo. Assim, apenas duas equações nos interessam agora, a tensão e a corrente na camada semicondutora:

$$V_S(x) = Be^{-\alpha x} \quad \text{(C-13.1)}$$

$$I_S(x) = -\frac{W\alpha}{\rho_S}Be^{-\alpha x} \quad \text{(C-13.2)}$$

Analisando a equação C-13.2, e considerando o comprimento do contato é muito maior do que o valor de $1/\alpha$, é plausível assumir que a corrente se estende apenas por um comprimento $L_T = 1/\alpha$. Assim, podemos escrever a resistência entre os dois contatos com um termo que depende da resistência entre os contatos de fato e outro termo que depende das duas resistências de folha, uma para cada contato:

$$R(L) = \frac{\rho_S L}{W} + 2\frac{\rho_C}{WL_T} = \frac{\rho_S L}{W} + 2\frac{L_T\rho_S}{W} \quad \text{(C.14)}$$

Agora, através da medida da resistência entre contatos metálicos quadrados de lado W, espaçados de uma distância L variável um do outro, podemos obter uma curva como a da figura C.3.

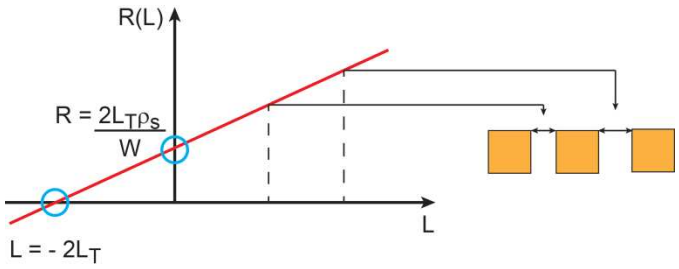


Fig. C.3: Ilustração de uma curva da resistência medida entre dois contatos de lado W distante L um do outro.

Com a reta obtida na figura C.3 para uma sequência de contatos de lado W e diferentes espaçamentos L entre um e outro, podemos realizar um interpolação do tipo $R = aL + b$, e obter os valores das resistividades de contato e de folha, ρ_c e ρ_s, respectivamente:

$$\rho_C = \frac{b^2 W}{4a} \qquad \text{(C.15-1)}$$

$$\rho_S = aW \qquad \text{(C.15-2)}$$

Este é o método TLM para medidas de resistividade de contatos ôhmicos o qual utilizaremos para otimizar nossos contatos a serem utilizados nos nanolasers.

Parte Experimental

Para realizar o experimento de medida da resistividade dos contatos ôhmicos utilizamos um *wafer* com uma camada de 1 μm de InGaAsP (dopagem tipo *p* de $2x10^{19}$ cm^{-3}) sobre um substrato de InP isolante. Cortamos o *wafer* de 4 polegadas em diversos pedaços de 10 x 12 mm. Cada um dos pedaços é colocado em um banho de acetona dentro de um ultrassom durante 5 minutos. A acetona é então substituída por metanol e as amostras voltam para esse banho com ultrassom por mais 5 min.. Enxaguamos as amostras com álcool isopropílico (IPA) seguido de água deionizada. Por último as amostras são colocadas em uma placa quente a 200 °C durante 10 minutos para desidratação.

Espalhamos sobre a amostra o fotorresiste S1813 com o *spinner* a 4000 rpm/s durante 45 s com uma aceleração de 1000 rpm/s. Secamos o fotorresiste colocando a amostra sobre uma placa quente a 115 ºC durante 60 s. Utilizamos então uma fotoalinhadora (Karl Suss MA6) para expor uma padrão de diversos quadrados de 100 x 100 μm espaçados de um comprimento *L* variável entre os quadrados, conforme a proposta do método de linha de transmissão descrito acima. A região dos quadrados ficará sem proteção do fotorresiste para que o metal seja depositado. A amostra foi exposta à radiação ultravioleta (UV) por 15 s e depois foi colocada em um revelador, MF321, durante 30 s. Após a revelação enxaguamos com água deionizada. Para remover qualquer resto de fotorresiste sobre as regiões que deveriam estar expostas colocamos a amostra em um plasma barril de oxigênio (100 sccm de O_2, 200 mTorr, 200 W, durante 20 s). Colocamos a amostra dentro da câmara da evaporadora de metais por feixe de elétrons e fazemos vácuo até a pressão base atingir $7.0x10^{-7}$ Torr. Depositamos filmes de Ti / Pd / Au (200 Å / 200 Å/ 1500 Å), a uma taxa de 0.5, 0.5 e 1.5 Å/s respectivamente. A pressão na câmara em cada deposição foi de $1.7x10^{-7}$, $1.8x10^{-7}$ e $6.0x10^{-7}$ Torr, respectivamente. O *lift-off* foi realizado em

um banho de acetona por uma hora e o banho foi colocado por 5 s em ultrassom para remover rebarbas do metal nas regiões na qual ele deveria ter sido removido. Uma das sequências dos contatos feitos para aplicarmos o método de obter a resistência específica encontra-se na foto da figura C.4.

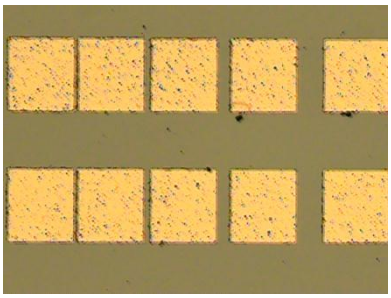


Fig. C.4: Foto obtida com um microscópio óptico dos contatos de ouro de 100 x 100 μm espaçados de uma distância variável um do outro.

Uma busca extensiva na literatura mostra que não há muita liberdade para variarmos as espessuras dessas camadas [83]. O ouro sobre os outros metais é para o contato com a ponta de prova. Com o tratamento térmico o paládio penetra na amostra e forma uma liga intermetálica na interface com o semicondutor. O titânio é o metal que além promover uma excelente aderência dos metais ao semicondutor, também limita a difusão de paládio sobre o semicondutor. Assim, essencialmente temos que otimizar a rampa de temperatura, a temperatura do tratamento térmico e o tempo do tratamento para a menor resistividade específica do contato.

Realizamos os tratamentos térmicos em um forno para tratamento térmico rápido (RTA – Rapid Thermal Annealing, do inglês) com um fluxo constante de 2 L/min. de N_2, um gás inerte. Para cada amostra utilizamos uma temperatura para o tratamento térmico e um tempo diferente. Variamos a temperatura de 350 a 450 ºC em intervalos de 25 ºC. Realizamos os tratamentos térmicos durante 20, 35 e 50 s. Em todos os casos a rampa de temperatura foi de 25 ºC/s.

Utilizamos uma estação de pontas para aplicar uma tensão entre os diferentes contatos e obter diversas curvas *IxV*'s. Como os contatos são ôhmicos, é possível obter a resistência entre os contatos em função da distância entre eles através do coeficiente angular das curvas. Uma curva *IxV* característica é mostrada na figura C.5 (a).

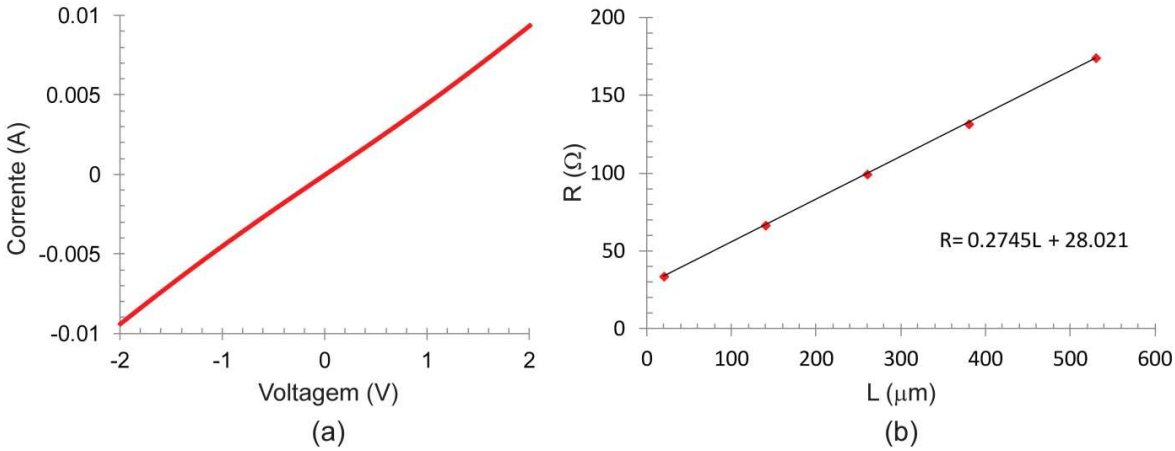


Fig. C.5: Curvas (a) da corrente em função da diferença de potencial aplicada entre os contatos espaçados de 550 μm e (b) da resistência em função da distância entre os contatos.

A curva apresenta um comportamento praticamente linear com pequena variação de seu coeficiente angular para tensões pequenas, abaixo de 1 V. Calculando a resistência para as diversas curvas, podemos obter a resistência em função da distância dos contatos para uma condição de tratamento térmico rápido específica, conforme mostra a figura C.5 (b), no qual o tratamento térmico foi de 400 ºC durante 35 s.

Pelo método descrito na parte teórica desse apêndice podemos obter a resistência específica do contato para as diversas condições de temperatura e duração do tratamento térmico rápido. Os resultados encontram-se na figura C.6.

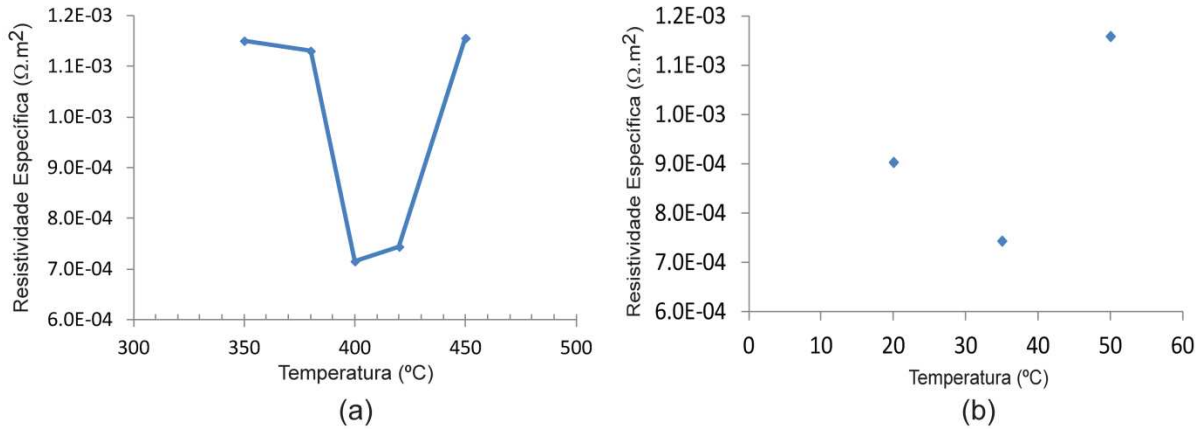


Fig. C.6: As curvas mostram a variação da resistividade específica do contato em função (a) da temperatura do tratamento térmico rápido e (b) da duração do tratamento térmico rápido a uma temperatura de 400 ºC.

A curva da figura C.6 (a) mostra a variação da resistividade específica do contato em função da temperatura do tratamento térmico. A melhor temperatura é de 400 ºC, que possibilita a menor resistência para injeção de corrente. Se variarmos a duração desse tratamento térmico

para a mesma temperatura de 400 ºC obtemos a curva da figura C.6 (b), que mostra a variação da resistência específica do contato em função da temperatura do tratamento térmico rápido a 400 ºC. Observamos que um tempo de 35 s nos permite obter o contato mais eficiente para injeção de corrente. A melhor resistividade específica que obtemos foi de ρ_C = 7.14x10^{-4} Ω.cm^2. O melhor resultado encontrado na literatura para essa mesma liga é de ρ_C = 9.09x10^{-6} Ω.cm^2 [56]. Esse valor é duas ordens de grandeza menor e as condições do tratamento térmico são muito próximas às que usamos. Consideramos nossos resultados experimentais nas simulações.

Referências

[1] C. Z. Ning, “Semiconductor nanolasers,” Phys. Status Solidi B **247**, 774–788 (2010).

[2] Martin T. Hill, "Status and prospects for metallic and plasmonic nano-lasers" J. Opt. Soc. Am. B **27**, B36-B44 (2010)

[3] G. E. Moore, Cramming *More* Components onto Integrated Circuits, Electronics **38**, 8 (1965).

[4] G. Roelkens, L. Liu, D. Liang, R. Jones, A. W. Fang, B. Koch, and J. E. Bowers, “III-V/silicon photonics for on-chip and intra-chip optical interconnects,” Laser Photon. Rev. **4**(6), 751–779 (2010).

[5] Noda, S. “Seeking the ultimate nanolaser”, Science **314**, 260–261 (2006).

[6] S. Kita, S. Hachuda, S. Otsuka, T. Endo, Y. Imai, Y. Nishijima, H. Misawa, and T. Baba, “Super-sensitivity in label-free protein sensing using a nanoslot nanolaser,” Opt. Express **19**, 17683–17690 (2011).

[7] K. J. Vahala, Optical Microcavities, Nature **424**, 839 (2003).

[8] E. Hecht, *Optics*, 2nd ed., Addison-Wesley, Reading, Mass., 1987.

[9] A. E. Siegman and A. Siegman, *An Introduction to Lasers and Masers.* McGraw-Hill New York, 1971

[10] S. A. Maier, *Plasmonics: Fundamentals and Applications* (Springer, 2007).

[11] R. F. Oulton, V. J. Sorger, T. Zentgraf, R.-M. Ma, C. Gladden, L. Dai, G. Bartal, and X. Zhang, “Plasmon lasers at deep subwavelength scale,” Nature **461**(7264), 629–632 (2009).

[12] M. Khajavikhan, A. Simic, M. Katz, J. H. Lee, B. Slutsky, A. Mizrahi, V. Lomakin, and Y. Fainman, “Thresholdless nanoscale coaxial lasers,” Nature **482**(7384), 204–207 (2012).

[13] M. A. Noginov, G. Zhu, A. M. Belgrave, R. Bakker, V. M. Shalaev, E. E. Narimanov, S. Stout, E. Herz, T. Suteewong, and U. Wiesner, “Demonstration of a spaser-based nanolaser,” Nature **460**(7259), 1110–1112 (2009).

[14] D. Bajoni, “Polariton lasers. Hybrid light-matter lasers without inversion,” J. Phys. D **45**, 313001 (2012).

[15] A. Matsudaira, C. Y. Lu, M. Zhang, S. L. Chuang, E. Stock and D. Bimberg, "Cavity-volume scaling law of quantum-dot metal-cavity surface-emitting microlasers," IEEE Photon. J. **4**(4), 1103-1114, (2012).

[16] J. M. Gérard and B. Gayral, "Strong Purcell effect for InAs quantum boxes in three-dimensional solid-state microcavities," Lightwave Technology, Journal of, **17**, pp. 2089-2095 (1999).

[17] B. Ellis, M. A. Mayer, G. Shambat, T. Sarmiento, J. Harris, E. E. Haller, and J. Vučković, “Ultralow-threshold electrically pumped quantum-dot photonic-crystal nanocavity laser,” Nat. Photon. **5**, 297–300 (2011).

[18] A. H. Chin, S. Vaddiraju, A. V. Maslov, C. Z. Ning, M. K. Sunkara, and M. Meyyappan, “Near-infrared semiconductor subwavelength-wire lasers,” Appl. Phys. Lett. **88**(16), 163115 (2006).

[19] J. H. Lee, M. Khajavikhan, A. Simic, Q. Gu, O. Bondarenko, B. Slutsky, M. P. Nezhad and Y. Fainman, “Electrically pumped sub-wavelength metallo dielectric pedestal pillar lasers”, Opt. Express **19**(22), 21524-21531 (2011).

[20] E. Yablonovitch, "Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics," Phys. Rev. Lett. **58**, 2059–2063 (1987).

[21] H. Soda, K. Iga, C. Kitahara and Y. Suematsu, “GaInAsP/InP Surface Emitting Injection Lasers”, Jpn. J. Appl. Phys. **18,** 2329 (1979).

[22] J. L. Jewell, S. L. McCall, Y. H. Lee, A. Scherer, A. C. Gossard, and J. H. English, "Lasing characteristics of GaAs microresonators," Appl. Phys. Lett. **54**, 1400-1402 (1989).

[23] F. Peters, M. Peters, D. Young, J. Scott, B. Thibeault, S. Corzine and L. Coldren, "High-power vertical-cavity surface-emitting lasers". Electron. Lett. **29** (2), 200–201 (1993).

[24] G.P. Agrawal and N.K. Dutta, *Semiconductor Lasers*, Second Edition, Van Nostrand Reinhold, New York (1993).

[25] G. Björk and Y. Yamamoto, “Analysis of semiconductor microcavity lasers using rate equations,” IEEE J. Quantum Electron. **27**, 2386–2396 (1991).

[26] O. Painter, R. K. Lee, A. Scherer, A. Yariv, J. D. O’Brien, P. D. Dapkus, and I. Kim, “Two-dimensional photonic band-gap defect mode laser,” Science **284**(5421), 1819–1821 (1999).

[27] M. P. Nezhad, A. Simic, O. Bondarenko, B. Slutsky, A. Mizrahi, L. Feng, V. Lomakin, and Y. Fainman, “Room-temperature subwavelength metallo-dielectric lasers,” Nat. Photonics **4**(6), 395–399 (2010).

[28] M. T. Hill, M. Marell, E. S. P. Leong, B. Smalbrugge, Y. Zhu, M. Sun, P. J. van Veldhoven, E. J. Geluk, F. Karouta, Y. S. Oei, R. Nötzel, C. Z. Ning, and M. K. Smit, “Lasing in metal-insulator-metal sub-wavelength plasmonic waveguides,” Opt. Express **17**(13), 11107–11112 (2009).

[29] K. Ding, M. T. Hill, Z. C. Liu, L. J. Yin, P. J. van Veldhoven, and C. Z. Ning, “Record performance of electrical injection sub-wavelength metallic-cavity semiconductor lasers at room temperature”, Opt. Express **21**(4), 4728-4733 (2013).

[30] Q. Ding, A. Mizrahi, Y. Fainman, and V. Lomakin, “Dielectric shielded nanoscale patch laser resonators,” Opt. Lett. **36**, 10 (2011).

[31] W. Rideout, W. F. Sharfin, E. S. Koteles, M. O. Vassell, and B. Elman, “Well-barrier hole burning in quantum well lasers,” IEEE Photon. Technol. Lett. **3**, 784-786 (1991).

[32] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 2nd ed. (John Wiley & Sons, Inc., 1975).

[33] COMSOL Multiphysics, 3.5a, Commercial FEM Solver, www.comsol.com

[34] C. Pollock and M. Lipson, *Integrated Photonics* (Kluwer Academic, 2003).

[35] M. Heiblum and J. H. Harris, "Analysis of curved optical waveguides by conformal transformation," IEEE J. Quantum Electron. **QE-11**, 75-83 (1975).

[36] N. C. Frateschi and A. F. J. Levi, “The spectrum of microdisk lasers,” J. Appl. Phys. **80**, 644–653 (1996).

[37] Palik, E. D. Handbook of Optical Constants of Solids (Academic Press, 1997).

[38] A. Mizrahi, V. Lomakin, B. A. Slutsky, M. P. Nezhad, L. Feng, and Y. Fainman, “Low threshold gain metal coated laser nanoresonators,” Opt. Lett. **33**(11), 1261–1263 (2008).

[39] J. Heebner, R. Grover, and T. Ibrahim, *Optical Microresonators: Theory, Fabrication, and Applications* (Springer, 2008).

[40] G. B. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists* (Harcourt/Academic, 2001).

[41] Lord Rayleigh, "The problem of the whispering gallery", Philos. Mag. **20**, 1001 (1910).

[42] A. Lakhani, M. C. Wu, X. Zhang, and .i Yablonovitch, Metal-optic and Plasmonic Semiconductor-based Nanolasers, Technical Report No. UCB/EECS-2012-62, http://www.eecs.berkeley.edu/Pubs/TechRpts/2012/EECS-2012-62.html, May 7 (2012).

[43] J. Hu and C. R. Menyuk, "Understanding leaky modes: slab waveguide revisited," Adv. Opt. Photon. **1**(1), 58–106 (2009).

[44] Kam. Y. Lau, "Dynamics of quantum well lasers", in *Quantum Well Lasers,* P. S. Zory ed., Quantum Well Lasers, (Academic, San Diego, Cal., 1993).

[45] S. L. Chuang, *Physics of Optoelectronic Devices* (Wiley-Interscience, 1995), Chap. 9.

[46] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1985).

[47] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed. (J. Wiley & Sons, 2005).

[48] Q. Gu, B. Slutsky, F. Vallini, J. S. T. Smalley, M. P. Nezhad, N. C. Frateschi, and Y. Fainman, "Purcell effect in sub-wavelength semiconductor lasers," Opt. Express **21**, 15603-15617 (2013).

[49] L. A. Coldren, S. W. Corzine and M. L. Mashanovitch, *Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits.* (Wiley, 2012), Chap. 5.

[50] G. D. Mahn, *Many Particle Physics,* Plenum, New York, 1986

[51] M. Rosenzweig, M. Möhrle, H. Düser, and H. Venghaus, "Threshold current analysis of InGaAs-InGaAsP multi-quantum well separate-confinement lasers," IEEE J. Quantum Electron. **27**, 1804–1811 (1991).

[52] S. Adachi, "Optical dispersion relations for GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb, $Al_xGa_{1-x}As$, and $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$", J. Appl. Phys. **66**, 6030, 1989.

[53] Silvaco Inc, (http://www.silvaco.com/products/device_simulation/atlas.html) (2013).

[54] Zh. I. Alferov, V. M. Andreev, D. Z. Garbuzov, Yu. V. Zhilyaev, E. P. Morozov, E. L. Portnoi, and V. G. Trofim, "Investigation of the influence of the AlAs-GaAs heterostructure parameters on the laser threshold current and the realization of continuous emission at room temperature," Sov. Phys. Semiconductors, **4**, 1573–1575, 1971.

[55] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd ed. (Wiley, 1981).

[56] E. F. Chor, W. K. Chong, and C. H. Heng, "Alternative (Pd,Ti,Au) contacts to (Pt,Ti,Au) contacts for $In_{0.53}Ga_{0.47}As$", J. Appl. Phys. **84**, 2977, 1998.

[57] F. Vallini, Q. Gu, M. Kats, Y. Fainman, and N. C. Frateschi, "Carrier saturation in multiple quantum well metallo-dielectric semiconductor nanolaser: Is bulk material a better choice for gain media?," Opt. Express **21**, 25985-25998 (2013).

[58] M. T. Hill, Y.-S. Oei, B. Smalbrugge, Y. Zhu, T. de Vries, P. J. van Veldhoven, F. W. M. van Otten, T. J. Eijkemans, J. P. Turkiewicz, H. de Waardt, E. J. Geluk, S.-H. Kwon, Y.-H. Lee, R. Nötzel, and M. K. Smit, "Lasing in metallic-coated nanocavities," Nat. Photonics **1**(10), 589–594 (2007).

[59] van der Ziel, J.P., Dingle, R., Miller, R.C., Wiegmann, W. and Nordland, W.A., "Laser oscillations from quantum states in very thin GaAs-$Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ multilayer structures", Appl. Phys. Letts **26**, 463 (1975).

[60] Dupuis, R.D., Dapkus, P.D., Holonyak, N., Jr., Rezek, E.A., and Chin, R., "Room temperature operation of quantum-well $Ga_{1-x}Al_xAs$-GaAs laser diodes grown by metalorganic chemical vapor deposition", Appl. Phys. Lett. **32**, 295-297 (1978).

[61] P. W. A. McIlroy, K. Kurobe, and Y. Uematsu, "Analysis and application of theoretical gain curves to the design of multi-quantum-well lasers", IEEE J. Quantum Electron. **QE-21**, 1958 (1985).

[62] A. R. Reisinger, P. S. Zory, and R. G. Waters, "Cavity length dependence of the threshold behavior in thin quantum well semiconductor lasers," IEEE J. Quantum Electron. **QE-23**, 993–999 (1987).

[63] A. Sugimura, "Threshold currents for AlGaAs quantum well lasers," IEEE **J.** Quantum Electron., **QE-20**, 336-343 (1984).

[64] R. Olshansky, C. B. Su, J. Manning, and W. Powazinik, "Measurements of radiative recombination rates in InGaAsP and AlGaAs light sources," IEEE J. Quantum Electron., **QE-20**, 838-854 (1984).

[65] N. K. Dutta, "Calculation of Auger rates in a quantum well structure and its application to InGaAsP quantum well lasers," J. Appl. Phys., **54**, 1236-1245 (1983).

[66] J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern quantum mechanics* (Addison-Wesley, 2007).

[67] V. L. Rideout, "A review of the theory and technology for ohmic contacts to group III-V compound semiconductors", Solid-State Electronics, **18**, 541-550 (1975).

[68] M. P. Nezhad, O. Bondarenko, M. Khajavikhan, A. Simic, and Y. Fainman, "Etch-free low loss silicon waveguides using hydrogen silsesquioxane oxidation masks," Opt. Express **19**, 18827–18832 (2011)

[69] E. Inamura, Y. Miyamoto, S. Tamura, T. Takasugi and K. Furuya, "Wet chemical etching for ultrafine periodic structure: rectangular InP corrugations of 70 nm pitch and 100 nm depth," Japanese Journal of Applied Physics **28**, pp. 2193-2196, 1989.

[70] Q. Gu, B. Wingad, F. Vallini, B. Slutsky, M. Katz, M. P. Nezhad, N. C. Frateschi, and Y. Fainman, "Electrically Pumped Metallo-Dielectric Pedestal Nanolasers," in *2013 Conference on Lasers and Electro-Optics Pacific Rim*, (Optical Society of America, 2013), paper WI4_2.

[71] W. Chen, M. D. Thoreson, S. Ishii, A. V. Kildishev, and V. M. Shalaev, "Ultra-thin ultra-smooth and low-loss silver films on a germanium wetting layer," Opt. Express **18**(5), 5124–5134 (2010).

[72] C. H. Henry, "Theory of the linewidth of semiconductor lasers," IEEE J. Quantum Electron. **18**, 259-264 (1982).

[73] A. L. Schawlow and C. H. Townes, "Infrared and optical masers", Phys. Rev. **112**(6), 1940 (1958).

[74] M. Lax, "Classical Noise Noise in Self-Sustained Oscillators", Phys. Rev. **160**(2), 290 (1967).

[75] M. Fujita, A. Sakai, and T. Baba, "Ultrasmall and ultralow threshold GaInAsP-InP microdisk injection lasers: design, fabrication, lasing characteristics, and spontaneous emission factor," IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. **5**(3), 673–681 (1999).

[76] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids* (Wiley, New York, 1963).

[77] E. O. Kane, "Band structure of indium antimonide," J. Phys. Chem. Solids **1**, 249–261 (1957).

[78] C. Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics (Hermann, 1991).

[79] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976)

[80] J. Luttinger and W. Kohn, "Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields," Phys. Rev. **97**(4), 869–883 (1955).

[81] J. Minch, S. H. Park, T. Keating, and S. L. Chuang, "Theory and experiment of $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ and $In_{1-x-y}Ga_xAl_yAs$ long-wavelength strained quantum-well lasers," IEEE J. Quantum Electron. **35**, 771-782 (1999).

[82] D. B. Scott, W. R. Hunter, and H. Shichijo, "A Transmission Line Model for Silicided Diffusion: Impact on the Performance of VLSI Circuits", IEEE Journal of Solid-State Circuits, **17**(2), 28l-29l (1982).

[83] D. G. Ivey, "Platinum Metals in Ohmic Contacts to III-V Semiconductors", Platinum Metals Rev. **43**(I) 2-12 (1999).

Trabalhos Publicados Pelo Autor

Revistas

1. Barea L. A. M., Vallini F., Jarschel P.F. S., and Frateschi N. C., "Silicon Technology Compatible Photonic Molecules For Compact Optical". Appl. Phys. Lett., v. 103, p. 201102, 2013.

2. Barea L. A. M., Vallini F., de Rezende G. F. M., and Frateschi N. C., "Spectral Engineering with CMOS Compatible SOI Photonic Molecules", Photon. J., to be published 2013.

3. Vallini F., Gu Q., Kats M., Fainman Y., and Frateschi N. C., "Carrier saturation in multiple quantum well metallo-dielectric semiconductor nanolaser: Is bulk material a better choice for gain media?". Optics Express, v. 21, p. 25985, 2013.

4. Gu Q., Slutsky B., Vallini F., Smalley J. S. T., Nezhad M. P., Frateschi N. C. and Fainman Y., "Purcell effect in sub-wavelength semiconductor lasers". Optics Express, v. 21, p. 15603, 2013.

5. Fegadolli W. S., Vargas G., Wang X., Valini F., Barea L. A. M., Oliveira, J. E. B., Frateschi N. C., Scherer A., Almeida V. R., and Panepucci R. R., "Reconfigurable silicon thermo-optical ring resonator switch based on Vernier effect control". Optics Express, v. 20, p. 14722, 2012.

6. Figueira D. S. L., Barea L. A. M., Vallini F., Jarschel P. F., Lang R., and Frateschi N. C., "a-SiOx<Er> active photonic crystal resonator membrane fabricated by focused Ga^+ ion beam". Optics Express, v. 20, p. 18772, 2012.

7. Vallini F., Barea L. M. A., Reis E. F., Von Zuben A. A. G., and Frateschi N. C., "Induced Optical Losses in Optoelectronic Devices due Focused Ion Beam". Journal of Integrated Circuits and Systems (Ed. Português), v. 7, p. 87-91, 2012.

8. Lang, R., Figueira D.S.L., Vallini F., and Frateschi, N. C., "Highly Luminescent a-SiOx<Er>/SiO2/Si Multilayer Structure". IEEE Photonics J., v. 4, p. 1-1, 2012.

9. da Silva Filho A., Barea L. A. M., Vallini F., Von Zuben A. A. G., and Frateschi N. C., "Mode pattern dependence on the eccentricity of microstadium resonators". Journal of Applied Physics, v. 107, p. 083107, 2010.

10. Vallini F., Figueira D. S. L., Jarschel P. F., Barea L. A. M., Von Zuben A. A. G., and Frateschi N. C., "Effects of Ga^+ milling on InGaAsP quantum well laser with mirrors milled by focused ion beam". Journal of Vacuum Science & Technology. B, Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement and Phenomena, v. 27, p. L25, 2009.

11. Barea L. A. M., Vallini F., Vaz A. R., Mialichi J. R., and Frateschi N. C., "Low-roughness active microdisk resonators fabricated by focused ion beam". Journal of Vacuum Science & Technology. B, Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement and Phenomena, v. 27, p. 2979, 2009.

Conferências

1. Barea L. A. M., Vallini F., Rezende G. F. M., and Frateschi N. C., "Compact Photonic Molecules Based on Internally Coupled Microring Resonators". In: Frontiers in Optics, 2013, Orlando. Frontiers in Optics 2013. Washington: OSA, 2013. p. FTu3A.18.

2. Barea L. A. M., Vallini F., Alegre T. P. M., Wiederhecker G. S., Frateschi N. C., "Enhanced Q with Internally Coupled Microring Resonators". In: CLEO: 2013, 2013, San Jose. SA Technical Digest (online) (Optical Society of America, 2013), 2013.

3. Gu Q., Wingad B., Vallini F., Slutsky B., Kats M., Nezhad M. P., Frateschi N. C., and Fainman Y., "Electrically Pumped Metallo-Dielectric Pedestal Nanolasers". In: Conference on Lasers and Electro-Optics Pacific Rim (CLEO-PR), 2013. Conference on Lasers and Electro-Optics Pacific Rim (CLEO-PR), 2013.

4. Vallini F., Gu Q., Wingad B., Slutsky B., Kats M., Fainman Y., and Frateschi N. C., "Geometry Optimization of Nanopatch Semiconductor Lasers: the Trade-off Between Quality Factor and Gain". In: Latin America Optics and Photonics Conference, 2012, Sao Sebastiao. Latin America Optics and Photonics Conference. Washington: OSA, 2012. p. LT3B.2.

5. Principe D., Barea L. A. M., Vallini F., and Frateschi N. C., "Si3N4/SiO2 Planar Photonics Structures Fabricated By Focused Ion Beam". In: XXXIV National Meeting on Condensed Matter, 2011, Foz do Iguaçu. XXXIV National Meeting on Condensed Matter, 2011.

6. Barea L. A. M., Vallini F., Figueira D. S. L., Vaz A. R., and Frateschi N. C., "Quantum well microdisk emitters with platinum bridges fabricated by Focused Ion Beam". In: 2nd International Workshop on FIB for Photonics, 2010, Cambridge. European Conference on Integrated Optics, 2010.

7. Figueira D. S. L., Vallini F., Barea L. A. M., and Frateschi N. C., "InGaAsP/InP QW Microdisk Laser Fabricated by Focused Ion Beam". In: Frontiers in Optics (FiO), 2009, San Jose. Frontier in Optics 2009/Laser Science XXV, 2009.

8. Barea L. A. M., Vallini F., Mialichi J. R., Vaz A. R., and Frateschi N. C., "Low-Roughness Active Microdisk Resonators Fabricated Focused Ion Beam (FIB)". In: EIPBN, 2009, Florida. EIPBN, 2009.

9. Barea L. A. M., Vallini F., Figueira D. S. L., da Silva Filho A., Frateschi N. C., and Vaz A. R., "Si_3N_4/SiO_2 planar photonic structures fabricated by focused ion beam". In: Future Trends in Microelectronics, 2009, Sardenha. Future Trends in Microelectronics: Unmapped Roads. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2009. p. 97-104.

Capítulo de Livro Publicado

1. Barea L. A. M., Vallini F., Figueira D. S. L., da Silva Filho A., Frateschi N. C., and Vaz A. R., "Si_3N_4/SiO_2 Planar Photonic Structures Fabricated by Focused Ion Beam". In: Serge Luryi; Jimmy Xu; Alexander Zaslavsky. (Org.). Future Trends in Microelectronics: From Nanophotonics to Sensors to Energy, 2010.