CARACTERIZAÇÃO TÉRMICA DE DIODOS-LASER DE POTÊNCIA PARA TELECOMUNICAÇÕES ATRAVÉS DA MICROSCOPIA FOTOTÉRMICA



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS 1996

LUIS CARLOS OGANDO DACAL

CARACTERIZAÇÃO TÉRMICA DE DIODOS-LASER DE POTÊNCIA PARA TELECOMUNICAÇÕES ATRAVÉS DA MICROSCOPIA FOTOTÉRMICA

Orientador : Prof. Dr. Antonio Manoel Mansanares

Tese apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin da Unicamp como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Física

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IFGW- UNICAMP





PARECER DE APROVAÇÃO

DEFESA DE TESE DE MESTRADO

LUIS CARLOS OGANDO DACAL

DATA: 20.12.96

BANCA EXAMINADORA:

Julant

ī

- Prof. Dr. ANTONIO MANOEL MANSANARES (Orientador)

- Prof. Dr. RICARDO BENNEPTON MARTINS

- Profa. Dra. MÔNICA ALLONSO COTTA

Em memória de Leoncio Ogando Tomé

Por ter me deixado o que de mais valioso um pai pode deixar para um filho : O EXEMPLO

" O verdadeiro amor é vão." Gilberto Gil

AGRADECIMENTOS

- A Deus pela vida e por me ensinar como melhor vivê-la
- À minha família por me apoiar sempre (mesmo que à distância). Obrigado minha mãe, Leo e é claro Pila.
- Ao Prof. Antonio Mansanares pela orientação e amizade
- Ao Prof. Edson Correa pela liderança e bom humor
- Ao Prof. Caio Mário Castro de Castilho pelos impulsos iniciais
- À SAGA de Salvador pela amizade fraterna ainda que distante e em especial a Adriana por me manter sempre informado dos passos do pessoal
- Ao pessoal da república : Andresinho, Gegê, Ilda, Friso, Lênin, Nick, Patrícia, Serginha Feliz por me suportarem e me acolherem; assim como àqueles que já partiram de lá : Liane, Alessandra e Edsa.
- Aos que não são da república, mas também não saem de lá : Denis, Maluca, Irmão Mula, Irmã Amazona, Aninha, Angelita e Sílvia por me torrarem a paciência.
- Ao pessoal da P.U. : Serginha Triste, Daniel, Luciana, F. O. F. e Raquel por me suportarem reclamando do bandeijão e de tudo mais
- Ao pessoal do Crisma : Andrea, Alysson, G. G., Zé Leandro, Helenita, Maurício(s), Walter e Lênin pelas valiosíssimas discussões que nos ajudam a crescer
- Ao pessoal do laboratório : Ana pelo sorriso sempre presente, Jerias pelo exemplo de dedicação, Larissa pela risada fácil, Laura pela calma baiana, Little Fruit pelas piadas infames, Gustavo pelas ajudas com o computador, Paulo pela música, Zezinho por dar "pau" nos computadores e em especial à Dinah pelas caronas até a Telebrás.
- Ao pessoal da Telebrás : Dr. Ricardo Benetton Martins e Antonio de Campos Sachs pelas amostras e pelas dicas sobre lasers de semicondutor sem as quais esta tese não seria possível. À Cidinha, Dilson e Hélio Godoy pela solda das amostras. Ao Claudemir pela metalização do suporte dos lasers e pela solda do termistor. Dr. Aldiono Machado e Ângelo Gobbi pelo crescimento e processamento do "ridge" das amostras respectivamente
- À Daniela pelas conversas e pela vital companhia nos almoços (ainda que nem sempre)
- Ao Departamento de Física Aplicada (IFGW Unicamp), em especial ao Prof. Mauro Monteiro, por nos ceder uma sala para a continuação das medidas enquanto as reformas do DEQ inviabilizavam as mesmas. Também à Beny pela ajuda com limpeza e fotografia de amostras.
- Ao CNPq pelo apoio financeiro

RESUMO

Neste trabalho foram investigados, através da Microscopia Fototérmica de Reflexão, diodo-lasers de potência fabricados pelo CPqD (Telebrás) e usados em telecomunicações. Trata-se de lasers com substrato de GaAs, poço quântico de InGaAs (pico de emissão em 980 nm), camadas confinantes de GaAlAs e GaInP. A estrutura física é do tipo "ridge". Os lasers foram tratados com camada anti-refletora (AR) na face frontal e reflexão máxima (R_{max}) na face traseira, montados com lado p para cima ou para baixo (substrato).

A distribuição de temperatura na face dos lasers, e sobre o seu contato elétrico (sobre o "ridge") no caso de serem montados com o lado p para cima, foi determinada. No último caso, as medidas foram feitas nas proximidades do espelho e no meio da cavidade. Os resultados experimentais evidenciam o maior aquecimento do espelho. A partir destes resultados e do cálculo da temperatura para a geometria do problema, foi estabelecida a relação entre as perdas no volume e as de superfície para estes lasers. A partir dos cálculos também foi possível concluir que a camada de alumina (AR na face de saída) não influencia significativamente a distribuição de temperatura. Por outro lado, os resultados experimentais obtidos na face do laser mostram a importância das camadas de confinamento de luz no aquecimento da região ativa. Medidas feitas sob as mesmas condições de corrente injetada, mas sob diferentes níveis de potência de saída mostram nitidamente a influência da luz no processo de aquecimento. A absorbância da superficie do dispositivo foi determinada, mostrando-se muito superior àquela da camada de alumina, indicando que se trata de aquecimento por absorção de luz na superficie do cristal.

ABSTRACT

In this work the Photothermal Reflectance Microscopy was used to investigate telecommunication laser-diodes produced by CPqD-Telebrás. These lasers are InGaAs SQW lasers operating at 980 nm, with GaAlAs or GaInP cladding layers, based on GaAs substrate, and using a ridge waveguiding structure. The laser facets were coated with $\lambda/4$ Al₂O₃ and $\lambda/4$ Al₂O₃/Si layers to provide anti-reflection and maximum reflection mirrors (front and rear facet, respectively). The devices were soldered junction-side up or junction-side down on the heat sink.

The temperature distribution was determined on the laser facet, as well as on the electric contact (on the ridge) in the case of junction-side up soldered devices. In the last case, measurements were made both near the facet and in the middle of the cavity. Experimental results show a higher temperature distribution near the facet. Comparing these results with the calculated temperature for the specific geometry allows to establish the relationship between the bulk and surface losses. From the calculated temperature we conclude also that the Al_2O_3 layer does not play a significant role in the temperature distribution. On the other hand, experimental results obtained on the facet show the important role of the cladding layers on the laser temperature. Measurements performed under the same injection current level, but under different output power levels, show clearly the influence of the laser light in the heating process of the device. The surface absorbency was found to be much higher than that of Al_2O_3 , indicating that the main heating mechanism is the surface crystal absorption of the emitted laser light.

APRESENTAÇÃO

Os processos térmicos em lasers de semicondutor comprometem fortemente a qualidade e a confiabilidade do dispositivo. O aquecimento do laser pode levar a uma diminuição na potência emitida ou mesmo à formação de regiões que não mais emitem luz. Torna-se necessária uma melhor compreensão dos fenômenos envolvidos e para este fim utilizamos a Microscopia Fototérmica de Reflexão.

Este trabalho está dividido em seis capítulos.

O primeiro capítulo trata das ferramentas teóricas necessárias para análise e discussão dos resultados experimentais. A equação de difusão de calor nos permite determinar a temperatura, como função da posição e do tempo, no sólido estudado. Uma ênfase especial é dada à solução desta equação no caso de simetria cilíndrica das fontes pois isto será utilizado no modelo teórico proposto no capítulo 5.

No segundo capítulo apresentamos as características gerais das mais importantes técnicas fototérmicas de inspeção (apresentando suas vantagens e desvantagens).

O terceiro capítulo é dedicado aos lasers de semicondutor. Nele apresentamos os princípios gerais de funcionamento destes dispositivos assim como as principais estruturas existentes.

No quarto capítulo há a descrição do equipamento empregado nas medidas assim como das amostras estudadas.

O quinto capítulo apresenta os resultados experimentais e o modelo teórico criado, assim como os resultados obtidos a partir dele e que foram comparados com os primeiros. Apresentamos, ao longo das discussões, as conclusões que podiam ser tiradas.

O sexto capítulo resume as conclusões anteriormente apresentadas e cita as perspectivas para trabalhos futuros.

Índice

Capítulo 1 : Fundamentos teóricos	1
1) Introdução	1
2) A equação de difusão de calor	1
Simetria esférica, meio infinito, sem fontes	4
Simetria cilíndrica, meio semi-infinito, sem fontes	8
Passagem do caso tridimensional para o caso unidimensional	17
Capítulo 2 : Técnicas fototérmicas de inspeção	21
2.1) Introdução	21
2.2) Resolução espacial na formação de imagem por onda térmica	21
2.3) O limite de campo próximo extremo	24
2.4) Princípios gerais da formação de imagens	
2.5) Formação de imagens por onda térmica (técnicas)	27
Microscopia fotoacústica	27
Efeito miragem	29
Radiometria infravermelha	30
Microscopia fototérmica de deflexão	31
Ressonância magnética fototermicamente modulada	31
Espectroscopia de lente térmica	32
Microscopia fototérmica de reflexão	34
Capítulo 3 : Lasers de semicondutor	36
3.1) Como funciona um laser de semicondutor	36
	20

3.1) Como funciona um laser de semicondutor	36
3.1.1) A junção p-n	36
3.1.2) Recombinação radiativa	37
3.1.3) A emissão estimulada	40
3.1.4) A corrente de limiar	41
3.2) Evolução das estruturas utilizadas na fabricação de diodos laser	42
3.2.1) Laser de heterojunção	43
3.2.2) Peculiaridades dos lasers de semicondutor	44
3.3) Lasers de semicondutor com estruturas quânticas	44
3.3.1) Baixa corrente de limiar	45
3.3.2) Estruturas OW multidimensionais	48
3.4) Principais tipos de laser de semicondutor	48
3.4.1) Lasers de contato de faixa	49
3.4.2) Lasers com guiamento por índice	49
3.4.2.1) Lasers "ridge"	50

3.4.2.2) Lasers com camada ativa enterrada ("buried	lasers")
	51
3.4.2.2.1) Lasers DCPBH	51
3.4.2.2.2) Lasers tipo "buried crescent"	52
3.4.3) Lasers monomodo	53
3.4.4) Tipos de lasers de estruturas quânticas	54
3.4.4.1) Lasers de poço quântico com confinamento s	eparado
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
3.4.4.2) Estruturas laser de poço quântico tensionado.	57
3.5) Degradação do laser	58

Capítulo 4 : Arranjo experimental e amostras	60
4.1) Introdução	60
4.2) Equipamentos	60
4.3) Amostras	64

Capítulo 5 : Resultados experimentais e discussões
Capítulo 6 : Conclusões e perspectivas120
Apêndice 1 : Programas usados para cálculos numéricos no Mathematica121
Apêndice 2 : Cálculo do dR/dT efetivo
Apêndice 3 : Absorção na alumina e na superficie130
Apêndice 4 : Cálculo dos níveis de energia do poço de potencial134
Bibliografia

Capítulo 1

Fundamentos teóricos

1) Introdução

Este capítulo tem por objetivo apresentar o tratamento matemático adequado à análise dos resultados experimentais obtidos e necessário à elaboração do modelo teórico que será apresentado no capítulo 5.

A equação de difusão de calor rege os fenômenos de transporte de energia térmica em sólidos (equação (1.1)). A sua solução nos leva a obter a temperatura do corpo estudado como função da posição e do tempo.

Neste capítulo será dada uma ênfase especial à solução desta equação para fontes com simetria cilíndrica, pois será este o caso tratado no modelo teórico do capítulo 5.

2) A equação de difusão de calor

Se tivermos dois corpos mantidos a temperaturas diferentes e promovermos o contato entre eles (um arranjo qualquer que possibilite troca de energia), haverá fluxo de calor do corpo mais quente para o corpo mais frio até que eles atinjam uma temperatura de equilíbrio (estacionária) que será uma média das temperaturas iniciais de cada um ponderada pelas respectivas massas e calores específicos. Se o sistema formado por estes dois corpos estiver impossibilitado de trocar energia com qualquer outro elemento, dizemos que o sistema está termicamente isolado e a temperatura de equilíbrio atingida se manterá constante para sempre.

Este mesmo processo pode ocorrer em um único corpo desde que dois pontos deste sejam mantidos a diferentes temperaturas, ou seja, o fluxo de calor ocorre sempre que o gradiente da temperatura é não nulo ($\vec{\nabla} T \neq 0$).

Os processos de transporte de calor podem ser divididos em três tipos :

- a) Condução : quando o calor se propaga através de um meio material, mas sem ocorrer deslocamento de massa.
- b) Radiação : quando o calor se propaga através de ondas eletromagnéticas emitidas principalmente pelos corpos mais quentes.

c) Convecção : quando o calor é levado do ponto mais quente para o mais frio através de um meio material, mas com deslocamento de massa.

O fenômeno de condução de calor em um sólido é regido pela equação de difusão de calor :

$$\vec{\nabla} [k. \vec{\nabla} T(\vec{r}, t)] - \rho. c. \frac{\partial T(\vec{r}, t)}{\partial t} = -f(\vec{r}, t) \qquad (1.1)$$

onde k é a condutividade térmica do material, $T(\vec{r},t)$ é a sua temperatura, ρ e c são respectivamente a densidade e o calor específico do mesmo e $f(\vec{r},t)$ é o termo de fonte de calor.

Considerando k independente da posição (o que é válido para materiais homogêneos) podemos escrever a equação de difusão de calor como :

$$k \cdot \nabla^2 T(\vec{\mathbf{r}}, t) - \rho \cdot c \cdot \frac{\partial T(\vec{\mathbf{r}}, t)}{\partial t} = -f(\vec{\mathbf{r}}, t) \qquad (1.2)$$

O primeiro termo do lado esquerdo da equação anterior está relacionado à variação do fluxo de calor ao se atravessar um certo volume V e por isso é proporcional à condutividade térmica do material. Esta, em uma analogia com o caso de um fluxo de cargas (corrente elétrica), atuaria como condutividade elétrica, ou seja, k é uma medida da facilidade que o calor tem para atravessar o volume V.

É importante lembrar que a lei de Fourier, a qual rege a condução de calor em regime contínuo, estabelece que o fluxo de calor $(\vec{\phi})$ é dado por:

$$\vec{\phi} = -k \cdot \vec{\nabla} T(\vec{r}, t) \qquad \left(\frac{Energia}{Area.\,tempo}\right)$$

onde o sinal - serve para indicar que o fluxo de calor ocorre em sentido contrário ao do gradiente de temperatura (o calor flui do ponto mais quente para o mais frio). O primeiro termo da equação (1.1), e consequentemente da equação (1.2), pode ser escrito como :

$$\vec{\nabla} [k.\vec{\nabla} T(\vec{r},t)] = -\vec{\nabla} . \vec{\phi} = -div \vec{\phi}$$
(1.3)

podendo ser interpretado como a variação líquida do fluxo de calor que atravessa o volume V com o sinal invertido, ou seja, é uma medida da quantidade de calor retida pelo volume V.

O segundo termo do lado esquerdo das equações (1.1) e (1.2) diz respeito à mudança de temperatura na região estudada com o decorrer do tempo. Se o termo $\vec{f(r,t)}$ for nulo podemos escrever a equação (1.2) como :

$$k \cdot \nabla^2 T(\vec{\mathbf{r}}, t) = \rho \cdot c \cdot \frac{\partial T(\vec{\mathbf{r}}, t)}{\partial t} \qquad (1.4)$$

significando que, na ausência de fontes de calor, a quantidade de energia térmica retida no volume V gera, em um tempo Δt , um aumento ΔT na temperatura. Este aumento de temperatura é inversamente proporcional à densidade e ao calor específico do material para uma certa quantidade de calor retido em um certo intervalo de tempo.

O termo que surge à direita das equações (1.1) e (1.2) é o termo de fontes de calor, o qual tem dimensão de energia por volume e tempo. Podemos interpretar as equações (1.1) e (1.2) da seguinte forma : a variação do fluxo de calor ao se atravessar o volume V, k. $\nabla^2 T$, tem duas causas (conseqüências), uma é a alteração da temperatura nesta região ($\rho.c.\frac{\partial T}{\partial}$) e a outra é a existência de fontes ou sorvedouros de calor neste volume (-f(\vec{r} ,t)) sendo que para o caso de sorvedouros a contribuição de f(\vec{r} ,t) deve mudar de

sinal passando $a + f(\vec{r}, t)$. Quando o termo de fonte é periódico no tempo usamos a expressão "onda térmica" para as soluções dependentes do tempo da equação de difusão de calor. Imagine tal situação e ainda que o termo de fonte tenha sua dependência temporal desacoplada da espacial e harmônica, de tal forma que possamos escrever :

$$\vec{f(r,t)} = \vec{f(r)} \cdot \vec{e^{-i\omega t}}$$
 (1.5)

Tendo $T(\vec{r},t)$ um comportamento análogo, no regime estacionário oscilante, ao das fontes de calor, pois é de se esperar que a temperatura oscile na mesma frequência destas, passamos a ter :

$$T(\vec{r},t) = T(\vec{r}).e^{-i\omega t} \qquad (1.6)$$

Substituindo (1.5) e (1.6) em (1.2) ficamos com :

$$k \cdot \nabla^2 [T(\vec{r}).e^{-i\omega t}] - \rho \cdot c \cdot \frac{\partial}{\partial t} (T(\vec{r}).e^{-i\omega t}) = -f(\vec{r}).e^{-i\omega t}$$
$$k \cdot \nabla^2 [T(\vec{r})].e^{-i\omega t} + i\omega \cdot \rho \cdot c \cdot T(\vec{r}).e^{-i\omega t} = -f(\vec{r}).e^{-i\omega t}$$
$$k \cdot \nabla^2 [T(\vec{r})] + i\omega \cdot \rho \cdot c \cdot T(\vec{r}) = -f(\vec{r})$$

Lembrando que $(1+i)^2 = 2i$ obtemos :

$$i\omega\rho c = k.2.\frac{i\omega\rho c}{k.2} = k.\frac{(1+i)^2\omega\rho c}{2.k} = k.q^2$$
 onde $q = (1+i).\sqrt{\frac{\omega\rho c}{2.k}}$

e a equação pode ser escrita como :

$$k \cdot \nabla^2 [T(\vec{r})] + k \cdot q^2 \cdot T(\vec{r}) = -f(\vec{r})$$

$$\nabla^2 [T(\vec{r})] + q^2 \cdot T(\vec{r}) = -\frac{f(\vec{r})}{k}$$
 (1.7)

Simetria esférica, meio infinito, sem fontes

Vamos agora resolver a equação (1.7) para um dos casos mais simples. Consideremos um meio infinito, homogêneo, isotrópico e sem fontes de calor à exceção da localizada na origem. A equação que governa a difusão de calor nesta situação é :

$$\nabla^2 [T(r)] + q^2 \cdot T(r) = 0$$

que só não é válida na origem onde o termo de fonte não é nulo.

Usando coordenadas esféricas para aproveitar a simetria do problema temos :

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{d^2}{dr^2} [r \cdot T(r)] + q^2 \cdot T(r) = 0 \qquad (1.8)$$

$$\frac{d^2}{dr^2}[r.T(r)] + q^2.[r.T(r)] = 0$$

Esta equação é a de um oscilador harmônico (com a oscilação no espaço e não no tempo) em r.T(r) e logo a solução é na forma :

$$\mathbf{r}.\mathbf{T}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}.\mathbf{e}^{iq\mathbf{r}} + \mathbf{B}.\mathbf{e}^{-iq\mathbf{r}}$$
$$\mathbf{T}(\mathbf{r}) = \frac{A.e^{iq\mathbf{r}}}{r} + \frac{B.e^{-iq\mathbf{r}}}{r}$$

Substituindo o valor de q temos :

$$T(\mathbf{r}) = \frac{A}{r} .\exp[(\mathbf{i}-1).\sqrt{\frac{\omega\rho \mathbf{c}}{2\mathbf{k}}} \cdot \mathbf{r}] + \frac{B}{r} .\exp[(1-\mathbf{i}).\sqrt{\frac{\omega\rho \mathbf{c}}{2\mathbf{k}}} \cdot \mathbf{r}]$$
(1.9)

Podemos perceber que cada uma das duas parcelas que formam a solução são por sua vez compostas pelo produto de duas exponenciais, sendo uma de expoente imaginário e a outra de expoente real. As exponenciais imaginárias estão associadas às oscilações da temperatura no espaço enquanto as exponenciais reais dizem respeito ao amortecimento da amplitude da onda durante sua propagação pelo meio.

Como no nosso caso a única fonte de calor que há está localizada na origem e como a "onda térmica" sofre atenuação de sua amplitude enquanto se propaga pelo material homogêneo podemos por como condição de contorno um valor nulo para a temperatura em $r = \infty$.

$$\lim_{r\to\infty} \mathbf{T}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}$$

Para que esta condição seja satisfeita precisamos ter B = 0 na expressão de T(r) pois o comportamento da função exp(r) domina o da função 1/r no produto entre elas. A solução para T(r) fica então :

$$T(\mathbf{r}) = \frac{A}{r} .\exp[(\mathbf{i}-\mathbf{l}).\sqrt{\frac{\omega\rho \mathbf{c}}{2\mathbf{k}}}.\mathbf{r}]$$

Façamos agora a seguinte associação :

$$\mu = \sqrt{\frac{2k}{\omega\rho c}} \qquad (1.10)$$

A solução para T(r) pode então ser escrita como :

$$T(\mathbf{r}) = \frac{A}{r} \cdot e^{-\mathbf{r}/\mu} \cdot e^{+\mathbf{i}\mathbf{r}/\mu}$$
(1.11)

Para determinarmos, em (1.11), o valor de A podemos supor que uma certa potência P₀ é liberada pela fonte de calor localizada na origem. O valor P₀ será igual ao produto do fluxo de calor $(\vec{\phi} = -k \cdot \vec{\nabla} T(\vec{r}, t))$ através de uma área que envolva a fonte pelo valor desta área no limite em que ela vai a zero. Consideraremos o fluxo de energia através de uma esfera de raio r₀ centrada na origem e passaremos o limite quando r₀ \rightarrow 0.

$$\mathbf{P}_{0} = \lim_{r_{0} \to 0} \left(4\pi r_{0}^{2} \cdot \boldsymbol{\phi} \right) = \lim_{r_{0} \to 0} \left(-k \cdot 4\pi r_{0}^{2} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r_{0}} \right)$$
(1.12)

A partir de (1.11) podemos calcular :

$$\frac{\partial T}{\partial r}|_{r_0} = -\frac{A}{r_0^2} \cdot e^{(i-1)\frac{r_0}{\mu}} \cdot \left(1 - \frac{(i-1)}{\mu} \cdot r_0\right)$$
(1.13)

Substituindo (1.13) em (1.12) temos :

$$P_{0} = \lim_{r_{0} \to 0} \left(+ k.4\pi r_{0}^{2} \cdot \frac{A}{r_{0}^{2}} \cdot e^{(i-1)\frac{r_{0}}{\mu}} \cdot \left[1 - \frac{(i-1)}{\mu} \cdot r_{0} \right] \right) = 4\pi k.A \Rightarrow$$

$$A = \frac{P_{0}}{4.\pi.k}$$

A forma final para a solução de T(r) fica sendo então :

T(r) =
$$\frac{P_0}{4.\pi.k} \cdot \frac{e^{\frac{(i-1)}{\mu}r}}{r}$$
 (1.14)

Voltando a (1.6) podemos finalmente escrever :

$$T(\vec{r},t) = \frac{P_0}{4.\pi.k} \cdot \frac{e^{(i-1)}r}{r} \cdot e^{-i\omega t}$$
 (1.15)

A equação (1.15) nos dá a expressão para a temperatura, função da posição e do tempo, para o caso de um meio infinito, homogêneo, isotrópico e com uma única fonte na origem. É importante notar que esta solução, obtida a partir da equação (1.8) diverge na origem, o que não é surpreendente visto que esta equação não é válida em r = 0, onde o termo de fonte $f(\vec{r}, t)$ não é nulo e onde temos uma quantidade de energia finita (representada pela potência P₀ da fonte) depositada em um ponto sem dimensão.

O parâmetro μ , definido em (1.10), é chamado comprimento de difusão térmica sendo ele igual à distancia que a onda deve percorrer no meio para que o fator exponencial que atenua sua amplitude atinja um valor igual a e⁻¹.

$$\left| T(\vec{r},t) \right| = \frac{P_0}{4.\pi.k} \cdot \frac{e^{-\frac{r}{\mu}}}{r}$$

A quantidade k / ρ .c ,que aparece na definição de μ , é chamada difusividade térmica e é uma medida de quanto o meio consegue propagar a onda térmica, de determinada frequência, sem amortecê-la ou atrasá-la. Normalmente a difusividade térmica é representada pela letra α . A equação (1.10) pode ser então escrita como :

$$\mu = \sqrt{\frac{2.\alpha}{\omega}} \qquad (1.16)$$

Neste ponto podemos notar que, pela própria forma da equação (1.15), o termo "onda térmica" é bastante apropriado. Na referida equação temos o parâmetro ω desempenhando o papel de freqüência temporal enquanto 1 / μ faz o papel de freqüência espacial assim como o de um fator de amortecimento da amplitude desta onda térmica à medida em que ela se propaga pelo meio.

Notamos em (1.16) que o comprimento de difusão térmica é inversamente proporcional à raiz quadrada da freqüência temporal da onda térmica, ou seja, quanto maior for o valor de ω mais atenuada será a onda térmica, diminuindo o seu comprimento de penetração no meio. O resultado disto é que o controle do valor de ω (através do controle da freqüência de modulação da fonte de calor) nos permitirá dizer de qual espessura da amostra vem a resposta dada pela onda térmica em uma certa técnica experimental.

O comprimento da onda térmica é $2.\pi.\mu$. Nesta distância o fator de amortecimento exponencial da amplitude cai a $e^{-2\pi} \approx 1 / 500$. Os fenômenos de espalhamento e interferência devem ocorrer em uma distância menor que esta para serem significativos.

Simetria cilíndrica, meio semi-infinito, sem fontes

Antes de resolvermos a equação de difusão de calor para o caso de simetria cilíndrica, meio semi-infinito e sem fontes, vamos apresentar, brevemente, a transformada de Hankel.

Imaginemos os vetores \vec{u} e \vec{v} orientados como indicado na figura seguinte. A transformada de Fourier para funções de duas variáveis é dada por :

$$f(\vec{v}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F(u) \exp[-2.i.\pi.\vec{v}.\vec{u}] dx.dy =$$
$$= \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} F(u) \exp[-2.i.\pi.v.u.\cos(\theta)] u.d\theta.du \qquad (1.17)$$

onde a integral em θ pode ser considerada como uma definição da função de Bessel J_0 :



Figura 1.1 - Disposição dos vetores u e v no plano xy

Substituindo a equação (1.18) na (1.17) podemos escrever :

$$f(\vec{v}) = 2.\pi . \int_{0}^{\infty} u.F(u).J_{0}(2\pi . v.u).du$$
 (1.19)

Note que este tipo de transformação pode ser bastante útil na solução da equação de difusão de calor quando a simetria do problema for cilíndrica, pois a temperatura não dependerá da coordenada angular (note que a passagem de (1.17) a (1.19) usando (1.18) considera que F(u) não depende de θ).

Considerando então funções independentes da coordenada angular θ em um sistema polar ($F(\vec{u}) = F(u)$) temos que :

$$G(\mathbf{v}) = 2.\pi. \int_{0}^{\infty} \mathbf{u}.F(\mathbf{u}).J_{0}(2\pi.\mathbf{v}.\mathbf{u}).d\mathbf{u}$$
(1.20)
$$F(\mathbf{u}) = 2.\pi. \int_{0}^{\infty} \mathbf{v}.G(\mathbf{v}).J_{0}(2\pi.\mathbf{u}.\mathbf{v}).d\mathbf{v}$$

As equações (1.20) são as definições da transformada de Hankel e sua inversa, as quais têm a mesma forma.

Vamos agora considerar um meio sem fontes de calor e semi-infinito (z > 0) onde a temperatura tem simetria cilíndrica com o eixo de simetria coincidindo com o z. Isto pode ser conseguido, por exemplo, através de um feixe laser com perfil gaussiano de intensidade, o qual atinge perpendicularmente o meio, no plano z = 0 e com seu centro em z = r = 0 (como mostrado na figura seguinte).



Figura 1.2 - Esquema da incidência de uma excitação, com perfil de intensidade gaussiano, sobre o meio a ser estudado

Note que considerar a região z > 0 sem fontes de calor significa que a origem da onda térmica está simplesmente relacionada à continuidade do fluxo de calor através do plano z = 0.

Considerando que a excitação externa tem uma dependência temporal desacoplada da espacial, como indicado em (1.5), temos que na região z > 0 a equação de difusão de calor toma a forma já conhecida :

$$\nabla^2[T(r)] + q^2 \cdot T(r) = 0$$

onde $q = (1+i) \cdot \sqrt{\frac{\omega \rho c}{2.k}}$ ou ainda $q = \frac{(1+i)}{\mu}$ por (1.10).

Usando as coordenadas cilíndricas (r,θ,z) e aproveitando a simetria do problema que faz a temperatura independente de θ podemos tomar τ (β,z) a transformada de Hankel da temperatura T(r,z) onde β é a coordenada transformada de r, ou seja, por (1.20) temos :

$$\tau (\beta, z) = 2.\pi . \int_{0}^{\infty} r. dr. J_{0}(2.\pi, \beta, r). T(r, z) \qquad (1.21)$$

e a inversa é :

$$T(\mathbf{r},\mathbf{z}) = 2.\pi . \int_{0}^{\infty} \beta . d\beta . J_{0}(2.\pi . \beta . \mathbf{r}) . \tau(\beta, \mathbf{r}) \qquad (1.22)$$

O Laplaciano em coordenadas cilíndricas é dado por :

$$\nabla^2 \mathbf{T}(\mathbf{r}, \mathbf{z}) = \frac{1}{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(\mathbf{r} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} T(\mathbf{r}, \mathbf{z}) \right) + \frac{1}{\mathbf{r}^2} \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \mathbf{T}(\mathbf{r}, \mathbf{z}) \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} T(\mathbf{r}, \mathbf{z})$$
(1.23)

onde, no nosso caso, a derivada em θ é nula devido à simetria do problema.

Usando (1.22) podemos escrever que :

$$\frac{\partial}{\partial t} T(\mathbf{r}, \mathbf{z}) = 2.\pi \cdot \int_{0}^{\infty} \beta \cdot d\beta \cdot \tau(\beta, \mathbf{z}) \frac{d}{d\mathbf{r}} J_{0}(2.\pi, \beta \cdot \mathbf{r}) \qquad (1.24)$$

onde
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{r}} \mathrm{J}_{0}(2,\pi,\beta,\mathbf{r}) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(2,\pi,\beta,\mathbf{r})} \mathrm{J}_{0}(2,\pi,\beta,\mathbf{r}) \cdot \frac{\mathrm{d}(2,\pi,\beta,\mathbf{r})}{\mathrm{d}\mathbf{r}} = 2,\pi,\beta,\mathrm{J}_{0}(2,\pi,\beta,\mathbf{r})$$

Usando a propriedade das derivadas das funções de Bessel de ordem zero que nos garante que $J'_0(x) = -J_1(x)$ temos que :

$$\frac{d}{dr}J_{0}(2.\pi.\beta.r) = -2.\pi.\beta.J_{1}(2.\pi.\beta.r)$$
(1.25)

Substituindo (1.25) em (1.24) temos :

$$\frac{\partial}{\partial t} T(\mathbf{r}, \mathbf{z}) = 2.\pi \cdot \int_{0}^{\infty} (-2.\pi \cdot \beta) \cdot \beta \cdot d\beta \cdot \tau(\beta, \mathbf{z}) \mathbf{J}_{1}(2.\pi \cdot \beta \cdot \mathbf{r}) \implies$$
$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{r}, \frac{\partial}{\partial t} T(\mathbf{r}, \mathbf{z})) = 2.\pi \cdot \int_{0}^{\infty} (-2.\pi \cdot \beta) \beta \cdot d\beta \cdot \tau(\beta, \mathbf{z}) \frac{d}{d\mathbf{r}} [\mathbf{r} \cdot \mathbf{J}_{1}(2.\pi \cdot \beta \cdot \mathbf{r})] \qquad (1.26)$$

onde $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{r}}[\mathbf{r}.\mathbf{J}_1(2.\pi.\beta.\mathbf{r})] = \mathbf{J}_1(2.\pi.\beta.\mathbf{r}) + \mathbf{r}.\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{r}}\mathbf{J}_1(2.\pi.\beta.\mathbf{r}) =$ = $\mathbf{J}_1(2.\pi.\beta.\mathbf{r}) + 2.\pi.\beta \mathbf{r}.\mathbf{J}_1'(2.\pi.\beta.\mathbf{r})$

Usando a propriedade das derivadas das funções de Bessel de ordem um que nos garante que $J'_1(z) = J_0(z) - \frac{1}{z} J_1(z)$ temos que :

$$2.\pi.\beta.r J'_{1}(2.\pi.\beta.r) = 2.\pi.\beta.r J_{0}(2.\pi.\beta.r) - J_{1}(2.\pi.\beta.r)$$

logo:

$$\frac{d}{dr}[r.J_1(2.\pi.\beta.r)] = 2.\pi.\beta.r J_0(2.\pi.\beta.r)$$
(1.27)

Substituindo (1.27) em (1.26) chegamos a :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{r},\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{T}(\mathbf{r},\mathbf{z})) = 2.\pi \int_{0}^{\infty} - (2.\pi.\beta)^{2} \beta d\beta \tau(\beta,\mathbf{z}) \mathbf{r} J_{0}(2.\pi.\beta.\mathbf{r}) \Rightarrow$$

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial t} (r \cdot \frac{\partial}{\partial t} T(r, z)) = 2 \cdot \pi \cdot \int_{0}^{\infty} -(2 \cdot \pi \cdot \beta)^{2} \beta \cdot d\beta \cdot \tau(\beta, z) \cdot J_{0}(2 \cdot \pi \cdot \beta \cdot r)$$
(1.28)

Usando (1.22) temos :

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} T(\mathbf{r}, \mathbf{z}) = 2.\pi \cdot \int_0^\infty \beta \cdot d\beta \cdot J_0(2.\pi \cdot \beta \cdot \mathbf{r}) \cdot \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tau(\beta, \mathbf{z})$$
(1.29)

O Laplaciano pode então ser escrito, substituindo (1.28) e (1.29) em (1.23) e lembrando que T independe de θ , como :

$$\nabla^2 \mathbf{T}(\mathbf{r}, \mathbf{z}) = 2.\pi \cdot \int_0^\infty \beta \cdot \mathbf{d}\beta \cdot \mathbf{J}_0 (2.\pi \cdot \beta \cdot \mathbf{r}) \cdot \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tau(\beta, \mathbf{z}) - [2.\pi \cdot \beta]^2 \cdot \tau(\beta, \mathbf{z}) \right\}$$
(1.30)

Usando (1.30) e (1.22) em $\nabla^2[T(r)] + q^2 \cdot T(r) = 0$ temos que a equação de difusão de calor pode ser escrita como :

$$2.\pi \int_{0}^{\infty} \beta d\beta J_{0}(2.\pi,\beta,r) \left\{ \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} \tau(\beta,z) - \left([2.\pi,\beta]^{2} - q^{2} \right) \tau(\beta,z) \right\} = 0 \quad (1.31)$$

Para que o integrando de (1.31) seja nulo é necessário que se satisfaça a seguinte equação :

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tau(\beta, z) - m^2 \cdot \tau(\beta, z) = 0 \qquad (1.32)$$

onde:

$$\mathbf{m}^{2} = [2.\pi.\beta]^{2} - q^{2} \qquad (1.33)$$

A solução geral da equação (1.32) tem a forma de exponenciais sem a unidade imaginária no argumento (fora a intrínseca a <u>m</u> devida a <u>q</u>) pois m^2 surge com sinal negativo na referida equação :

$$\tau(\beta, z) = A(\beta).e^{m.z} + B(\beta).e^{-m.z} \qquad (1.34)$$

onde os coeficientes A e B são funções de β pois (1.32) é uma equação diferencial parcial só em z.

As condições de contorno para o nosso problema serão :

i) $T(r,z \rightarrow \infty) = 0$ ii) Continuidade do fluxo de calor em z = 0

A inexistência de fontes de calor na região estudada, junto com a atenuação da onda térmica ao longo de sua propagação pelo meio, justificam a primeira condição.

A condição i) nos permite concluir, por (1.21), que $\tau(\beta, z \rightarrow \infty) = 0$ e daí chegamos a que A(β) = 0 em (1.34), pois caso contrário τ divergiria ao invés de se anular no limite $z \rightarrow \infty$. Ficamos então com :

$$\tau(\beta,z) = B(\beta).e^{-m.z} \qquad (1.35)$$

A continuidade do fluxo de calor é válida pela simples conservação de energia, ou seja, estamos considerando que toda a energia que incide sobre o plano z = 0 é transformada em calor que se propagará pela região z > 0.

Consideremos a intensidade incidente em z = 0 dada por :

$$I(r) = I_0.exp[-(r/R)^2]$$
 (1.36)

onde R é o raio característico da gaussiana. Quando dizemos que a fonte de excitação externa incide perpendicularmente sobre o plano z = 0 estamos afirmando que o fluxo de calor tem a mesma direção e sentido do eixo z. A continuidade do fluxo de calor pode ser matematicamente expressa por :

$$I(\mathbf{r}) = -k \frac{\partial}{\partial z} T(\mathbf{r}, z)|_{z=0} \qquad (1.37)$$

Aplicando a transformada de Hankel à equação (1.37) temos :

$$2.\pi \int_{0}^{\infty} r.dr.J_{0}(2.\pi.\beta.r).I(r) = -k \frac{\partial}{\partial z} \left(2.\pi \int_{0}^{\infty} r.dr.J_{0}(2.\pi.\beta.r).T(r,z) \right) \Big|_{z=0}$$
(1.38)

A solução da integral do termo da esquerda de (1.38), usando (1.36), é tabelada [1]. A integral entre parênteses nesta mesma equação coincide com a definição de $\tau(\beta,r)$ dada em (1.21). A equação (1.38) pode então ser escrita como :

$$I_0.\pi.R^2.\exp[-\pi^2.\beta^2.R^2] = -k.\frac{\partial}{\partial z}\tau(\beta,z)|_{z=0} \qquad (1.39)$$

Usando (1.35) temos que :

$$\frac{\partial}{\partial z} \tau(\beta, z)|_{z=0} = -m.B(\beta) \qquad (1.40)$$

e substituindo isto em (1.39) ficamos com :

$$B(\beta) = \frac{I_0 . \pi . R^2 . exp[-\pi^2 . \beta^2 . R^2]}{k.m}$$
(1.41)

Relacionando a intensidade com a potência (P₀) incidentes temos que :

$$P_{0} = \int_{0}^{2\pi} d\theta \int_{0}^{\infty} r.dr.I(r) = \int_{0}^{2\pi} d\theta \int_{0}^{\infty} r.dr.I_{0}.exp\left[-\left(\frac{r}{R}\right)^{2}\right] \implies$$

$$P_{0} = 2.\pi.I_{0}.\left(-\frac{R^{2}}{2}.exp\left[-\left(\frac{r}{R}\right)^{2}\right]\right) \mid_{0}^{\infty} = 2.\pi.I_{0}.\frac{R^{2}}{2} \implies$$

$$P_{0} = \pi.R^{2}.I_{0} \qquad (1.42)$$

Podemos agora usar o valor da potência depositada no plano z = 0 pela distribuição gaussiana de intensidade centrada em r = 0 e de raio R (equação (1.42)) para escrever $\tau(\beta, z)$ usando as equações (1.41) e (1.35) :

$$\tau(\beta, z) = \frac{P_0}{k} \cdot \frac{\exp(-\pi^2 \cdot \beta^2 \cdot R^2)}{m} \cdot e^{-m \cdot z}$$
(1.43)

Substituindo (1.43) em (1.22) chegamos finalmente à expressão para a temperatura :

$$T(\mathbf{r}, \mathbf{z}) = \frac{P_0}{k} 2.\pi . \int_0^\infty \beta. d\beta. J_0(2.\pi.\beta.r). \frac{\exp[-(\pi.\beta.R)^2].\exp[-m.z]}{m}$$
(1.44)

Fazendo p = $2.\pi.\beta \Rightarrow dp = 2.\pi.d\beta$ podemos escrever a equação (1.44) da seguinte forma :

$$T(\mathbf{r},\mathbf{z}) = \frac{P_0}{2.\pi.k} \int_0^\infty p.\,dp.\,J_0(p.\,\mathbf{r}) \frac{\exp[-(p.\,R\,/\,2)^2\,].\exp[-m.\,z]}{m}$$
(1.45)

onde, por (1.33),

$$m^2 = p^2 - q^2 = p^2 - \frac{2.1}{\mu^2}$$
 (1.46)

A integral (1.45) pode ser resolvida numericamente e para este fim usamos o *Mathematica for Microsoft Windows versão 2.2.1*. O programa usado para evoluir a integração é apresentado no Apêndice 1, os gráficos referentes à amplitude e à fase de T(r,z) seguem abaixo. O resultado dos cálculos é T/(P₀ / k) em μ m⁻¹. R foi tomado como 0.5 μ m pois é o comprimento típico do raio da fonte de calor na amostra. Para o comprimento de difusão térmica, μ , utilizou-se o valor 5 μ m (quando μ é muito maior que a dimensão analisada temos que a fase é constante e perdemos a importante informação sobre o comportamento desta). Os valores de r e z variaram de 0 a 6 μ m.

O resultado conseguido foi o esperado, onde a amplitude da temperatura cai, e a fase aumenta, à medida em que nos afastamos da origem quer em r, quer em z. O primeiro efeito é devido à atenuação da onda térmica devida a sua penetração no meio material da amostra e o segundo efeito está ligado à difusividade térmica do material que surge na definição do comprimento de difusão térmica (equação (1.16)).

Gráficos do resultado da integração numérica de (1.45)





É importante perceber que, longe da fonte de calor, o comportamento da fase da temperatura é idêntico ao caso da simetria esférica (equação (1.14)), ou seja, a fase assume uma variação linear cuja inclinação é dada pelo inverso do comprimento de difusão térmica.

Passagem do caso tridimensional para o caso unidimensional

Tomemos como definição da temperatura do caso unidimensional (T_{1D}) a média da temperatura do caso tridimensional (T_{3D}) sobre a área de incidência da excitação. Esta definição é justificada pelo fato de que, se a difusão de calor é unidimensional (no nosso caso na direção z segundo a figura 1.2), devemos ter uma temperatura uniforme no plano perpendicular ao da propagação da onda térmica a qual é tomada como a média sobre este plano.

$$T_{1D}(z) = \frac{\iint d^2 \overrightarrow{r} \cdot T_{3D}(r, z)}{\iint d^2 \overrightarrow{r}} \qquad (1.47)$$

Considerando o caso de simetria cilíndrica abordado anteriormente, temos que a simetria de T_{3D} (independente de θ) nos permite escrever :

$$\iint d^{2} \vec{r} \cdot T_{3D} = 2.\pi \cdot \int_{0}^{\infty} r \cdot dr \cdot T_{3D} \qquad (1.48)$$

Seja τ_{3D} a transformada de Hankel de T_{3D} segundo as equações (1.20). Temos então que :

$$\tau_{3D}(\mathbf{p}, \mathbf{z}) = 2.\pi \int_{0}^{\infty} \mathbf{r} \cdot d\mathbf{r} \cdot \mathbf{J}_{0}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \cdot \mathbf{T}_{3D}(\mathbf{r}, \mathbf{z}) \Rightarrow \int_{0}^{\infty} \mathbf{r} \cdot d\mathbf{r} \cdot \mathbf{T}_{3D}(\mathbf{r}, \mathbf{z}) = \frac{\tau_{3D}(0, \mathbf{z})}{2.\pi} \quad (1.49)$$

onde usamos que $J_0(0) = 1$

Usando as equações (1.47), (1.48) e (1.49) podemos concluir que :

$$T_{1D} = \frac{\tau_{3D}(0,z)}{\iint d^2 \cdot \vec{r}}$$
 (1.50)

Usando na equação (1.43) que $p = 2.\pi.\beta$ temos que :

$$\tau_{3D}(p,z) = P_0 \cdot e^{\frac{-p^2 \cdot R^2}{4}} \cdot \frac{1}{k,m} \cdot e^{-m.z} \implies \tau_{3D}(0,z) = \frac{P_0}{-i,q,k} e^{i,q,z}$$
(1.51)

onde usamos que $m^2 = p^2 - q^2 \Rightarrow m = -i.q$ para p = 0 (tomar m = +i.q nos levará a uma solução sem sentido físico, pois teremos a temperatura aumentando com z já que $q = (1+i) / \mu$)

Substituindo (1.51) em (1.50) ficamos com :

$$T_{1D} = \frac{P_0}{\iint d^2 \vec{r}} \cdot \frac{e^{i.q.z}}{(-i.q.k)}$$
(1.52)

No caso da difusão de calor unidimensional temos que a potência incidente deve estar uniformemente distribuída por toda a superfície já que a temperatura deve depender apenas de z. A conseqüência disto é que o primeiro fator de T_{1D} em (1.52) não diverge, mas é dado por :

$$\frac{P_0}{\iint d^2 \vec{r}} = I_0 \quad \text{, no limite unidimensional} \qquad (1.53)$$

Usando (1.53) em (1.52) ficamos com :

$$T_{1D} = I_0. \frac{e^{i.q.z}}{(-i.q.k)}$$
 (1.54)

Devemos agora comparar (1.54) com a solução da equação de difusão de calor para o caso unidimensional sem fontes, a qual é dada por :

$$\frac{d^2}{dz^2} \cdot T(z) + q^2 \cdot T(z) = 0 \qquad (1.55)$$

A solução geral de (1.55) é dada por :

$$T(z) = A.exp(i.q.z) + B.exp(-i.q.z)$$
(1.56)

Substituindo $q = (1+i) / \mu$ em (1.56) temos :

$$T(z) = A.e^{-\frac{z}{\mu}}.e^{\frac{i.z}{\mu}} + B.e^{\frac{z}{\mu}}.e^{\frac{-i.z}{\mu}}$$
(1.57)

As condições de contorno serão as mesmas empregadas nos casos anteriores, ou seja, $T(z \rightarrow \infty) = 0$ pois não temos fontes e a onda é amortecida durante sua propagação, e a continuidade do fluxo de calor em z = 0 por simples conservação de energia.

A condição $T(z \rightarrow \infty) = 0$ nos leva a B = 0 e ficamos com

$$T(z) = A.e^{-\frac{z}{\mu}}.e^{\frac{i.z}{\mu}} = A.e^{i.q.z}$$
 (1.58)

Considerando que uma intensidade I_0 atinge uniformemente a superficie z = 0 temos que a continuidade do fluxo de calor neste plano nos leva a :

$$-\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d}z} \mathbf{T}(z)|_{z=0} = \mathbf{I}_0 \implies -\mathbf{k} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{i} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{e}^{\mathbf{i} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{z}}|_{z=0} = \mathbf{I}_0 \implies \mathbf{A} = \frac{\mathbf{I}_0}{-\mathbf{i} \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{k}}$$
(1.59)

onde usamos (1.58) para a expressão de T(z).

A equação (1.59) nos permite escrever, a partir de (1.58), a expressão final para a temperatura unidimensional como :

$$T(z) = I_0. \frac{e^{i.q.z}}{(-i.q.k)}$$
 (1.60)

a qual coincide exatamente com (1.54), demonstrando que o raciocínio que usamos para reduzir o caso tridimensional ao caso unidimensional estava correto.

A temperatura apresenta, mais uma vez, uma queda exponencial da amplitude e uma variação linear da fase com a posição, sendo a inclinação da fase dada pelo inverso do comprimento de difusão térmica.

Capítulo 2

Técnicas fototérmicas de inspeção

2.1) Introdução

A formação de imagem por onda térmica é usada como técnica de análise não destrutiva das camadas próximas à superfície de sólidos opacos.

O que é comum a todas as técnicas fototérmicas é a produção de calor pela amostra devido à interação com um feixe (de luz ou partículas) incidente sobre esta. A absorção do feixe e subsequente relaxação do sistema dão origem a fontes de calor que podem estar distribuídas em largas regiões da amostra ou confinadas a regiões pequenas como a superfície de um sólido opaco. A fonte pode ser periódica ou pulsada originando processos térmicos e/ou acústicos, correspondentemente periódicos ou pulsados, detectáveis.

A detecção pode ser local ou não com vários níveis de intensidade (por exemplo o laser de prova do efeito miragem nos dá um sistema de detecção em linha enquanto um microfone é um detector em área e a microscopia de reflexão faz uma avaliação ponto a ponto).

A simetria dos esquemas de detecção não locais pode dificultar seriamente a análise de certos tipos de defeitos.

A não existência de um tratamento teórico tridimensional completo mostra a sensibilidade das técnicas.

2.2) Resolução espacial na formação de imagem por onda térmica

Dois defeitos próximos serão resolvidos se a superposição de suas imagens térmicas apresentar uma clara indicação de dois extremos. Para imagens de amplitudes comparáveis precisamos que a separação dos defeitos seja, no mínimo, da ordem da largura a meia altura do sinal, de forma a possibilitar a distinção.

A resolução espacial nas técnicas de formação de imagens pode ser obviamente limitada por fatores como defeitos nas lentes ou espelhos de microscópios ou telescópios, baixa qualidade de detectores ou ainda o tamanho da área iluminada em microscopia de varredura. Nós estaremos aqui interessados no limite da resolução espacial imposta pela física básica, ou seja, limites que não podem ser otimizados com um arranjo experimental mais adequado.

A resolução intrínseca de um microscópio é normalmente discutida em termos do "critério de Rayleigh" que limita esta a distâncias da ordem do comprimento de onda da radiação utilizada.

Normalmente os cálculos que levam a este critério usam a aproximação de campo afastado a qual exige que a distância da fonte da onda ao ponto de observação seja grande comparado com o "comprimento de Fresnel" (dado pelo quadrado do tamanho característico da fonte dividido pelo comprimento de onda da radiação). O forte amortecimento das ondas térmicas, no entanto, leva a que elas sejam sempre observadas a distâncias da ordem do seu comprimento de onda ou até menores que ele, ou seja, a aproximação de campo afastado e o "critério de Rayleigh" não são apropriados para o tratamento do espalhamento de ondas térmicas.

A aproximação adequada é a de campo próximo, mas esta pode ser mais facilmente entendida com a apresentação prévia da de campo afastado.

A função de Green para um problema genérico de espalhamento com um tipo de onda não especificado e de número de onda k é dada por :

$$G(\vec{r},\vec{r'}) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}-\vec{r'}}}{\left|\vec{r}-\vec{r'}\right|}$$
(2.1)

(maiores detalhes sobre a função de Green para problemas de espalhamento ou para a equação de Helmholtz podem ser encontrados na referência [2] e nos respectivos capítulos de espalhamento das referências [3] e [4]).

Na equação (2.1) \vec{r} representa o ponto de observação enquanto $\vec{r'}$ indica a posição do centro espalhador (origem sobre a fonte). A usual aproximação de campo afastado considera $\left|\vec{r'}\right| << \left|\vec{r}\right|$. Nesta aproximação substituímos o denominador de (2.1) por r e fazemos a expansão da fase em potências de r'/r. Usemos que : $|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2.r.r'.\cos(\theta)} =$ r. $\sqrt{1 + \left(\frac{r'}{r}\right)^2 - 2.\frac{r'}{r}.\cos(\theta)}$ onde θ é o ângulo entre \vec{r} e $\vec{r'}$.

Assumindo a condição r'/r << 1 podemos expandir $\left| \overrightarrow{\mathbf{r}} - \overrightarrow{\mathbf{r}'} \right|$ em potências de r'/r em torno de 0 ficando com :

$$\left| \overrightarrow{\mathbf{r}} - \overrightarrow{\mathbf{r}} \right| \approx \mathbf{r} \cdot \left\{ 1 - \frac{\mathbf{r}'}{\mathbf{r}} \cdot \cos(\theta) + \mathbf{O}\left(\frac{\mathbf{r}'}{\mathbf{r}}\right)^2 \right\} = \mathbf{r} \cdot \left\{ 1 - \frac{\overrightarrow{\mathbf{r}} \cdot \overrightarrow{\mathbf{r}'}}{\mathbf{r}^2} + \mathbf{O}\left(\frac{\mathbf{r}'}{\mathbf{r}}\right)^2 \right\}$$
(2.2)

A equação (2.1) pode então ser escrita como:

$$G(\vec{r},\vec{r}') \approx \frac{1}{r} \exp\left\{i.k.r.\left[1 - \frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r^2} + O\left(\frac{\vec{r}'}{r}\right)^2\right]\right\}$$
(2.3)

A aproximação mais grosseira no denominador da função de Green do que na sua fase é devida ao fato de que pequenas variações de r' levam a pequenas alterações na amplitude do campo (o ponto de observação é distante, logo a onda não pode ser fortemente atenuada), mas podem chegar a mudar o seu sinal através da fase, ou seja, esta última necessita de uma aproximação melhor. Os casos em que (2.3) é válida (campo afastado) são chamados de "limite de Fraunhofer" os quais nos levam ao "critério de Rayleigh" para a resolução espacial.

O próximo passo na aproximação (2.3), ou seja, tomar termos além do de primeira ordem na expansão da fase, é o chamado "limite de Fresnel" onde o ponto de observação não está tão longe ou a fonte não é tão pequena. O "comprimento de Fresnel" é definido como citado acima (quadrado do tamanho característico da fonte dividido pelo comprimento de onda da radiação) e neste limite ele deixa de ser muito menor que a distância da fonte ao ponto de observação.

No "limite de Fresnel" o denominador da função de Green (2.1) pode, ou não, ser aproximado por termos além do de ordem zero dependendo das características particulares do problema estudado. A aproximação de campo afastado deixa de ser válida quando r é da ordem ou ainda menor que r'. Esta situação é bem difícil de ser atingida em óptica, mas com ondas térmicas ela passa a ser a regra ao invés da exceção devido à forte atenuação da onda em sua propagação pela amostra. Neste caso precisamos de uma aproximação completamente diferente, o limite de campo próximo extremo.

2.3) O limite de campo próximo extremo

Quando a quantidade k. $\left| \overrightarrow{r} - \overrightarrow{r'} \right|$, que define a fase da função de Green

(2.1), é da ordem de 1, ou menor, não é a fase a principal responsável pela formação de imagens e sua resolução. Neste caso é o denominador de (2.1), ou seja, a amplitude, o elemento de maior importância. Torna-se então necessário que o denominador de (2.1) tenha sua variação tratada exatamente e não seja aproximado por r como na aproximação de campo afastado. Isto nos leva a resultados qualitativamente diferentes dos da aproximação de Fraunhofer ou Fresnel . A quantidade, com dimensão de comprimento, que limita a resolução da imagem é agora a distância entre o ponto de observação e o espalhador $(|\vec{r} - \vec{r'}|)$ no denominador de (2.1).

Esta maior dependência da resolução com a profundidade do espalhador do que com o comprimento de onda térmica está mostrado na figura 2.1. Ela mostra, para três valores diferentes de frequência e consequentemente de comprimento de onda térmica, a magnitude do sinal espalhado por duas finas camadas de isolante dentro de uma placa de Al (a 15µm da superficie, separadas por 30µm e com 70µm de espessura como mostrado na figura 2.2). Na figura 2.1 pode-se notar que a variação do comprimento de onda térmica através da frequência praticamente não afeta a resolução do sinal.

A figura 2.2 mostra, para várias frequências de modulação, o resultado experimental da situação calculada teoricamente na figura 2.1. As barras à direita indicam o comprimento de difusão térmica (definido em (1.10)) que é o comprimento de onda térmica dividido por 2π . Fica claro que a resolução dos $30\mu m$ de separação das camadas isolantes é independente do comprimento de onda térmica sendo antes o resultado da convolução dos $15\mu m$ de profundidade das camadas com os $12\mu m$ do tamanho característico
do feixe de aquecimento usado na varredura, o que concorda com a teoria de campo próximo extremo. A curvatura das linhas experimentais para o maior comprimento de difusão térmica é atribuída a processos de espalhamentos múltiplos entre a superficie e as camadas isolantes (os cálculos da figura 2.1 foram feitos para espalhamento simples).



Figura 2.1 - Magnitude do sinal de onda térmica calculada para dois centros espalhadores bem próximos entre si e da superficie. [48]



Figura 2.2 - Magnitude do sinal de onda térmica obtida experimentalmente para a mesma situação tratada na figura anterior[48]

Os resultados apresentados têm forte relação com o fato das camadas isolantes serem perfeitamente planas e posicionadas a uma distância uniforme da superficie. Cálculos e experimentos com as barreiras arredondadas na parte superior levam a resultados que dependem da frequência e consequentemente do comprimento de onda térmica. Isto mostra que a diferença de fase entre a onda espalhada na parte mais profunda e na mais rasa da camada arredondada não é negligenciável. Concluímos que enquanto o limite de campo próximo extremo pode ser caracterizado por estabelecer que o fator $1 / |\vec{r} - \vec{r'}|$ na amplitude de (2.1) tende a determinar a resolução da imagem, a fase do sinal pode também contribuir em algumas geometrias de espalhamento.

2.4) Princípios gerais da formação de imagens

Os constituintes básicos de um microscópio são a fonte de energia, um espalhador desta (amostra) e um detector da radiação espalhada. A formação de imagens exige que a fonte ou o detector seja localizado.

A capacidade do microscópio de separar a radiação espalhada por pontos vizinhos nos dá a sua resolução espacial.

A resolução espacial também dependerá da eficiência das regiões adjacentes à analisada em espalhar a luz e da capacidade do microscópio de localizar a fonte sobre a amostra (foco) ou de restringir a área desta à qual o detector é sensível (levando, em alguns casos, ao uso de vários detectores para formação da imagem).

2.5) Formação de imagem por onda térmica (técnicas)

A formação de imagem por onda térmica geralmente é uma microscopia de varredura com fonte localizada.

As ondas térmicas são, por natureza, fortemente amortecidas praticamente desaparecendo para distâncias da ordem do comprimento de difusão térmica (~ μ m) e por isso podemos desprezar o espalhamento que ocorre a distâncias maiores do que esta. Variando o comprimento de difusão térmica, através da frequência de excitação, podemos limitar o tamanho da região da amostra que contribui para a imagem de cada ponto pesquisado.

Este forte amortecimento das ondas térmicas leva a que as técnicas de formação de imagem que as usam, sejam bastante apropriadas para pesquisar, não destrutivamente, regiões próximas à superfície ($\sim \mu m$ de profundidade) de materiais opacos onde a detecção de defeitos é muito importante.

As várias técnicas de microscopia de onda térmica têm vantagens e desvantagens ligadas à natureza das fontes e dos detectores.

Microscopia fotoacústica

O efeito fotoacústico baseia-se na geração de uma onda de pressão devida à expansão da camada de gás adjacente à amostra causada pela absorção, por esta última, da luz da fonte de excitação. O material estudado passa a funcionar como um pistão acústico pois a expansão periódica da camada gasosa gera ondas acústicas dentro da câmara onde ele está sendo excitado. A detecção usa uma célula de gás com um microfone para captar as variações de pressão no volume que contém a amostra e o gás. A fonte de excitação, no caso da microscopia fotoacústica, é um laser modulado em intensidade o qual varre a superficie do material. A imagem tem então uma fonte pontual e uma detecção em área (o comprimento de onda acústica é tipicamente maior que as dimensões da célula e o detector faz uma média sobre toda a superficie).

Uma vantagem deste esquema é o tratamento teórico simples devido à simetria plana da detecção que ao mesmo tempo que permite o uso da teoria de espalhamento de ondas planas, impede a observação de defeitos verticais (perpendiculares à superfície) constituíndo uma desvantagem.

O limitado intervalo de frequências de modulação (áudio) a ser usado e que por sua vez limita os valores do comprimento de difusão térmica é uma outra desvantagem. A possível necessidade de contato com a superfície da amostra e provável perigo de contaminação da mesma existia quando se usava detectores piezoeléctricos para captação do sinal termoelástico produzido pela incidência de um feixe de elétrons.

Abaixo segue uma figura do arranjo experimental do efeito fotoacústico que difere da microscopia fotoacústica apenas por utilizar como fonte de excitação uma lâmpada de Xenônio ao invés de um laser que varre a superfície da amostra, mas que não tendo nem fonte nem detecção local não pode ser usado para formação de mapas térmicos (esta figura foi gentilmente cedida por Larissa Lima do Espírito Santo)



Figura 2.3 - Arranjo experimental do efeito fotoacústico (1) Lâmpada de arco de Xenônio. (2) Modulador mecânico. (3) Monocromador de varredura. (4) Espelho. (5) Lente biconvexa. (6) Célula fotoacústica com microfone. (7) Amplificador "lock-in".

Efeito Miragem

Um esquema que acaba com o problema do contato com a amostra e reduz a simetria do modelo teórico é o que utiliza o efeito miragem. Temos um feixe de excitação modulado que incide perpendicularmente à superfície da amostra e gera um gradiente no índice de refração do ar que envolve a amostra. A trajetória do feixe de prova sofre, por isso, um desvio no plano perpendicular ao de sua propagação. Este desvio pode ser projetado em uma componente transversal e uma normal (ver ϕ_t e ϕ_n na próxima figura). Aqui a fonte também é localizada, mas a detecção é sobre uma linha e não um plano. O intervalo de freqüências de modulação cresce (até MHz) e defeitos verticais já podem ser localizados.

As desvantagens estão ligadas à necessidade de uma amostra plana (sem rugosidade), à dificuldade no posicionamento dos dois lasers durante a varredura e ao aumento na complexidade do tratamento teórico devido à nova simetria de detecção. Devemos ainda notar que como o feixe prova precisa passar por sobre toda a amostra sem promover interferência com ela precisamos que o feixe não seja extremamente convergente e ficamos limitados a diâmetros da ordem de 50 a 100 µm. Isto prejudica a resolução, pois quanto maior for o diâmetro do feixe de prova maior será a região sobre a qual a detecção faz uma média e mais camuflados ficarão os pequenos defeitos.



Figura 2.4 - Efeito miragem

Radiometria infravermelha

Outra técnica que evita o contato com a amostra é a radiometria infravermelha. A excitação externa é um laser modulado e focalizado sobre a amostra. Um detector de infravermelho, também focalizado, mede as variações locais na temperatura da superfície da amostra (para pequenas variações na temperatura, a lei de Stefan-Boltzman nos dará que o sinal é proporcional a ela) permitindo a localização de defeitos superficiais que são indicados por diferentes valores nesta variação térmica superficial. Neste caso fonte e detecção são pontuais.

Não há dependência do fluxo de calor da amostra para a camada de ar adjacente e consequentemente não existem as complicações introduzidas no tratamento teórico devido ao atraso e amortecimento do sinal na passagem pela interface amostra - ar. A desvantagem é que variações na emissividade da superficie da amostra podem distorcer a imagem.



Figura 2.5 - Diagrama do arranjo experimental da radiometria infravermelha

Podemos citar ainda que a limitação na resolução a dimensões da ordem do comprimento de onda da radiação infravermelha (~ 10 μ m) constitui uma outra desvantagem.

Microscopia fototérmica de deflexão

Na deflexão fototérmica, assim como no efeito miragem, medimos o desvio de um feixe laser de prova. A diferença é que agora este desvio é causado por deformações térmicas da superficie da amostra e não pelo gradiente do índice de refração no ar que envolve o material estudado. Os lasers bomba e prova são focalizados em pontos vizinhos e este último é refletido sob um ângulo que depende da dilatação local da amostra.

As vantagens estão ligadas ao fato da técnica poder ser usada em ambiente de UHV ("ultra high vacuum"). Neste caso, efeitos tipo miragem não precisam ser considerados e diminui-se o perigo de contaminação da amostra.

As desvantagens são que a relação sinal - ruído tem forte dependência com a rugosidade e a refletância da amostra e o tratamento teórico é complicado, pois também as equações termoelásticas do material estudado precisam ser consideradas assim como o efeito miragem no ar que envolve a amostra (no caso do experimento não ser realizado em ambiente de vácuo).

O arranjo experimental é essencialmente igual ao da microscopia fototérmica de reflexão (a qual será abordada mais adiante) só que o detector deve ser sensível à posição de incidência do feixe de prova sobre ele.

Ressonância ferromagnética fototermicamente modulada

Uma técnica de formação de imagens que usa efeito térmico para caracterização das propriedades magnéticas locais, tais como magnetização, constantes de anisotropias magnéticas e tempo de relaxação, é a ressonância ferromagnética fototermicamente modulada. Nela aplica-se um campo magnético contínuo e de intensidade controlável sobre a amostra de modo a separar os níveis de energia dos elétrons por efeito Zeeman. Monitoramos o nível de absorção de microondas (a separação dos níveis de energia é da ordem de microondas) usando um "lock-in" já que um laser, modulado em intensidade, é focalizado sobre a amostra promovendo, devido à variação local de temperatura, uma modulação no nível de absorção de microondas pelo material. A varredura da amostra é conseguida através do uso de um sistema de dois transladores perpendiculares. Esta técnica possui a vantagem de ter fonte local, mas a sua sensibilidade é menor que a da técnica convencional de ressonância ferromagnética. Esta desvantagem está ligada ao fato do nível do sinal ser proporcional à área termicamente excitada e ao fator de qualidade da cavidade ressonante na qual a amostra está inserida. Nesta técnica a cavidade precisa ser aberta para permitir a entrada do feixe de laser o que reduz o seu fator de qualidade.

Abaixo segue uma figura do arranjo experimental da ressonância ferromagnética fototermicamente modulada (esta figura foi gentilmente cedida por Larissa Lima do Espírito Santo)



Figura 2.6 - Arranjo experimental da Ressonância Ferromagnética Fototermicamente Modulada. (1) Controlador do campo magnético e amplificador "lock-in". (2) Eletroimã. (3) "Klystron". (4) Guia de onda. (5) Frequencímetro digital. (6) Fonte de alimentação do eletroimã. (7) Microcomputador. (8) Controlador dos motores de passo. (9) Laser de excitação. (10) Modulador.

Espectroscopia de lente térmica

Uma técnica que é usada para caracterização das propriedades térmicas de materiais, mas que usualmente não é empregada para formação de imagem, é a lente térmica. Ela permite a determinação da difusividade e da condutividade térmica do material.

Nesta técnica um laser de prova incide sobre a amostra e um detector é posicionado atrás desta para coletar a radiação transmitida. Um pulso do laser de aquecimento (da ordem de ms de duração) atravessa o material estudado e a distribuição gaussiana da intensidade deste laser estabelece um gradiente de índice de refração na região da amostra onde o laser de prova incide. Este gradiente de índice de refração promove um efeito de lente térmica fazendo com que o feixe de prova divirja ou convirja. O detector, cuja área sensível é menor que o tamanho do feixe prova sobre ele, registrará uma variação na intensidade de luz coletada durante a passagem do feixe de aquecimento pela amostra.

A espectroscopia de lente térmica pode ser usada para pesquisar materiais sólidos, líquidos ou gasosos desde que estes não sejam opacos. Ela tem, ainda, alta sensibilidade na determinação da absorção óptica do material sendo usada para análise de contaminação da amostra através de curvas padrão (análise de ultra-traços).

Segue uma figura com o arranjo experimental da lente térmica (esta figura foi gentilmente cedida por José Roberto Dias Pereira).



Figura 2.7 - Arranjo experimental da Espectroscopia de Lente Térmica

Microscopia fototérmica de reflexão

Por último vamos falar da microscopia fototérmica de reflexão. Esta técnica baseia-se na variação do índice de refração da amostra devido à variação local de sua temperatura. Usamos como fonte de excitação o funcionamento modulado da amostra ou um laser bomba (geralmente um laser de Ar⁺ operando em regime modulado) que é focalizado, através de um microscópio óptico de reflexão, sobre a amostra no mesmo ponto do laser sonda empregado em regime contínuo de operação (ambos incidem sobre um mesmo eixo). O aquecimento modulado da amostra induz uma variação no índice de refração local desta. O resultado disto é a variação da quantidade de luz do laser sonda que é refletida. Um fotodetector, acoplado a um amplificador "lock-in", registra as variações na reflexão do laser sonda que ocorrem na mesma frequência da excitação.

Nesta técnica a região sensível do fotodetector deve ser maior que a parte iluminada pelo laser sonda, pois não estamos interessados nos desvios que este feixe laser possa sofrer.

Usando um sistema de motores de passo acoplados perpendicularmente podemos varrer a superficie da amostra e formar mapas associando a cada ponto o valor do sinal obtido (amplitude do sinal ac, fase do sinal ac ou sinal dc). O sinal ac amplificado pelo "lock-in" é tipicamente da ordem de μ V enquanto o sinal contínuo é da ordem de V. Este último é obtido ligando-se o fotodetector diretamente ao conversor a/d acoplado ao computador.

As principais vantagens da técnica estão ligadas ao fato dela ser não destrutiva, da possibilidade de utilização da operação da amostra como fonte de excitação (o que permite uma investigação em condições próximas ao do seu funcionamento modulado) e à simplicidade de seu tratamento teórico e do arranjo experimental empregado (a menos de particularidades da amostra).

As desvantagens da técnica são que ela só pode ser usada para pesquisa de materiais opacos e as rugosidades na superfície estudada podem prejudicar a qualidade do sinal obtido.

Abaixo seguem os esquemas dos arranjos experimentais usados na microscopia fototérmica de reflexão (as figuras foram gentilmente cedidas por Jerias Alves Batista).



Figura 2.8 - Arranjo experimental da microscopia fototérmica de reflexão usando um laser de Ar^+ como excitação



Figura 2.9 - Arranjo experimental da microscopia fototérmica de reflexão usando a operação da amostra como excitação

Capítulo 3

Lasers de semicondutor

3.1) Como funciona um laser de semicondutor

Dispositivo fotônico é todo aquele onde o fóton desempenha o papel mais importante. Estes dispositivos podem ser agrupados em três categorias : 1) os que convertem energia elétrica em radiação óptica (ultravioleta, visível, infravermelho) como o LED ("light-emitting diode") e o laser ("light amplification by stimulated emission of radiation"); 2) os que detectam sinais ópticos através de processos eletrônicos como os fotodetectores; 3) os que convertem radiação óptica em energia elétrica como as células solares.

O processo de geração de luz por um material é chamado luminescência e quando a excitação deste é feita via um campo elétrico temos a eletroluminescência, para o caso de excitação óptica temos a fotoluminescência e para o caso de um feixe de elétrons temos a catodoluminescência (incandescência é a simples excitação térmica).

Fluorescência é a luminescência que ocorre durante a excitação e fosforescência é a que persiste após ela.

Um laser de semicondutor é basicamente um diodo elétrico onde as camadas semicondutoras devem controlar bem o fluxo de elétrons e fótons sendo muito finas ($\sim 10 - 100$ nm) e de grande qualidade cristalográfica. Estas camadas são produzidas a partir de crescimento epitaxial de ligas de elementos das famílias III e V (ou II e VI) da Tabela Periódica e por isso são chamadas de compostos III-V (ou II-VI).

Os lasers de semicondutor são, atualmente, a principal fonte de sinal nos sistemas de comunicações ópticas.

3.1.1) A junção p-n

Nos semicondutores existem duas regiões, no espaço das energias, que separam os elétrons responsáveis pelo fenômeno da condução elétrica daqueles que não participam deste processo. Os primeiros estão localizados na chamada banda de condução e os últimos na chamada banda de valência. Separando estas duas bandas de energia existe um "gap" (ΔE) de tal forma que se um elétron na banda de valência recebe energia suficiente para fugir de sua banda e vencer o "gap" ele passa para a banda de condução. A ausência do elétron que se forma na banda de valência após este processo pode ser tratada como uma partícula chamada "buraco".

Temos então a formação de uma corrente de cargas negativas na banda de condução (elétrons) e outra de cargas positivas na banda de valência (buracos) quando o semicondutor é submetido a uma diferença de potencial suficiente formando a corrente elétrica.

Outro fenômeno importante é quando um elétron que está na banda de condução volta à banda de valência emitindo um fóton que corresponde à perda de energia necessária para que ele ocupe um estado de menor energia, e antes desocupado, na banda de valência.

Os semicondutores podem conter impurezas, propositadamente colocadas, tais que o efeito delas seja aumentar o número de buracos na banda de valência, e dizemos que o semicondutor é dopado tipo p, ou aumentar o número de elétrons na banda de condução, e dizemos que o semicondutor é dopado tipo n.

Os lasers de semicondutor são compostos essencialmente de uma camada dopada tipo n, e à qual se aplica uma voltagem negativa, e uma outra dopada tipo p, à qual se aplica uma voltagem positiva criando um fluxo de corrente na junção entre estas camadas (junção p-n). Esta é a essência do funcionamento do diodo elétrico que funciona como laser de semicondutor.

3.1.2) Recombinação radiativa

A figura 3.1 mostra um esquema das transições básicas, com perda de energia pelos elétrons, em semicondutores (círculos cheios representam elétrons e vazios buracos). Estas transições podem ser classificadas em três grupos :

1) o primeiro tipo é o das transições interbandas

a) intrínsecas, que são aquelas que envolvem energias próximas à de "gap"

b) alta energia, onde a energia envolvida é maior que a de "gap"

2) o segundo tipo é o que envolve níveis de impureza

a) da banda de condução para o nível de aceitador

- b) do nível de doador para a banda de valência
- c) do nível de doador para o de aceitador

d) envolvendo níveis profundos3) o terceiro tipo é o das transições intrabanda



Figura 3.1 - Transições básicas em semicondutores[22]

Nem todas estas transições podem ocorrer em um mesmo material ou sob as mesmas condições.

A maior concentração de elétrons e de buracos na junção p-n favorece a recombinação (elétrons que passam da banda de condução para a de valência perdendo energia), pois os buracos são estados desocupados na banda de valência.

Esta recombinação pode ocorrer de duas formas principais: com o elétron perdendo energia sob forma de calor (recombinação não radiativa), sendo de maior probabilidade em semicondutores como Si e Ge, ou com o elétron perdendo energia sob a forma de fóton (recombinação radiativa), com maior probabilidade nos compostos III-V de "gap" direto.

O "gap" de energia, e consequentemente o espectro de emissão das recombinações radiativas, depende da composição da liga. A tabela 3.1 resume o "gap" e a composição das ligas mais usadas na fabricação de lasers devido a suas propriedades de luminescência.

Compostos	Emissão (vm)	Substrato
GalnP	0,67	GaAs
GaAlAs	0,62-0,895	GaAs
GaAs	0,904	GaAs
InGaAs	0,98	GaAs
InGaAsP	1,1-1,65	InP
InGaAsSb	1,7-4,4	GaSb

Tabela 3.1- Principais compostos comumente utilizados na fabricação de diodos laser, o comprimento de onda de emissão e a liga utilizada como substrato para o crescimento epitaxial. [20]

Os processos de recombinação radiativa estão em competição direta com os processos de recombinação não radiativa (eles ocorrem simultaneamente), para uma dada energia de excitação. A eficiência quântica n_q é a fração de portadores excitados que se recombinam radiativamente em relação ao número total de recombinações e é dada por :

$$n_{\rm q} = \frac{R_{\rm r}}{R} = \frac{\tau_{\rm nr}}{\tau_{\rm nr} + \tau_{\rm r}} \qquad (3.1)$$

onde :

 $*\tau_{nr}$ é o tempo de vida não radiativo

 $\tau_r \neq 0$ tempo de vida radiativo

*Rr é a taxa de recombinação radiativa

*R é a taxa de recombinação total

A taxa de recombinação total e o tempo de vida estão relacionados em uma camada tipo p e em uma camada tipo n respectivamente por :

$$R = \frac{(n - n_0)}{\tau} \qquad (3.2)$$

$$R = \frac{(p - p_0)}{\tau} \qquad (3.3)$$

onde :

 ${}^{*}n_{0}$, p_{0} são respectivamente as concentrações de elétrons e de buracos no equilíbrio térmico

*n, p são análogas às anteriores só que para uma situação fora do equilíbrio térmico.

O tempo de vida total do portador minoritário é dado por :

$$\tau = \frac{\tau_{\rm r} \cdot \tau_{\rm nr}}{(\tau_{\rm r} + \tau_{\rm nr})}$$
(3.4)

já que os processos radiativos e não radiativos ocorrem em paralelo.

A equação (3.1) mostra que é necessário um tempo de vida radiativo bem menor que τ_{nr} para se obter uma boa eficiência quântica.

3.1.3) A emissão estimulada

Existem três processos interbandas de interação entre um fóton e um elétron em um sólido. Um fóton pode ser absorvido pela transição de um elétron da banda de valência para um estado desocupado na banda de condução. O fóton pode também estimular a emissão de um outro fóton idêntico através de uma transição no sentido inverso da descrita anteriormente (emissão estimulada). Um elétron pode ainda passar espontaneamente da banda de condução para a um estado vazio na banda de valência com emissão de um fóton (emissão espontânea).

A recombinação radiativa ocorre em diodos emissores de luz (LEDs) e diodos laser.

Nos diodos laser as faces paralelas do cristal são espelhos que promovem a oscilação da luz dentro do cristal e a emissão laser. A emissão envolve os processos de inversão de população de elétrons e buracos na junção devido à corrente injetada (este processo será abordado mais adiante).

As faces especulares são obtidas por clivagem ou polimento do cristal e refletem a luz de volta dentro deste. A oscilação da luz promove recombinações radiativas na região ativa (junção) e torna mais eficiente a transformação de energia elétrica em luminosa amplificando esta última através da emissão estilmulada.



Figura 3.2- Esquema genérico de um laser de semicondutor, mostrando a posição dos espelhos (faces clivadas) e da região ativa. [20]

3.1.4) A corrente de limiar

Corrente de limiar é a corrente mínima injetada no diodo para que a emissão estimulada vença as perdas na cavidade ressonante e haja emissão laser. Ela corresponde ao "bico" no gráfico da figura 3.3.



Figura 3.3- Curva da potência óptica (W) versus corrente injetada típica de um diodo laser, mostrando onde são medidas as principais figuras de mérito. [20]

Quanto menor for a corrente de limiar menos energia elétrica será dissipada como calor e consequentemente mais qualidade terá o diodo laser.

A eficiência diferencial externa (W/A) é a inclinação da curva após a corrente de limiar e é uma medida da taxa de conversão da corrente elétrica injetada em energia luminosa. Ela, junto com a corrente de limiar, formam as principais figuras de mérito na análise da qualidade do diodo laser.

3.2) Evolução das estruturas utilizadas na fabricação de diodos laser

O quadro seguinte fornece um resumo dos tipos de laser de semicondutor.



Figura 3.4- Evolução dos diodos laser, separados em três categorias: por tipo de guiamento, tipo de confinamento e tipo de camada ativa. [20]

3.2.1) Laser de heterojunção

Os diodos laser podem ser classificados de acordo com as características das camadas que limitam a camada ativa em:

- <u>Diodos de homojunção</u>: As camadas são da mesma liga (GaAs por exemplo). Este tipo de diodo laser possui alta corrente de limiar e operação pulsada trabalhando à temperatura ambiente ou baixa temperatura (foram os primeiros diodos laser a serem usados)

- <u>Diodos de heterojunção simples</u>: Faz-se uma heterojunção tipo p-n com camadas de ligas diferentes (GaAs e GaAlAs por exemplo). As propriedades elétricas e ópticas distintas das camadas favorecem o confinamento de portadores e fótons, mas a operação ainda é pulsada. Consegue-se alta intensidade emitida à temperatura ambiente.

- <u>Diodos de heterojunção dupla</u>: Um exemplo deste tipo de heterojunção seria uma camada ativa de InGaAsP entre duas de InP sendo uma tipo p e outra tipo n. O "gap" menor e o índice de refração maior na região ativa favorecem o confinamento dos portadores de carga e fótons nela. A corrente de limiar diminui e permite-se operação contínua e à temperatura ambiente (estes serão os diodos tratados neste capítulo).

3.2.2) Peculiaridades dos lasers de semicondutor

As dimensões reduzidas dos lasers de semicondutor (caracteristicamente 0,3 mm de comprimento), assim como regiões ativas e camadas confinantes com espessura total da ordem de 1 μ m geram a alta divergência do feixe que lhes é característica.

As principais propriedades são dependentes das características da junção, sendo então controláveis no processo de fabricação, como "bandgap" e índice de refração.

A passagem de corrente modulada pela junção p-n gera modulação na emissão do laser e como o tempo de vida do portador é muito pequeno podemos conseguir altas freqüências na operação do dispositivo (até MHz).

3.3) Laser de semicondutor com estruturas quânticas

Seja o diodo laser de heterojunção dupla formada por uma fina região de GaAs limitada em ambos os lados por camadas de $Ga_{1-x}Al_xAs$ dopados convenientemente para funcionar como confinante de elétrons e buracos como mostrado na figura 3.5.

Se a espessura da camada ativa é d < 200 angstrons surgem efeitos quânticos no comportamento de elétrons e buracos. Os níveis de energia e as funções de onda, na camada ativa, dependem fundamentalmente de "d" e os laser assim formados são conhecidos como laser de poço quântico (QW laser).



Figura 3.5 - Típica heteroestrutura dupla de GaAs-GaAlAs. Frequências próximas de $v = E_g / \hbar$ são amplificadas por recombinação elétron-buraco estimulada.[21]



Figura 3.6 - A estrutura das camadas e níveis das bandas de energia de um QW laser tipo GaAlAs/GaAs/GaAlAs.[21]

A espessura da camada ativa diminui o número de portadores necessários para obtenção de uma densidade de estados suficiente para o início da atividade laser, ou seja, a pequena espessura da camada ativa diminui a densidade de corrente de limiar do diodo laser tipo QW se comparado com os lasers de semicondutor convencionais.

Detalhes do cálculo dos níveis de energia do poço de potencial são dados no apêndice 4.

3.3.1) Baixa corrente de limiar

A figura 3.7 mostra o efeito de se ligar uma bateria em um laser de semicondutor **convencional**. O polo negativo é conectado na parte dopada n e o positivo na parte dopada p. Isto faz aumentar a concentração de elétrons na banda de condução da camada ativa (aumentando E_{Fc} que é o nível de Fermi para a banda de condução) e a de buracos na banda de valência da mesma camada (diminuindo E_{Fv} que é o nível de Fermi para a banda de $V_a = E_{Fc} - E_{Fv}$.



Figura 3.7 - Bandas de condução e valência em um diodo laser de heterojunção dupla tipo GaAlAs/GaAs/GaAlAs.[21]

O espaço das energias neste laser de semicondutor **convencional** fica como representado na figura 3.8 (para T = 0 K, semicondutor puro e de "gap" direto) onde dizemos que houve inversão de população em relação à situação de equilibrio na qual todos os estados de condução estariam vazios e os de valência cheios (ocupados por elétrons) para T = 0 K. A passagem de um fóton de energia $\hbar \omega$ pode gerar três situações diferentes: a) $\hbar \omega < E_g$: não há absorção nem emissão estimulada b) $E_g < \hbar \omega < E_{Fc} - E_{Fv}$: há emissão estimulada (amplificação do sinal) c) $E_{Fc} - E_{Fv} < \hbar \omega$: há absorção



Figura 3.8 - Espaço de energia de um semicondutor. Pontos vazios representam estados desocupados e pontos cheios representam estados preenchidos.[21]

Suponha que a energia do fóton seja tal que a condição a) não se verifica. A bateria só passa a "leisar" o semicondutor quando a condição c) é superada (aumentando E_{Fc} e diminuindo E_{Fv}) e atingimos b).

A maior parte da corrente de limiar (80%) é gasta para que b) seja atingida (superando c)) e apenas 20% é para vencer outros tipos de perda.

No laser de poço quântico a quantização dos níveis de energia favorece uma corrente de limiar menor, pois atinge-se $eV_a=E_{Fc}-E_{Fv}$ com o valor necessário para atividade laser com menor corrente já que são necessários menos elétrons para ocupar os níveis de energia superiores. O aumento da refletividade nas junções da camada ativa também diminui a corrente de limiar pois favorece o confinamento dos fótons nesta região.

3.3.2) Estruturas QW multidimensionais

As estruturas estudadas até aqui apresentam um confinamento dos portadores para uma das três dimensões (apenas duas estão livres). Existem também estruturas quânticas onde os portadores têm duas dimensões de confinamento (fios quânticos ou "quantum wires") e até onde o confinamento se dá nas três dimensões (pontos quânticos ou "quantum dots").

A figura 3.9 mostra um esquema destas estruturas e as respectivas densidades de estados.



Figura 3.9 - Estruturas de poço quântico multidimensionais e suas densidades de estados como função da energia[26]

3.4) Principais tipos de lasers de semicondutor

Inicialmente os lasers de semicondutor eram todos recobertos por metal (500x500 μ m²) e eram chamados lasers de área larga. As imperfeições na camada ativa e a largura da região de fluxo faziam com que apenas algumas partes da região ativa fossem responsáveis pela emissão e uma alta corrente de limiar fosse requerida (~ 100mA)

3.4.1) Lasers de contato de faixa

Fazendo-se um isolamento elétrico na superficie do diodo a menos de uma estreita faixa ($\sim 1 - 10 \mu m$), o "stripe", onde há o contato e a passagem da corrente injetada, que fica então confinada, conseguimos diminuir a largura da região de emissão na camada ativa.

Há confinamento de fótons e controle da região de inversão de população com guiamento óptico por ganho.

A diminuição da faixa de contato permitiu diminuir a corrente de limiar (< 100mA) e aumentar a eficiência externa dos lasers.

O guiamento óptico é fraco e é difícil conseguir um único feixe estável com estas estruturas.



Figura 3.10 - Esquema de uma estrutura laser de contato de faixa com guiamento por ganho. [20]

3.4.2) Lasers com guiamento por índice

A camada ativa fica envolta em camadas de menor índice de refração. Quanto maior for a diferença entre os índices melhor será o confinamento óptico. Imagine que a região 1, com índice de refração n_1 , seja a região ativa e a região 2, de índice de refração n_2 , uma de suas vizinhas. A lei de Snell nos dá que :

$$n_1.sen(\theta_1) = n_2.sen(\theta_2)$$



Para que a luz não escape da região 1 devemos ter θ_2 igual a 90⁰. Neste caso a lei de Snell fica :

$$n_1.sen(\theta_c) = n_2 \implies \theta_c = arcsen(n_2 / n_1)$$

que é o ângulo de incidência a partir do qual a luz é refletida de volta para a região ativa. Note que quanto maior n_1 em relação a n_2 menor será θ_c e consequentemente uma maior parte da luz ficará confinada na região ativa.

O resultado disso tudo é uma maior estabilidade para o feixe, se comparado com as estruturas de contato de faixa, conseguindo-se também uma menor corrente de limiar (já que mais fótons serão usados na emissão estimulada) e maior eficiência na conversão eletro-óptica.

A seguir apresentamos alguns exemplos deste tipo de estrutura que é muito usada em telecomunicações.

3.4.2.1) Lasers "ridge"

Após o crescimento forma-se uma mesa sobre a região ativa e removese o material da camada confinante não protegida até poucos décimos de micra da camada ativa.

A diminuição da espessura da camada confinante nas laterais da mesa provoca um aumento no confinamento lateral da luz laser (diferença entre os índices de refração da camada ativa e do ar).

As figuras de mérito são otimizadas devido ao melhor guiamento óptico, sua fabricação é simples e sua baixa capacitância favorece sua utilização como laser de sinal com altas taxas de transmissão (Gigabits/s) em telecomunicações.



Figura 3.11 - Esquema de uma estrutura laser do tipo ridge. [20]

3.4.2.2) Lasers com camada ativa enterrada ("buried lasers")

A camada ativa fica completamente envolta por camadas semicondutoras de menor índice de refração. Primeiro cresce-se a estrutura padrão de camadas confinantes paralelas à junção p-n e forma-se uma tira (espessura entre 1 e 3µm de uma região protegida do ataque químico sobre o material) e cresce-se nova camada paralela à junção p-n "enterrando" a tira e promovendo o guiamento da emissão laser. Neste segundo crescimento constroe-se junções p-n reversas e camadas semi-isolantes para confinar o fluxo de corrente (com isto se consegue correntes de limiar da ordem de algumas dezenas de miliamperes)

3.4.2.2.1) Lasers DCPBH

Estas são as chamadas heteroestruturas enterradas de duplo canal (ou simplesmente DCPBH).

Após o crescimento da heterojunção cria-se uma mesa com dois canais paralelos envolvendo a camada ativa que serão preenchidos com confinantes de fótons e de corrente.

A corrente de limiar fica da ordem de uma dezena de miliamperes e a eficiência externa vale tipicamente 0,2W/A (esta é uma excelente estrutura para uso em telecomunicações).



Figura 3.12 - Esquema de um laser tipo DCPBH. [20]

3.4.2.2.2) Lasers tipo "buried crescent"

Cresce-se as camadas de bloqueio e confinamento lateral e com um ataque químico forma-se um V que vai até o substrato e sobre o qual se cresce a heterojunção deixando a camada ativa com a forma de uma lua crescente.

O guiamento por índice e o excelente confinamento elétrico permitem altas correntes de operação sendo usados como lasers de potência em telecomunicações (emissão em 1,48µm) bombeando amplificadores ópticos a fibra dopada com Érbio.



Figura 3.13 - Esquema de um laser tipo "buried crescent" [20]

3.4.3) Lasers monomodo

A camada confinante logo abaixo da região ativa possui enrugamentos obtidos por holografia. A variação periódica do índice de refração dá lugar a interferências construtivas que selecionam o modo de operação do laser (equivalendo à cavidade Febry-Perot dos outros lasers).

Estes lasers são chamados DFB ("distributed-feedback").

Nas outras estruturas o comprimento de onda de emissão depende da energia de "gap" que varia com a temperatura. Nos lasers DFB o comprimento de onda vai variar com o índice de refração cuja dependência com a temperatura é bem mais fraca.

Consegue-se menor dispersão (modo mais estreito) e maior estabilidade modal.



Figura 3.14 - Imagem de microscopia eletrônica da face lateral de um laser DFB (que opera monomodo)[20]



Figura 3.15 - Esquema de um laser DFB (monomodo). [20]

3.4.4) Tipos de lasers de estruturas quânticas

Quando a camada ativa é espessa temos que a energia dos fótons liberada na recombinação de portadores é função da composição da liga da camada ativa, mas quando esta espessura é menor que 20nm e usamos compostos semicondutores das famílias III-V a energia passa a ser função da espessura da camada ativa, de sua composição e da composição e espessura das camadas confinantes (a energia dos portadores passa a ser quantizada).

O comprimento de onda da emissão fica bem controlado, a eficiência na conversão eletro-óptica aumenta e a corrente de limiar diminui.

Inicialmente eram os chamados SQW ("single quantum well") formados por uma fina camada ativa entre duas confinantes com "gap" maior, mas o confinamento de fótons e de portadores era muito ruim.

3.4.4.1) Lasers de poço quântico com confinamento separado

Como o próprio nome sugere nestas estruturas o guiamento óptico e o confinamento de portadores se dão em regiões separadas.

A figura seguinte mostra as camadas, as energias de "gap", os índices de refração e a distribuição de intensidade de luz na direção perpendicular ao plano da região ativa para um laser de confinamento separado, mas que não é de poço quântico.



Figura 3.16 - Representação esquemática do "gap" de energia, índice de refração e intensidade de luz para um laser de confinamento separado.[22]

O degrau em E_g entre a camada de GaAs e as de $Al_{0.1}Ga_{0.9}As$ é suficiente para confinar os portadores dentro da camada de GaAs e espessura d. O degrau em índice de refração, no entanto, não é suficiente para o confinamento da luz aí. O desnível maior entre as camadas de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ e $Al_{0.1}Ga_{0.9}As$ é o que consegue promover o confinamento óptico tendo o guia de onda, neste caso, uma espessura w.

Um melhor controle durante o crescimento epitaxial permite que a camada intermediária seja crescida com uma composição variada (por exemplo uma camada de GaAlAs que começa com 20% de Al e termina com 50%) causando uma alteração gradual no "gap" e no índice de refração entre o poço quântico e a camada confinante propriamente dita.

Estas estruturas são chamadas GRIN-SCH ("graded index separate carrier and optical confinement heterostructure").

O rendimento é muito bom e pode ser melhorado se construímos a região ativa com vários poços extremamente finos (MQW)



Figura 3.17 - Esquema dos "gaps" de energia de cada uma das camadas que formam uma estrutura quântica do tipo GRIN-SCH à base de GaAlAs-GaAs. [20]

3.4.4.2) Estruturas laser de poço quântico tensionado

Quando o parâmetro de rede das camadas epitaxiais crescidas sobre um substrato está fora do limite de variação de 0,1% do parâmetro de rede deste último temos que a pressão exercida pela rede cristalina do substrato deforma a camada crescida.

Espessuras abaixo de 10nm suportam, com deformação elástica, diferenças de parâmetro de rede de até 1% sem gerar defeitos cristalinos e a energia dos poços quânticos passa a ser também função da tensão exercida sobre eles (o comprimento de onda de emissão passa a ser função da

composição da camada ativa, da sua espessura e da tensão exercida sobre ela pelo substrato).

Estas estruturas permitiram alcançar comprimentos de onda de emissão da ordem de 0,98µm que são muito bons para processos de bombeio de amplificadores ópticos à fibra dopada com Érbio (isto é conseguido com camada tensionada de GaInAs com 10nm de espessura e envoltas em camadas de GaAs e GaAlAs)



Figura 3.18 - Esquema do "gap" de energia das camadas do laser que emite em 0,98µm [20]

3.5) Degradação do laser

Os três principais tipos de degradação dos diodos laser são : (1) degradação catastrófica ("catastrophic degradation"); (2) formação de linhas escuras ("dark-line"); (3) degradação gradual.

Na degradação catastrófica, o espelho do laser, quando submetido a altas potências de operação, é permanentemente danificado. O aquecimento da superficie pela qual a luz é emitida (espelho) aumenta a absorção nesta região. O crescimento da absorção superficial e o encurtamento do "gap" de energia aquecem o dispositivo e o processo é realimentado. Isto tudo ocorre quando o laser atinge uma temperatura crítica que é indicada por um estreito pico em um gráfico da evolução temporal da temperatura do espelho e por uma queda abrupta da potência emitida. Este tipo de defeito é chamado COMD ("catastrophic optical mirror damage").

Modificações no dispositivo visando a diminuição das recombinações e absorções na superfície aumentam o limite da potência na qual ocorre o dano (nota-se que um escoamento de calor eficiente no dispositivo é de vital importância).

O defeito de linha escura ("dark-line defect") é um conjunto de discordâncias que podem se formar durante a operação do laser (ou durante sua fabricação) deformando a cavidade óptica. Uma vez começado, ele pode se expandir em poucas horas levando a um aumento da densidade de corrente de limiar. O crescimento de camadas de alta qualidade sobre substratos com pequenas densidades de discordância reduz o problema, assim como uma solda cuidadosa do dispositivo em um bom dissipador de calor reduz as chances de um aquecimento localizado.

Capítulo 4

Arranjo experimental e amostras

4.1) Introdução

O arranjo experimental que nós utilizamos para a realização das medidas é mostrado na figura 4.1. Primeiramente vamos descrever o arranjo para o caso geral de amostras aquecidas por um laser modulado (figura 2.8); depois mostraremos o arranjo para o caso mais específico de amostras ativas, ou seja, amostras para as quais podemos utilizar uma fonte de corrente como alimentação para o dispositivo e excitação para as medidas, como é o caso dos lasers estudados.

4.2) Equipamentos

Inicialmente um laser polarizado de Ar⁺ (figura 2.8), com comprimento de onda $\lambda = 514,5$ nm, é focalizado sobre um modulador acústico-óptico (A-O) através de uma lente convergente. Após passar pelo modulador, o feixe é convergido por outra lente para um diafragma, sendo que apenas a primeira ordem de difração é selecionada. O feixe é desviado para um espelho dicróico e focalizado sobre a superficie da amostra através de um microscópio óptico de reflexão. Em todos os casos consideraremos somente incidência normal. O microscópio possui 4 objetivas com ampliações de 5x, 10x, 20x e 50x. Nós usamos, a menos de quando explicitado, a objetiva de 50x por ser esta a de maior abertura numérica (N.A. = 0,75), e a que nos proporciona um feixe com menor diâmetro sobre a amostra. Com esta montagem nós conseguimos um feixe com diâmetro de aproximadamente 1µm sobre a superfície da amostra. O laser de Ar⁺ funciona como uma fonte de aquecimento para a amostra (laser bomba). O laser bomba opera moduladamente, de modo que a temperatura na amostra terá uma componente modulada devido à absorção de fótons na sua superfície. Para os nossos propósitos, as variações na frequência de modulação estão compreendidas no intervalo que vai de 100kHz a 10MHz (para este tipo de excitação). Para analisar a variação local do índice de refração da amostra, usamos um laser diodo emitindo continuamente em 670nm com 10mW de
potência na saída; este laser (sonda ou de prova) é acoplado à entrada fotográfica do microscópio.

Após passar por um cubo que separa feixes com polarizações diferentes, pelo espelho dicróico e por uma lâmina de quarto-de-onda, o feixe sonda é focalizado na superfície da amostra por meio do microscópio. Ambos os feixes (bomba e prova) são coincidentes sobre a amostra e possuem aproximadamente o mesmo diâmetro.

O feixe de prova sofre uma pequena modulação na sua intensidade refletida devido à variação do índice de refração da amostra induzida pela absorção do feixe bomba modulado. Após ser refletido pela amostra, o feixe de prova passa novamente através da lâmina de quarto-de-onda; como sua polarização foi alterada em 90° com respeito ao feixe que vem do laser sonda, ele é então desviado pelo cubo separador de polarização ("polarize splitter") e é focalizado sobre um fotodetector através de uma lente convergente (fica evitado o retorno da radiação do laser de prova sobre seu dispositivo origem). O fotodetector tem resposta em freqüência suficiente para altas freqüências de modulação na intensidade do feixe de prova refletido (até 125MHz).

Para evitar interferências provenientes de possíveis reflexões do feixe bomba na superficie da amostra e nas lentes, o fotodetector é protegido por um filtro que é opaco à luz verde e transparente à luz vermelha. O feixe é cuidadosamente posicionado de tal modo que o seu diâmetro na superficie do fotodetector seja menor do que a célula ativa; com este cuidado nós evitamos os efeitos das pequenas variações que geralmente ocorrem na espessura do feixe e ainda das reflexões em ângulos diferentes do normal à superficie da amostra devido a efeitos de lentes térmicas e deformações termoelásticas da sua superficie. Nós estamos interessados somente na modulação da intensidade do feixe prova, ou seja, na variação da refletância da amostra. O sinal de saída do fotodiodo é analisado por um amplificador "lock-in" de alta freqüência (0.1-50 MHz, modelo EGG 5202), capaz de detectar variações na refletância da ordem de 10⁻⁶ no intervalo de freqüências estabelecido.

Para varrer a superficie da amostra com os feixes bomba e prova, fazemos uso de um sistema de translação x-y, que é capaz de produzir deslocamentos mínimos (passos) de 0,1 μ m. Um computador controla a posição da amostra e faz a leitura do sinal analisado pelo amplificador "lockin" armazenando as componentes contínua (R) e alternada (ΔR) do sinal. A componente contínua é proporcional à refletância R da amostra no comprimento de onda do feixe de prova. Desta forma podemos obter os valores experimentais de $\Delta R R$. Quando trabalhamos especificamente com dispositivos eletrônicos (transistores, resistores, diodos, lasers, etc), além do arranjo descrito acima, ao invés de usar o laser bomba, podemos produzir ondas térmicas na amostra utilizando a própria corrente de polarização do dispositivo. O sinal fototérmico não está mais associado à absorção de fótons de um feixe externo de laser modulado mas sim às perdas Joule nas estruturas do componente e aos processos de recombinações não radiativas na amostra.

No nosso caso, este foi o tipo de medida que usamos. A corrente que alimentava a amostra tinha a forma : $I(t) = I_{dc} + I_{ac}.[(1+sen(2\pi.f.t))/2]$ onde I_{dc} e I_{ac} representam a corrente contínua e a amplitude da modulada respectivamente, f é a frequência de modulação e t é o tempo. A corrente dc foi sempre mantida em torno de 5mA.

Na figura 4.1 temos o arranjo usado no estudo de nossas amostras que é essencialmente equivalente à figura 2.9. Primeiramente tomamos o cuidado de evitar que a radiação do laser amostra (980 nm) incida sobre o detector e sobre o diodo laser sonda; para isto colocamos um filtro tipo KG3 (Newport) na entrada da ocular fotográfica do microscópio, outro na frente do fotodetector e um filtro tipo KG2 (Newport) na saída do laser sonda. Tudo isto procura evitar que a emissão do laser de prova seja modulada pela radiação da amostra e que esta seja colhida pelo fotodetector como sinal (nos dois casos os falsos sinais captados estariam na mesma frequência da referência dada ao "lock-in" e este não seria capaz de filtrá-los).



Figura 4.1 - Arranjo experimental usado nas medidas

O gerador de função serve como referência para a fonte de corrente que alimenta o laser amostra. As nossas frequências de trabalho ficaram restritas ao intervalo entre 100 KHz e 1 MHz devido à deformação introduzida na forma da onda pela fonte de corrente no caso de frequências mais altas. Estas condições eram otimizadas com o uso de onda senoidal como referência para a fonte de corrente. A amplitude da corrente ac atingia um valor de saturação que diminuía com o aumento da frequência. A forma da onda e o valor da corrente de operação da amostra eram monitorados por um osciloscópio ligado a uma resistência em série com o laser amostra.

Durante as medidas a amostra estava presa a um suporte que servia também de dissipador de calor, o qual possuía uma placa de efeito "Peltier" para resfriá-la e cuja corrente era calibrada por um controlador de temperatura que usava como referência a resistência de um termistor posicionado próximo à amostra. A temperatura do suporte era mantida próxima à ambiente.

Como referência para o "lock-in" usamos a saída TTL do gerador de função sendo que a diferença de fase introduzida por este procedimento foi corrigida.

O conversor analógico-digital recebia os sinais vindos das saídas do "lock-in" (componentes x e y do sinal alternado) e do fotodetector (sinal contínuo) enviando estas informações para o microcomputador que controlava a aquisição dos dados.

O microcomputador também regulava o posicionamento da amostra através do controlador dos motores de passo (modelo ITL09).

A descrição dos demais componentes é a mesma feita para o caso do laser de Ar^+ ser a fonte de excitação da amostra.

4.3) Amostras

Todas as amostras estudadas são lasers de semicondutor tipo "single quantum well" (SQW), com estrutura tensionada e camada ativa de InGaAs com pico de emissão em 980 nm. O guiamento óptico é por índice e do tipo "ridge" ("ridge waveguide").

Elas possuem uma camada de Al_2O_3 sobre cada uma das faces (espelhos). Na face dianteira, por onde é emitida a luz, esta camada é do tipo $\lambda/4$ minimizando a reflexão de luz para o interior do cristal enquanto na face traseira uma camada igual a esta primeira é sobreposta por outra de Si maximizando a quantidade de luz que retorna ao cristal.

A tabela 4.1 mostra as características particulares de cada uma das amostras que serão identificadas pelo número gravado no suporte sobre o qual os cristais estão soldados.

LASER	CAMADA	"GRINSCH"	ORIENTAÇÃO
	CONFINANTE		DA CAMADA P
627	GaAlAs	sim	para baixo
864	GaAlAs	sim	para baixo
1247	GaAlAs	sim	para cima
1248	GaAlAs	sim	para cima
730	InGaP	não	para baixo
764	InGaP	não	para cima
997	InGaP	não	para cima
1453	InGaP	não	para cima

Tabela 4.1 - Características particulares das amostras estudadas

A orientação da camada p indica se a solda do cristal em seu suporte foi feita entre este último e a camada n do cristal (caso de camada p para cima) ou entre o suporte e a camada p (caso p para baixo).

As figuras 4.2 e 4.3 mostram os diagramas dos "gaps" de energia das camadas dos cristais com as respectivas espessuras. A não explicitação do elemento dopante indica que a camada é não dopada. O crescimento foi feito por MOCVD no CPqD da Telebrás (Campinas - SP), no caso do InGaP confinante, e na EPI (Inglaterra) para o confinante sendo GaAlAs.



Figura 4.2 - Diagrama dos "gaps" de energia das amostras que possuem GaAlAs como camada confinante (a figura está fora de escala)



Figura 4.3 - Diagrama dos "gaps" de energia das amostras que possuem InGaP como camada confinante (a figura está fora de escala)

As camadas de GaAs de 0.05 µm de espessura localizadas à direita dos diagramas dos "gaps" de energia têm a função de deter o ataque químico usado para formar o "ridge" nos cristais ("stop etch layer").

As amostras têm a forma de paralelepípedos de dimensões : 270 x 100 x 1180 μ m³ (grosso modo).

Estes tipos de lasers são usados pela Telebrás no bombeio das fibras ópticas dopadas com Er usadas nos sistemas de telecomunicações ópticas. A Telebrás tem então grande interesse na análise do comportamento térmico dos lasers por ela fabricados visto que este afeta fortemente o rendimento e a confiabilidade do dispositivo (como discutido no parágrafo 3.6 desta monografia).

A figura seguinte mostra um laser "ridge waveguide" do mesmo tipo usado em nossas medidas. O "ridge" pode ser notado como um pequeno "dente" na parte inferior do cristal (soldado p para baixo). Esta foto foi tirada no Departamento de Física Aplicada (IFGW - Unicamp) pela Maria Beny Pinto Zakia.



Figura 4.4 - Foto de um laser de semicondutor tipo "ridge" soldado p para baixo (a largura do "ridge" é de 4µm)

As figuras seguintes mostram as medidas de caracterização óptica e elétrica das amostras. São exibidas as curvas de luz e tensão por corrente obtidas em modo contínuo e modulado. Os valores de corrente limiar, eficiência, resistência em série e tensão de joelho são indicados (A tensão de joelho é o valor de tensão para o qual o diodo permite a passagem de corrente, ou seja, quando o campo elétrico da camada de depleção da junção p-n é superado. O valor da resistência em série é dado pela inclinação da parte linear da curva de tensão por corrente.). As medidas moduladas foram realizadas a 1 kHz e com um "duty cicle" de 1/1000.

Mostramos também as medidas de campo afastado que nos dão idéia da distribuição da intensidade de luz quando a amostra é rodada frente a um detector e tendo seu eixo de rotação perpendicular às camadas de crescimento (campo afastado horizontal). As medidas estão na ordem de apresentação das amostras no capítulo 5 (todas estas medidas foram realizadas no CPqD - Telebrás). Alguns lasers tiveram as medidas de luz e tensão por corrente feitas apenas no caso modulado devido a problemas com os equipamentos de medida na Telebrás.



Figura 4.5 - Medidas luz x corrente e tensão x corrente para a amostra 864







Figura 4.7 - Medidas luz x corrente e tensão x corrente para a amostra 627



Figura 4.8 - Medida de campo afastado horizontal para a amostra 627



Figura 4.9 - Medidas luz x corrente e tensão x corrente para a amostra 1453







Figura 4.11 - Medidas luz x corrente e tensão x corrente para a amostra 1248



Figura 4.12 - Medida de campo afastado horizontal para a amostra 1248

Capítulo 5

Resultados experimentais e discussões

5.1) Introdução

Em semicondutores temos duas contribuições importantes para a modulação da refletância, a densidade de portadores (N) e a temperatura (T), o que nos permite escrever :

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{1}{R} \left[\frac{\partial R}{\partial T} \cdot \Delta T + \frac{\partial R}{\partial N} \cdot \Delta N \right]$$
(5.1)

Geralmente estas duas contribuições têm sinais opostos sendo que a componente de densidade de portadores deve ganhar importância com o aumento da frequência de modulação (o período passa a ser da ordem ou menor que o tempo de vida dos portadores).

Em nossas amostras a densidade de portadores tem pouca influência, pois a espessura da região ativa (onde ocorrem as recombinações) é muito menor que o comprimento de difusão térmica (tipicamente 1000 vezes menor para as frequências de modulação empregadas). Isto significa que o sinal colhido vem de uma região da amostra na qual a influência da densidade de portadores ocorre apenas em uma parte bem pequena desta, o que é reforçado pelo fato do diâmetro do feixe de prova sobre a amostra ser da ordem de 1 μ m (para a objetiva de 50x) enquanto a espessura da região ativa é da ordem de 6 nm.

Uma outra razão para a pequena influência de N no sinal é dada nas referências [7] e [8] onde é mostrado que a densidade de portadores afeta pouco o índice de refração dos semicondutores e especificamente no nosso caso são usados períodos de modulação maiores que o tempo de vida dos portadores (o que diminui a contribuição de N).

A equação 5.1 pode então ser escrita na forma :

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{1}{R} \cdot \left[\frac{\partial R}{\partial T} \cdot \Delta T\right]$$
(5.2)

indicando que o conhecimento do coeficiente $\frac{1}{R} \cdot \frac{\partial R}{\partial T}$ nos permitiria determinar o valor da oscilação da temperatura no ponto sondado a partir do valor de $\frac{\Delta R}{R}$ medido.

5.2) Temperatura na face de saída do laser

Inicialmente iremos mostrar medidas que apresentam os resultados esperados para amostras sem grandes particularidades, ou seja, resultados para amostras que se aproximam das condições ideais de desempenho.

Após a varredura da superfície da amostra com o laser sonda, obtemos uma grade de valores medidos onde a cada ponto da superfície está associado um valor da amplitude do sinal ac, sua fase e um valor do sinal dc. Usando uma certa escala de cores associada ao intervalo do sinal obtido formamos o mapa.

Para um laser amostra normal devemos esperar uma distribuição simétrica das amplitudes do sinal ac em torno do ponto de emissão de luz. A fase deste sinal deve acompanhar a sua forma sendo que a região de maior amplitude deve possuir uma fase mais próxima de zero indicando proximidade da fonte de calor. O sinal de deve evidenciar o contorno físico da amostra destacando as regiões com diferentes valores de refletância.

As figuras 5.1 apresentam os mapas da amostra 864 (ver parágrafo 4.4) obtidos varrendo-se o espelho do laser com passos de 0,1 μ m, uma frequência de modulação de 100 kHz e uma corrente senoidal de amplitude 124 mA (a menos que seja explicitado, as medidas foram feitas sobre o espelho da amostra por onde a luz laser é emitida e usando-se a corrente na amostra como fonte de excitação).



Figura 5.1 a) - Mapa do módulo do sinal da amostra 864 (f= 100 kHz, corrente ac = 124 mA, área varrida: 3,0x3,0 μ m²)



Figura 5.1 b) - Mapa da fase do sinal da amostra 864 (f=100 kHz, corrente ac = 124 mA, área varrida: 3,0x3,0 μm^2)



Figura 5.1 c) - Mapa do sinal de da amostra 864 (mesma área das figuras 5.1 a) e 5.1 b))

Podemos notar, pela comparação das figuras 5.1 a) e 5.1 b), que a região de maior valor de amplitude de sinal não coincide exatamente com a de maior valor de fase, mas vale a pena ressaltar a pequena variação da fase dentro de todo o mapa indicando, de uma maneira geral, que não nos afastamos muito das fontes de sinal em toda a medida. Outro fato importante é que o contorno do "ridge" é facilmente perceptível no mapa do sinal dc (figura 5.1 c))

As figuras 5.2 mostram os mapas da mesma amostra, obtidas sob as mesmas condições (exceto o tamanho do passo que passou a 0,2 μ m), mas com uma área varrida de 10x10 μ m².



Figura 5.2 a) - Mapa do módulo do sinal da amostra 864 (f=100 kHz, corrente ac = 124 mA, área varrida: $10x10 \ \mu m^2$)



Figura 5.2 b) - Mapa da fase do sinal da amostra 864 (f=100 kHz, corrente ac = 124 mA, área varrida: $10x10 \ \mu\text{m}^2$)



Figura 5.2 c) - Mapa do sinal de da amostra 864 (mesma área das figuras 5.2 a) e 5.2 b))

Novamente temos o contorno do "ridge" bem nítido no mapa do sinal dc, mas agora a variação da fase com o afastamento das fontes fica mais evidente. A região avermelhada no mapa da fase corresponde à área onde o laser sonda já está totalmente fora do cristal da amostra, o sinal ac é consequentemente muito baixo e o valor da fase é determinado pelo sinal de fundo.

Os lasers cuja camada confinante de luz era InGaP não apresentaram mapas com uma distribuição tão simétrica do sinal e isto impossibilitou o estudo da influência do tipo desta camada no aquecimento do espelho das amostras (como era o propósito inicial do estudo).

5.3) A influência da camada de Al₂O₃ e das camadas confinantes na propagação do calor

Neste parágrafo vamos tratar da influência da camada de alumina, e da distribuição das camadas crescidas no cristal, sobre o aquecimento da face de saída da luz da amostra.

Elaboremos então um modelo simples para representar o cristal do laser amostra. Este será representado por um meio semi-infinito ($z \in (-\infty, 0]$) formado por um material de espessura d (representado o Al₂O₃) justaposto a um outro que se extende de z = -d a $z = -\infty$ (representando o cristal propriamente dito) conforme indica a figura 5.3.

Meio 1	Meio 2	
$lpha_1$, k_1	α_2, k_2	Z
	z = -d z	= 0

Figura 5.3 - Esquema de representação do laser amostra. $k_i e \alpha_i$ são respectivamente a condutividade térmica e a difusividade térmica do meio i.

Vamos considerar duas fontes de calor. A primeira fonte de calor existirá ao longo de toda a cavidade do laser e terá uma distribuição gaussiana centrada no eixo z e será independente desta coordenada assim como do ângulo θ (considerando um sistema de coordenadas cilíndricas). A segunda fonte, que representará a influência do Al₂O₃, será dada por uma distribuição gaussiana superficial de energia (em z = 0) da mesma forma que a apresentada no capítulo 1 e ilustrada na figura 1.2.

Agora iremos resolver a equação de difusão de calor para estes dois tipos de fontes e superpor suas soluções.

Primeiro caso: fonte interna

Considerando o meio externo à amostra como sendo o vácuo, ficamos sem fluxo de calor através da superfície z = 0 (ver figura 5.3). A solução da equação de calor se torna viável se nós imaginamos a amostra como um meio infinito tendo metade da energia da fonte interna depositada na região z < 0 e a outra metade em z > 0. A figura 5.4 mostra o esquema representativo desta situação.

Meio 1	Meio 2	Meio 2	Meio 3	
α_1, k_1	α_2, \mathbf{k}_2	α_2, \mathbf{k}_2	α_1, k_1	Z
Z =	-d z	=0 z	= d ·	

Figura 5.4 -	Represent	ação do	caso de	fonte	interna
<u> </u>				~	

Diferentemente dos casos abordados no capítulo 1 temos agora que o termo de fonte da equação de difusão de calor é não nulo. No nosso caso ele será dado por $f(r) = f0.exp(-r^2/R^2)$ onde R é o raio característico da fonte e f0 é uma constante com dimensão de potência por volume. A equação de difusão de calor tem a forma indicada na equação (1.7):

$$\nabla^2 [T(r,z)] + q^2 \cdot T(r,z) = -\frac{f(r)}{k}$$
 (5.3)

Estamos utilizando um sistema de coordenadas cilíndricas para explorar a simetria da fonte e a do meio (a temperatura fica independente da coordenada θ).

Escrevendo a equação (5.3) em termos das transformadas de Hankel de T(r,z) e f(r), seguindo os mesmos procedimentos do capítulo 1 (equações de (1.20) a (1.31)), termos que a equação de difusão de calor pode ser escrita como :

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tau(\beta, z) - m^2 \cdot \tau(\beta, z) = \frac{-F(\beta)}{k}$$
(5.4)

onde m² está definido na equação (1.33) e $\tau(\beta,z)$ e F(β) são respectivamente as transformadas de Hankel de T(r,z) e f(r).

A solução da equação (5.4) é dada pela superposição da solução da equação homogênea correspondente, (1.32), com a solução particular. A solução homogênea é dada por (1.34):

$$\tau_{\rm h}(\beta,z) = A(\beta).e^{m.z} + B(\beta).e^{-m.z} \qquad (5.5)$$

A solução particular é dada por:

$$\mathbf{r}_{\mathrm{p}}(\boldsymbol{\beta}) = \frac{F(\boldsymbol{\beta})}{m^2.k} \qquad (5.6)$$

o que é facilmente verificável.

A solução geral vale então:

$$\tau(\beta, z) = A(\beta).e^{m.z} + B(\beta).e^{-m.z} + \frac{F(\beta)}{m^2.k}$$
(5.7)

Esta solução é válida em qualquer um dos três meios representados na figura 5.4. Separando as soluções para cada meio temos :

Meio 1 :
$$-\infty < z < -d$$
 $\rightarrow \tau_1(\beta, z) = A_1(\beta).e^{m1.z} + B_1(\beta).e^{-m1.z} + \frac{F(\beta)}{m_1^2.k_1}$
Meio 2 : $-d < z < d$ $\rightarrow \tau_2(\beta, z) = A_2(\beta).e^{m2.z} + B_2(\beta).e^{-m2.z} + \frac{F(\beta)}{m_2^2.k_2}$
Meio 3 : $d < z < +\infty$ $\rightarrow \tau_3(\beta, z) = A_3(\beta).e^{m1.z} + B_3(\beta).e^{-m1.z} + \frac{F(\beta)}{m_1^2.k_1}$

A simetria do nosso sistema impõe T(r,z) = T(r,-z) o que nos leva, por (1.22), a :

1)
$$\tau_1(\beta, z) = \tau_3(\beta, -z) \Rightarrow A_1(\beta) = B_3(\beta)$$
 (5.8)
 $A_3(\beta) = B_1(\beta)$

2)
$$\tau_2(\beta, z) = \tau_2(\beta, -z) \Rightarrow A_2(\beta) = B_2(\beta)$$
 (5.9)

Impondo fluxo de calor nulo em $z \to -\infty$ temos ,por (1.22), $\frac{\partial \tau}{\partial z}\Big|_{z\to-\infty} = 0$. Substituindo esta condição em $\tau_1(\beta, z)$ obtemos :

$$B_1(\beta) = 0$$
 (5.10)

Utilizando as equações (5.8), (5.9) e (5.10) nas soluções $\tau_1(\beta,z)$, $\tau_2(\beta,z)$ e $\tau_3(\beta,z)$ chegamos a :

$$\tau_1(\beta, z) = A_1(\beta).e^{ml.z} + \frac{F(\beta)}{m_1^2.k_1}$$
 (5.11)

$$\tau_2(\beta, z) = A_2(\beta) \cdot \{e^{m2.z} + e^{-m2.z}\} + \frac{F(\beta)}{m_2^2 \cdot k_2}$$
(5.12)

$$\tau_3(\beta, z) = A_1(\beta).e^{-m1.z} + \frac{F(\beta)}{m_1^2.k_1}$$
 (5.13)

Falta ainda impor a continuidade da temperatura e do fluxo de calor na interface dos meios 1 e 2.

a) Continuidade da temperatura :

usando (1.22), a continuidade da temperatura na interface dos meios 1 e 2 nos dá que :

 $\tau_1(\beta,-d) = \tau_2(\beta,-d)$ e usando (5.11) e (5.12) chegamos a :

$$A_{1}(\beta).e^{-m1.d} + \frac{F(\beta)}{m_{1}^{2}.k_{1}} = A_{2}(\beta).\{e^{-m2.d} + e^{m2.d}\} + \frac{F(\beta)}{m_{2}^{2}.k_{2}}$$
(5.14)

b) Continuidade do fluxo de calor :

usando (1.22), a continuidade do fluxo de calor na interface dos meios 1 e 2 nos dá que :

$$\frac{\partial \tau_1}{\partial z}\Big|_{z=-d} = -k_2 \frac{\partial \tau_2}{\partial z}\Big|_{z=-d} \quad \text{e usando (5.11) e (5.12) chegamos a :}$$

$$A_1(\beta) = \frac{k_2 . m_2}{k_1 . m_1} . A_2(\beta) . \{ \exp[(m_1 - m_2) . d] - \exp[(m_1 + m_2) . d] \}$$

$$(5.15)$$

As equações (5.14) e (5.15) formam um sistema cuja solução é dada por :

$$A_1(\beta) =$$

$$\frac{\mathbf{k}_{2} \cdot \mathbf{m}_{2}}{\mathbf{k}_{1} \cdot \mathbf{m}_{1}} \cdot \mathbf{F}(\boldsymbol{\beta}) \cdot \left(\frac{1}{\mathbf{m}_{2}^{2} \cdot \mathbf{k}_{2}} - \frac{1}{\mathbf{m}_{1}^{2} \cdot \mathbf{k}_{1}}\right) \cdot \left\{ \exp[(\mathbf{m}_{1} - \mathbf{m}_{2}) \cdot \mathbf{d}] - \exp[(\mathbf{m}_{1} + \mathbf{m}_{2}) \cdot \mathbf{d}] \right\}$$

$$\exp[-\mathbf{m}_{2} \cdot \mathbf{d}] \cdot \left(\frac{\mathbf{k}_{2} \cdot \mathbf{m}_{2}}{\mathbf{k}_{1} \cdot \mathbf{m}_{1}} - 1\right) - \exp[+\mathbf{m}_{2} \cdot \mathbf{d}] \cdot \left(\frac{\mathbf{k}_{2} \cdot \mathbf{m}_{2}}{\mathbf{k}_{1} \cdot \mathbf{m}_{1}} + 1\right)$$
(5.16)

$$A_2(\beta) =$$

$$\frac{F(\beta) \cdot \left(\frac{1}{m_2^2 \cdot k_2} - \frac{1}{m_1^2 \cdot k_1}\right)}{\exp[-m_2 \cdot d] \cdot \left(\frac{k_2 \cdot m_2}{k_1 \cdot m_1} - 1\right) - \exp[+m_2 \cdot d] \cdot \left(\frac{k_2 \cdot m_2}{k_1 \cdot m_1} + 1\right)}$$
(5.17)

A transformada de Hankel do termo de fonte é dada por :

$$F(\beta) = 2.\pi \cdot \int_{0}^{\infty} r \cdot dr \cdot J_{0}(2.\pi \cdot \beta \cdot r) \cdot f(r) = 2.\pi \cdot f_{0} \cdot \int_{0}^{\infty} r \cdot dr \cdot J_{0}(2.\pi \cdot \beta \cdot r) \cdot exp\left(-\frac{r^{2}}{R^{2}}\right) (5.18)$$

O resultado da integral de (5.18) é conhecido [1]. Podemos então escrever:

$$F(\beta) = f0.\pi.R^2.\exp[-(\pi.\beta.R)^2]$$
 (5.19)

Usando as equações (1.22), (5.11) e (5.12) podemos escrever :

$$T_{1}(\mathbf{r},\mathbf{z}) = 2.\pi \int_{0}^{\infty} \beta d\beta J_{0}(2.\pi.\beta.\mathbf{r}) \left\{ A_{1}(\beta) \exp[m_{1}.\mathbf{z}] + \frac{F(\beta)}{m_{1}^{2}.k_{1}} \right\}$$
(5.20)

$$T_{2}(\mathbf{r},\mathbf{z}) = 2.\pi \cdot \int_{0}^{\infty} \beta \cdot d\beta \cdot J_{0}(2.\pi \cdot \beta \cdot \mathbf{r}) \cdot \left\{ A_{2}(\beta) \cdot \{\exp[m_{2} \cdot \mathbf{z}] + \exp[-m_{2} \cdot \mathbf{z}]\} + \frac{F(\beta)}{m_{2}^{2} \cdot k_{2}} \right\}$$
(5.21)

onde os valores de $A_1(\beta)$, $A_2(\beta)$ e $F(\beta)$ são dados respectivamente nas equações (5.16), (5.17) e (5.19).

O importante são as soluções para a região z < 0 (figura 5.3), ou seja, $T_1(r,z)$ e $T_2(r,z)$.

Segundo caso : fonte superficial

Como mencionado anteriormente este caso é idêntico ao tratado no capítulo 1 e ilustrado na figura 1.2 com a única diferença que agora estaremos trabalhando no semi-espaço z < 0.

A equação de difusão de calor tem a forma :

$$\nabla^2 [T(r)] + q^2 T(r) = 0$$
 (5.22)

e a sua solução, geral em termos da transformada de Hankel da temperatura, é dada pela equação (1.34) :

$$\tau(\beta, z) = A(\beta).e^{m.z} + B(\beta).e^{-m.z} \qquad (5.23)$$

Distribuindo esta solução para cada um dos meios (figura 5.3) temos :

 $\begin{array}{ll} \text{Meio } 1: -\infty < z < -d & \rightarrow \tau_1(\beta, z) = A_1(\beta).e^{m1.z} + B_1(\beta).e^{-m1.z} \\ \text{Meio } 2: -d < z < 0 & \rightarrow \tau_2(\beta, z) = A_2(\beta).e^{m2.z} + B_2(\beta).e^{-m2.z} \end{array}$

Impondo T(r,z \rightarrow - ∞) = 0 chegamos, por (1.22), a $\tau_1(\beta,z\rightarrow$ - ∞) = 0 o que nos dá :

$$B_1(\beta) = 0$$
 (5.24)

Com isso podemos escrever que :

$$\tau_1(\beta, z) = A_1(\beta).e^{m1.z}$$
 (5.25)

$$\tau_2(\beta, z) = A_2(\beta).e^{m2.z} + B_2(\beta).e^{-m2.z}$$
 (5.26)

A continuidade do fluxo de calor em z = 0 nos dá que :

$$-I(r) = -k_2 \cdot \frac{\partial T_2}{\partial z} \Big|_{z=0} \text{ que por (1.22) obtemos :}$$

$$-I_0 \pi R^2 . \exp(-\pi^2 \beta^2 R^2) = -k_2 . \frac{\partial \tau_2}{\partial z} \bigg|_{z=0}$$
(5.27)

onde I(r) é dada por (1.36) e sua transformada é equivalente a (5.19).

Note que em relação à equação (1.37) a (5.27) surge com I(r) tendo seu sinal invertido. Isto se deve ao fato de agora estarmos trabalhando no semi-espaço z < 0.

Usando a definição de $\tau_2(\beta, r)$ em (5.27) obtemos :

$$A_{2}(\beta) - B_{2}(\beta) = \frac{I_{0} \cdot \pi \cdot R^{2}}{k_{2} \cdot m_{2}} \cdot \exp[-(\pi \cdot \beta \cdot R)^{2}]$$
 (5.28)

A continuidade da temperatura em z = -d nos leva, por (1.22) a :

$$\tau_1(\beta, z=-d) = \tau_2(\beta, z=-d) \Rightarrow$$

 $\Rightarrow A_1(\beta) = A_2(\beta).\exp[(m_1 - m_2).d] + B_2(\beta).\exp[(m_1 + m_2).d]$ (5.29)

Por fim, a continuidade do fluxo de calor em z = -d nos dá, por (1.22), que:

$$\mathbf{k}_{1} \cdot \frac{\partial \tau_{1}}{\partial \mathbf{z}} \bigg|_{\mathbf{z} = -\mathbf{d}} = \mathbf{k}_{2} \cdot \frac{\partial \tau_{2}}{\partial \mathbf{z}} \bigg|_{\mathbf{z} = -\mathbf{d}} \implies$$

$$\Rightarrow A_{1}(\beta) = \frac{k_{2} \cdot m_{2}}{k_{1} \cdot m_{1}} \{A_{2}(\beta) \cdot \exp[(m_{1} - m_{2}) \cdot d] - B_{2}(\beta) \cdot \exp[(m_{1} + m_{2}) \cdot d]\}$$

(5.30)

As equações (5.28), (5.29) e (5.30) formam um sistema cuja solução é :

$$A_{1}(\beta) = \frac{2.\exp[(m_{1} + m_{2}).d - (\pi.\beta.R)^{2}].I_{0}.\pi.R^{2}}{k_{1}.m_{1}.(1 + \exp[2.m_{2}.d]) - k_{2}.m_{2}(1 - \exp[2.m_{2}.d])}$$
(5.31)

$$A_{2}(\beta) = \frac{\exp[2.m_{2}.d - (\pi.\beta.R)^{2}].I_{0}.\pi.R^{2}.(k_{1}.m_{1} + k_{2}.m_{2})}{k_{2}.m_{2}.\{k_{1}.m_{1}.(1 + \exp[2.m_{2}.d]) - k_{2}.m_{2}(1 - \exp[2.m_{2}.d])\}}$$
(5.32)

$$B_{2}(\beta) = \frac{-I_{0}.\pi.R^{2}.(k_{1}.m_{1}-k_{2}.m_{2}).\exp[-(\pi.\beta.R)^{2}]}{k_{2}.m_{2}.\{k_{1}.m_{1}.(1+\exp[2.m_{2}.d]) - k_{2}.m_{2}(1-\exp[2.m_{2}.d])\}}$$
(5.33)

Aplicando (1.22) nas equações (5.25) e (5.26) temos que :

$$T_{1}(\mathbf{r},\mathbf{z}) = 2.\pi \int_{0}^{\infty} \beta d\beta J_{0}(2.\pi,\beta,\mathbf{r}) A_{1}(\beta) \exp[\mathbf{m}_{1},\mathbf{z}]$$
 (5.34)

$$T_{2}(\mathbf{r},\mathbf{z}) = 2.\pi \int_{0}^{\infty} \beta d\beta J_{0}(2.\pi.\beta.\mathbf{r}) \left\{ A_{2}(\beta) \exp[\mathbf{m}_{2}.\mathbf{z}] + B_{2}(\beta) \exp[-\mathbf{m}_{2}.\mathbf{z}] \right\}$$
(5.35)

onde A₁(β), A₂(β) e B₂(β) são dados respectivamente nas equações (5.31), (5.32) e (5.33).

Para obtermos a temperatura na superficie z = 0 (em função de r) precisamos resolver as integrais (5.21) e (5.35) neste plano, somando suas contribuições para a temperatura complexa resultante e obtendo a partir daí a amplitude e a fase resultantes. Com esta finalidade foi elaborado um programa no Mathematica (*Mathematica for Microsoft Windows, versão 2.2.1*) que integra numericamente (5.21) e (5.35) calculando ainda suas amplitudes e fases assim como a amplitude e a fase da temperatura resultante.

Foi estabelecida uma relação entre as constantes I_0 e f0 de tal modo que $f0 = I_0 / l$, ou seja, l é um parâmetro com dimensão de comprimento (a dimensão de f0 é de potência por volume enquanto a de I_0 é de potência por área) que mede

a importância relativa das duas fontes (quanto maior *l* maior o comprimento necessário para se obter, na fonte interna, a mesma energia da superficial e consequentemente mais importante é esta última).

A integral (5.35) contida no programa possui o fator l para que as duas integrais possuam a mesma dimensão e o resultado é sempre a temperatura a menos da constante f0 ou I_0 conforme o caso.

No programa usamos p como variável de integração que guarda com β a seguinte relação : p = $2.\pi.\beta$

Os parâmetros térmicos dos meios foram (fizemos o meio 1 sendo GaAs e o meio 2 sendo Al_2O_3) :

• $k_1 = 0.438 \times 10^{-4} \text{ W} / (\mu \text{m.K})$

- $k_2 = 0.351 \times 10^4$ W/ (μ m.K)
- $\alpha_1 = 0.257 \text{ cm}^2 / \text{seg} \Rightarrow \mu_1 = 9.05 \mu \text{m}$ para uma frequência de 100 kHz
- $\alpha_2 = 0.117 \text{ cm}^2 / \text{seg} \implies \mu_2 = 6.10 \text{ }\mu\text{m}$ para uma frequência de 100 kHz
- $d = \lambda_0 / (4.n_{Al2O3}) = 0.156 \ \mu m$ onde $\lambda_0 = 980 \ nm \ e \ n_{Al2O3} = 1.57 \ para \ 980 \ nm$
- $R_{(fonte interna)} = R_{(fonte superficial)} = 0.5 \ \mu m$

Os valores de k_2 , n_{Al2O3} , assim como os da densidade e calor específico que nos permitiram obter α_2 através de $\alpha = k / (\rho.c)$ foram tirados de [9] (usamos para n_{Al2O3} valores para filmes finos de Al_2O_3 e para os demais parâmetros do meio 2 usamos valores da safira). Os valores de k_1 e α_1 (GaAs) foram tirados de [10].

Uma cópia do programa usado no Mathematica para o cálculo numérico das integrais (5.21), chamada de t[r_], e (5.35), chamada de t1[r_], assim como da resultante delas encontra-se no Apêndice 1. A variação de casos é obtida alterando-se principalmente os parâmetros d, l, μ_1 , μ_2 e os raios das fontes (R_{fs}, R_{fi}).

Os resultados obtidos apresentaram a forma esperada para as respectivas variações dos parâmetros dando-nos confiança nos cálculos e no programa.

A fonte superficial sempre apresenta uma queda mais abrupta na amplitude se comparada à fonte interna. Isto pode ser explicado pela contribuição ao longo de todo o eixo z que apenas a fonte interna possui e que deve suavizar a queda de sua amplitude ao longo de r, ou por um outro ponto de vista, pela simetria das fontes que no caso da fonte interna leva à formação de ondas cilíndricas que são menos atenuadas espacialmente que as ondas esféricas geradas pela fonte superficial.

Os resultados do cálculo numérico com os parâmetros apresentados acima são mostrados na figura 5.5.



Figura 5.5 - Resultados numéricos para $\mu_1 = 9.05 \ \mu m$, $\mu_2 = 6.10 \ \mu m$ e $R_{fi} = R_{fs} = 0.5 \ \mu m$

A inclinação das fases é calculada a partir de um ajuste linear das curvas, incluindo os pontos cujo valor de r é maior ou igual ao dobro do raio da fonte no caso respectivo. Os pontos entre r = 0 e o raio da fonte possuem um comportamento de fase marcado por uma variação mais lenta que os pontos restantes devido ao fato de estarmos muito próximos do centro da fonte (região onde ela é muito mais intensa).

Vale ressaltar que, diferentemente do que ocorre nos gráficos experimentais, a inclinação da fase obtida numericamente será sempre positiva. Isto se deve ao fato de termos considerado, no capítulo 1, uma dependência temporal, para o termo de fonte e para a temperatura, representada por uma exponencial complexa com argumento negativo. A nossa discussão se baseará no módulo desta inclinação e consequentemente isto não afetará em nada as análises.

A figura 5-6 mostra uma situação que difere do apresentado na figura 5-5 apenas pelo fato da espessura da camada de Al_2O_3 ser nula, ou seja, estamos tomando o caso em que não há alumina recobrindo o espelho do laser. As diferenças entre os resultados das figuras 5-5 e 5-6 são pequenas (isto será retomado mais adiante). Podemos ressaltar no entanto que há uma redução no valor da amplitude máxima da fonte superficial, e consequentemente da resultante, quando fazemos d = 0. Isto é fruto da remoção da camada termicamente mais pobre (Al_2O_3) diminuindo um pouco o confinamento do calor.

Um aumento considerável da importância de uma das fontes na composição da resultante, em relação ao caso da figura 5-5, sempre levará a uma diminuição da inclinação da fase desta última pois na figura 5-5 temos a inclinação da fase resultante maior que a de qualquer uma de suas componentes. Isto se deve à variação da importância de cada uma das componentes ao longo de r. Inicialmente (r = 0) temos a fonte superficial dominando, mas como a queda de sua amplitude é mais abrupta que a da fonte interna, esta passa a aumentar sua influência ao longo de r, ou seja, inicialmente o valor da fase resultante é próximo ao da fase de fonte superficial, mas ele passa gradualmente a se aproximar do valor da fase da fonte interna com o aumento de r. O resultado é que a inclinação da fase resultante fica maior que a das suas componentes. Um considerável aumento na importância de uma das componentes fará com que esta variação de domínio seja mais lenta e a inclinação da fase resultante diminua, mas tendendo ao valor da inclinação da fase da componente respectiva que ganha importância.

Este comportamento pode ser confirmado na figura 5-7 onde, em relação ao caso da figura 5-5, apenas alteramos o valor de l para 0.5 μm e verificamos que a inclinação da fase resultante cai mas se aproximando do valor obtido para a fonte interna.

Outro efeito interessante ocorre quando aumentamos o valor da espessura da camada de Al_2O_3 que sendo uma camada de condutividade e difusividade térmicas menores que as da camada de GaAs promove um maior confinamento do calor e consequentemente um aumento na inclinação de todas as fases em relação ao caso da figura 5-5 (as amplitudes caem mais abruptamente). Isto pode ser verificado na figura 5-8 onde fizemos d = 50 μ m.



Figura 5.6 - Resultados numéricos para $\mu_1 = 9.045 \mu m$, $\mu_2 = 6.103 \mu m e R_{fi} = R_{fi} = 0.5 \mu m$



Figura 5.7 - Resultados numéricos para $\mu_1 = 9.05$ μ m, $\mu_2 = 6.10$ μ m e $R_{fi} = R_{fi} = 0.5$ μ m



Figura 5.8 - Resultados numéricos para $\mu_1 = 9.05 \ \mu m$, $\mu_2 = 6.103 \ \mu m$ e $R_{fi} = R_{fs} = 0.5 \ \mu m$

Por fim verificamos os casos em que a condutividade e a difusividade térmicas do Al_2O_3 eram divididas e multiplicadas por um fator 5 simulando respectivamente uma piora e uma melhora nas propriedades térmicas da alumina. Os resultados foram os esperados, ou seja, no primeiro caso há um confinamento maior do calor e as inclinações das fases aumentam junto com a velocidade de



Figura 5.9 - Resultados numéricos para k_2 dividido por 5 e μ_2 dividido por (5)^{1/2} em relação ao caso da figura 5-5.



Figura 5.10 - Resultados numéricos para k_2 multiplicado por 5 e μ_2 multiplicado por (5)^{1/2} em relação ao caso da figura 5-5.

A pequena influência da camada de alumina na distribuição de temperatura no espelho do laser pode ser facilmente percebida na figura 5-11 onde comparamos a amplitude da temperatura resultante para os casos de uma espessura da camada de Al_2O_3 de 0,156 µm e 0 (figuras 5-5 e 5-6
respectivamente). Nota-se que a amplitude da temperatura resultante praticamente não varia a menos da região próxima a r = 0. A comparação dos valores de inclinação da fase nos mostra uma variação desprezível entre os dois casos. Ela nos mostra também que os valores obtidos estão muito mais próximos do determinado pela camada de GaAs (0.111 μ m⁻¹) do que o determinado pela alumina (0,167 μ m⁻¹), já que longe das fontes a inclinação da fase é dada pelo inverso do comprimento de difusão térmica. Isto confirma a pequena participação da camada de alumina na distribuição da temperatura do espelho.

A nossa conclusão é sustentada também pela referência [13] que conclui que o tipo de "coating" usado (Al_2O_3 ou Si_3N_4) influencia pouco no aquecimento do espelho (o efeito de passivação é importante pois a ausência de qualquer tipo de camada aumenta a temperatura local devido ao favorecimento dos processos de recombinação superficial de portadores)



Figura 5.11 - Comparação entre as distribuições resultantes de temperatura das figuras 5-5 (d = 156 nm) e 5-6 (d = 0)

A influência da estrutura vertical das camadas (direção de crescimento do cristal) foi feita por comparação dos resultados teóricos com os obtidos experimentalmente para inclinação da fase. Elaboramos um programa Basic que retira, do arquivo de dados do mapa medido sobre o espelho, as linhas vertical e horizontal (respectivamente perpendicular e paralela às camadas de crescimento - ver figura 3.12) que passam sobre o ponto de máxima amplitude do sinal obtido. Para evitar a influência de ruídos ocasionais o programa procura inicialmente um conjunto de nove pontos vizinhos (matriz 3×3) que possua a soma máxima em seus módulos de sinal e dentro desta matriz determina-se o ponto de máximo. O arquivo de saída (horizontal ou vertical) grava a posição de cada ponto medido na linha, assim como amplitude, fase, sinal contínuo e ainda o valor da razão entre a amplitude e o sinal dc.

Obtivemos então gráficos destas linhas como o mostrado na figura 5-12 para o laser 627 originado de um mapa feito a uma frequência de 100 kHz, com uma corrente ac de 94 mA, uma área varrida de 5,0 x 5,0 μ m² com passos de 0.1 μ m (a direção da posição crescente nos leva ao substrato). Para o cálculo da inclinação da fase damos preferências às linhas verticais pois nos afastamos mais rapidamente das fontes de calor (veja as figuras 4-2 e 4-3).

Calculamos os valores das inclinações das fases de linhas verticais para os lasers 864 e 627 obtidas de mapas medidos com f = 100 kHz. Para os mapas de 10 x 10 μ m² tomamos os pontos que iam de 1,0 μ m à direita do máximo até a posição 8.5 μ m, para os mapas de 5,0 x 5,0 μ m² tomamos os pontos a partir de 0.8 μ m à direita do máximo. Para cinco valores de inclinações calculados chegamos ao resultado de (0.23 ± 0.02) μ m⁻¹.

Se imaginamos uma dependência simples da fase da temperatura com o comprimento de difusão térmica (como mostrado na equação 1-14 para simetria esférica e que é sempre válida quando distante do centro das fontes) onde a inclinação da primeira é dada pelo inverso deste comprimento temos que a inclinação determinada pelo GaAs deveria ser da ordem de 0.111 μ m⁻¹ enquanto a determinada pela alumina deveria ser da ordem de 0.164 μ m⁻¹. Obviamente a dependência não é tão simples (não se trata de um único meio), mas os valores das inclinações das fases resultantes estão sempre entre estes dois limites (exceção para o caso em que fizemos d = 50 μ m na figura 5-8).

O valor experimental achado é bem superior aos obtidos numericamente indicando que a estrutura das camadas ao longo do eixo z não deve ser o fator mais importante. Por outro lado os nossos cálculos desprezaram a estrutura das camadas ao longo da direção de crescimento (ver figuras 4-2 e 4-3). O descasamento dos valores de condutividade térmica destas camadas forma um efeito de barreira térmica vertical que tende a aumentar a inclinação da fase como mostrado em [11]. Nós atribuímos a diferença entre os valores teóricos e o experimental à camada de GaAlAs (ver figura 4-2) pois este composto tem uma condutividade térmica quatro vezes menor que a do GaAs (para uma concentração de 45% de Al) como mostrado em [10]. Considerando que a inclinação da fase seja dada pelo inverso do comprimento de difusão térmica (como citado acima) temos que a inclinação da fase do GaAlAs é o dobro da do GaAs (equação (1-10)) e a espessura da camada de GaAlAs é suficiente para elevar a inclinação da fase experimental não tendo sido considerada em nosso modelo teórico.

Podemos então afirmar que mais importante que a presença da alumina, enquanto camada térmica, é a variação das propriedades térmicas das camadas crescidas que tende a confinar o calor.



Figura 5.12 - Linha vertical para o laser 627 (f = 100 kHz, corrente ac : 94 mA, área varrida : 5,0x5,0 μ m², passos de 0.1 μ m)

5.4) A causa do aquecimento do espelho

As referências [7, 12-17] mostram que a principal região de aquecimento nos lasers de semicondutor é o espelho frontal do mesmo (face por onde sai a luz laser) devido principalmente aos processos de recombinação superficial não radiativa de portadores. Este aquecimento provoca um aumento na absorção da luz emitida pelo laser. Fecha-se assim um ciclo que pode levar o dispositivo a atingir, no espelho frontal, a temperatura de fusão das camadas de crescimento, gerando uma região que não mais emitirá luz. Este tipo de fenômeno é conhecido como COMD ("catastrophic optical mirror damage").

O fato de que o espelho é realmente a principal zona de aquecimento do laser pode ser verificado na figura 5-13 que é uma linha vertical extraída de um mapa feito sobre o "ridge" do laser 1453 usando a objetiva de 20x do microscópio (o que nos dá um feixe de cerca de 2 μ m de diâmetro sobre a amostra). A frequência usada foi de 100 kHz e o valor da amplitude da corrente foi de 124 mA. O passo da medida foi de 0.4 μ m e o aumento no valor da posição indica estarmos caminhando para o interior da cavidade do cristal partindo do espelho frontal. A utilização da objetiva de 20x foi uma tentativa de escapar das irregularidades na superfície da região pesquisada e que podem ser percebidas pela grande variação do sinal contínuo ao longo da linha.



Figura 5.13 - Linha vertical para o laser 1453 (f = 100 kHz, corrente ac : 124 mA, passos de 0.4 μ m sobre o "ridge" da amostra)

Outro tipo de medida que fazemos é variar a amplitude da corrente mantendo o laser prova fixo em um ponto da amostra e colhendo a intensidade de sua luz refletida. Fizemos este tipo de medida sobre o "ridge" da laser 1248 usando ainda a objetiva de 20x e uma frequência de modulação de 100 kHz. Inicialmente obtemos o mapa e escolhemos nele a região de máximo sinal para medir o efeito da variação da amplitude da corrente sobre um certo ponto. As figuras 5-14 e 5-15 mostram este tipo de medida para regiões próximas ao espelho frontal e sobre o meio da cavidade respectivamente. Novamente podemos notar que o maior módulo de sinal ac se dá na região do espelho frontal.

A figura 5-13 nos mostra que a partir de cerca de 15 µm do espelho o módulo do sinal ac cai a praticamente zero, o que poderia nos levar a pensar que não há aquecimento do laser ao longo da cavidade. Nós atribuímos este resultado às irregularidades da superfície (verificar instabilidade no sinal dc), ou seja, a má qualidade óptica da superfície analisada leva a uma distorção dos resultados obtidos. O resultado mais confiável é o mostrado nas figuras 5-14 e 5-15 onde podemos notar uma redução do sinal ac a cerca de 25% quando passamos de um ponto próximo ao espelho para um ponto no meio da cavidade. Esta ordem de redução do valor do módulo do sinal concorda com medidas feitas na França por Redouane Cherrak e não publicadas.

As figuras 5-14 e 5-15 apresentam uma região de instabilidade no valor da amplitude do sinal ac para valores de amplitude de corrente a partir de 80 mA. Vale a pena ressaltar que a curva de luz por corrente do laser 1248 (ver figura 4-11) apresenta também uma instabilidade, só que a partir de 100 mA. Levando-se em conta a diferença de "duty cicle" entre as medidas (0.1% para as curvas luz por corrente e 50% para as medidas das figuras 5-14 e 5-15) é de se esperar que efeitos térmicos se manifestem nas nossas medidas para valores mais baixos de corrente que os que ocorrem nas medidas de luz por corrente modulada feitas na Telebrás, ou seja, é admissível que a instabilidade na emissão de luz pela amostra ocorra já a partir de 80 mA nas nossas medidas (no caso de causas térmicas) e tenham relação com a instabilidade do sinal ac das figuras 5-14 e 5-15.

A fase das medidas apresentadas nas figuras 5-14 e 5-15 permaneceram praticamente constantes em torno de -40 graus.



Figura 5.14 - Variação da corrente ac sobre o "ridge" do laser 1248 próximo ao espelho frontal



Figura 5.15 - Variação da corrente ac sobre o "ridge" do laser 1248 no meio da cavidade

A superficie de um cristal semicondutor é sempre uma região de forte recombinação não radiativa de portadores [18] devido à presença de ligações livres nos átomos e ao estreitamento do "gap" local do material. No caso do cristal de um laser de semicondutor, existem duas formas principais de recombinação não radiativa dos portadores e conseqüente aquecimento do material. Elas são devidas à absorção da luz do próprio laser e à recombinação dos portadores injetados na corrente que alimenta o dispositivo. No primeiro caso a excitação se dá através de fótons absorvidos e no segundo caso a excitação é via a injeção de portadores ocupando estados de alta energia na banda de condução (elétrons). Uma melhor compreensão destes mecanismos de aquecimento é essencial para que se possa evitar a ocorrência de defeitos do tipo COMD nos lasers de semicondutor.

Com o objetivo de determinar qual das duas formas de recombinação de portadores é a mais importante, removemos as camadas traseiras de alguns lasers. A idéia foi reduzir a componente de luz nos processos de recombinação superficial (a refletividade do espelho traseiro baixa de 95% para 30%) sem alterar as propriedades ópticas e térmicas do espelho frontal.

O processo de remoção das camadas é simples, mas não possui uma eficiência satisfatória. Inicialmente aquecemos a amostra até a temperatura de fusão da cera de abelha e aplicamos sobre o espelho frontal e os contatos elétricos a cera. Na prática, nós derretemos um pouco de cera de abelha e com um estilete puxamos um pouco dela para que se forme um filamento bem fino. Acompanhando em um microscópio óptico, nós aproximamos este filamento da amostra aquecida para que ele se derreta sobre as regiões que queremos proteger.

A seguir mergulhamos a amostra em uma solução de cerca de 30% de HF e esperamos 30 segundos. Após este tempo lavamos a amostra com água e retiramos a cera através de um banho de tricloroetileno fervente seguido de um banho de álcool isopropílico e outro de água deionizada. Finalmente seca-se a amostra com um jato de N_2 .

Em alguns casos foi necessário repetir a operação pois não houve o esperado valor de aumento da corrente limiar (consideramos satisfatório quando este valor passava de cerca de 10 mA para algo em torno de 40 mA). Algumas amostras tiveram, apesar de todo cuidado de proteção com a cera, os espelhos frontais e os contatos elétricos prejudicados.

A figura 5-16 mostra a vista de cima de uma das amostras com o espelho frontal protegido com cera.



Figura 5.16 – Amostra com espelho frontal protegido com cera de abelha para remoção do "coating" traseiro

O laser 627 foi uma das amostras que apesar da proteção da cera teve sua camada frontal atingido pelo HF. Resolvemos retirar também a alumina do espelho dianteiro. O resultado foi que tivemos a corrente de limiar passando para 258 mA. Um resultado fora do esperado pois com a remoção do "coating" dianteiro este espelho ganha em refletividade e a corrente de limiar deve ser menor que no caso de retirarmos apenas a alumina traseira. Isto nos levou a acreditar que a amostra acabou, de alguma forma, sendo seriamente danificada e os resultados, a partir de então, perderam a confiabilidade.

As medidas feitas no laser 627 antes da remoção da alumina apresentam aspectos interessantes. As figuras 5-17 e 5-18 mostram medidas com variação de amplitude de corrente feitas sobre o ponto de máximo módulo de sinal no mapa correspondente do espelho e a 1.5 μ m deste ponto (deslocamento paralelo às camadas crescidas) respectivamente. Nos dois casos a fase se manteve constante em torno de -25^o.



Figura 5.17 - Variação da corrente ac sobre o espelho do laser 627 (f=100 kHz)



Figura 5.18 - Variação da corrente ac sobre o espelho do laser 627 a 1.5 µm do ponto de máximo módulo de sinal ac (f=100 kHz)

Comparando estas duas medidas com as da figura 4-7 (corrente contínua) notamos novamente que a região de instabilidade delas coincide (em torno de 90 mA) indicando mais uma vez haver forte relação entre aquecimento do espelho frontal e emissão de luz.

O laser 864 teve apenas as camadas traseiras removidas. Antes disto as medidas com variação da amplitude da corrente modulada chegavam a obter 600 μ V de nível máximo de módulo de sinal para uma amplitude de corrente de 130 mA. Sem as camadas no espelho traseiro, estas medidas apresentaram uma queda no nível do módulo máximo como mostra a figura 5-19 (medida a 0.7 μ m, na direção do substrato, do ponto de máxima amplitude do sinal).

A nova curva de luz por corrente para o laser 864 é mostrada na figura 5-20.



Figura 5.19 - Variação da corrente ac sobre o espelho do laser 864, sem camadas traseiras, a 0.7 μm do ponto de máximo módulo de sinal (f=100 kHz)

Comparando estas duas medidas com as da figura 4-7 (corrente contínua) notamos novamente que a região de instabilidade delas coincide (em torno de 90 mA) indicando mais uma vez haver forte relação entre aquecimento do espelho frontal e emissão de luz.

O laser 864 teve apenas as camadas traseiras removidas. Antes disto as medidas com variação da amplitude da corrente modulada chegavam a obter 600 μ V de nível máximo de módulo de sinal para uma amplitude de corrente de 130 mA. Sem as camadas no espelho traseiro, estas medidas apresentaram uma queda no nível do módulo máximo como mostra a figura 5-19 (medida a 0.7 μ m, na direção do substrato, do ponto de máxima amplitude do sinal).

A nova curva de luz por corrente para o laser 864 é mostrada na figura 5-20.



Figura 5.19 - Variação da corrente ac sobre o espelho do laser 864, sem camadas traseiras, a 0.7 µm do ponto de máximo módulo de sinal (f=100 kHz)



Figura 5.20 - Medidas luz x corrente e tensão x corrente para a amostra 864 sem camadas traseiras

Uma observação importante é que a curva da figura 5-19 muda drasticamente de inclinação na região do novo limiar, indicando que a presença de luz é um fator que se soma, no aquecimento do espelho, à contribuição dos portadores injetados. Se subtraímos do sinal total, obtido após o limiar, o valor indicado pela linha contínua que representa a extrapolação da contribuição dos portadores injetados (ajuste linear do sinal antes do limiar, quando os portadores injetados contribuem predominantemente) podemos verificar que a contribuição da luz (resultado desta subtração) é maior que a contribuição de portadores injetados (valor dado pelo ajuste linear) para os valores mais altos da amplitude da corrente. Esta extrapolação da componente de portadores injetados é válida se consideramos não haver alterações na geometria da respectiva fonte de calor após o limiar. Aqui podemos concluir mais claramente que a componente de luz é a mais importante no aquecimento do espelho.

Outro resultado fundamental que leva a esta conclusão é a comparação entre a redução da luz emitida pelo laser e a redução no módulo do sinal (obtidos com a retirada das camadas traseiras). A figura 5-20 nos dá uma potência emitida de cerca de 4.4 mW para uma corrente de 124 mA enquanto a figura 4-5 nos dá 85 mW para a mesma corrente (extrapolação do ajuste linear da curva $LxI_{modulada}$ após o limiar). Chegamos a uma redução da luz emitida em torno de 20 vezes. A figura 5-1a) nos dá um valor máximo de módulo de sinal igual a 481 μ V enquanto na figura 5-21a) há redução deste valor para 25 μ V, ou seja, também aqui temos uma redução de cerca de 20 vezes no valor máximo medido. Importante notar que as medidas foram feitas sobre as mesmas condições (passos de 0,1 μ m) e que o nível do sinal de continuou o mesmo.



Figura 5.21 a) - Mapa do módulo do sinal da amostra 864 (f= 100 kHz, corrente ac = 124 mA, área varrida: 4,0x4,0 μm²) após retirada das camadas traseiras

0.25 V 0.059 V

Figura 5.21 b) - Mapa do sinal de da amostra 864 (f=100 kHz, corrente ac = 124 mA, área varrida: 4,0x4,0 μ m²) após retirada das camadas traseiras

O laser 1248 também teve a alumina dianteira removida na região ativa. Verificou-se que durante o processo de retirada da cera de abelha, em alguns lasers, ocorria a remoção acidental da parte superior do Al_2O_3 (região oposta à solda) do espelho frontal devido a problemas de adesão desta camada. Para os lasers com a junção p voltadas para cima este problema era mais crítico pois a região ativa era fatalmente atingida. A simples retirada da alumina, no entanto, não deve alterar significativamente o valor de $\Delta R/R$ medido (como mostrado no apêndice 2 pela equação A2-15)

A figura 5-22 mostra uma medida com variação da amplitude da corrente, antes da retirada da alumina do laser 1248 e sobre o espelho frontal.

Novamente é interessante ressaltar que a região onde o módulo do sinal perde seu aspecto fortemente linear (por volta dos 90 mA) possui uma região correspondente na medida de luz por corrente da figura 4-11 (por volta dos 100 mA) se levamos em conta que os efeitos térmicos devem ocorrer, em nossas medidas, para correntes mais baixas que as apresentadas nas medidas moduladas de luz por corrente (como discutido anteriormente).

A figura 5-23 mostra as curvas de luz e tensão por corrente do laser 1248 obtidas após a remoção da alumina.

A análise dos dados obtidos para o laser 1248, após a retirada da alumina, ficou prejudicada pelo que pode ser notado nas figuras 5-24-a) e 5-24-b). O sinal

de no mapa do espelho frontal apresentou certas manchas que indicam não uniformidade nas propriedades ópticas da superficie. O máximo na amplitude do sinal do mapa tem sua posição coincidindo justamente com uma dessas manchas e fica difícil avaliar a influência das alterações locais das propriedades ópticas sobre o sinal ac (a medida foi feita usando-se passos de 0,1 µm e excitação por uma onda senoidal de 128 mA de amplitude e 100 kHz de frequência).

Na verdade esta coincidência de posição entre o máximo do módulo do sinal e "manchas" no sinal de ocorria mesmo antes da retirada da alumina no laser 1248 e será abordado mais adiante.



Figura 5.22 - Variação da corrente ac sobre o espelho do laser 1248, sobre o ponto de máximo módulo de sinal ac (f=100 kHz)



Figura 5.23 - Medidas luz x corrente e tensão x corrente para a amostra 1248 sem camadas nos dois espelhos



Figura 5.24 a) - Mapa do módulo do sinal da amostra 1248 (f=100 kHz, corrente ac = 128 mA, área varrida: 4,0x4,0 μm^2)



Figura 5.24 b) - Mapa do sinal de da amostra 1248 (f=100 kHz, corrente ac = 128 mA, área varrida: 4,0x4,0 μm^2)

Todos estes resultados nos levam a afirmar que a componente de luz é a mais importante nos processos de aquecimento do espelho do laser. Uma vez determinado isto, resta-nos agora pesquisar qual dos processos de aquecimento que utilizam a luz como fonte de calor é o mais importante. Consideramos dois processos principais: a absorção da luz pela camada de alumina e processos de absorção superficial devido a curvatura das bandas de energia e presença ali de aglomerados de As e defeitos superficiais. No apêndice 3 demonstramos que o coeficiente de absorção da alumina precisaria ser um milhão de vezes maior que o valor disponível na literatura para que o aquecimento do espelho fosse devido à absorção, nesta camada, da luz emitida pelo laser. Demonstramos também que a absorção na superficie do cristal pode causar o aquecimento do espelho sem que os valores dos parâmetros envolvidos fujam à realidade.

5.5) As manchas nos mapas

Como citado no parágrafo anterior, o laser 1248 apresentava manchas no mapa de seu sinal de mesmo antes da retirada da camada de alumina do espelho dianteiro. A figura 5.25 mostra os mapas do módulo do sinal ac e do sinal de feitos antes da retirada do Al₂O₃ do espelho frontal e sob as mesmas condições da medida apresentada na figura 5.24.



Figura 5.25 a) - Mapa do módulo do sinal ac da amostra 1248 (f= 100 kHz, corrente ac = 128 mA, área varrida: 4,0x4,0 µm²) antes da retirada da alumina



Figura 5.25 b) - Mapa do sinal de da amostra 1248 (f=100 kHz, corrente ac = 128 mA, área varrida: 4,0x4,0 μm^2) antes da retirada da alumina

A comparação entre as figuras 5.24 e 5.25 deixa claro a influência da não uniformidade do sinal de sobre o sinal ac. Nos dois casos a máxima amplitude ac tem a mesma posição de uma das manchas de maior sinal de na figura 5.25 b) e suas equivalentes na figura 5.24 b), chegando a se alternar nas duas situações. Inicialmente pensava-se que as manchas seriam devidas a problemas na camada de alumina, mas como elas persistiram mesmo após a retirada desta camada do espelho, acreditamos tratar-se de algum tipo de defeito na própria superfície do cristal (talvez alguma contaminação ocorrida entre o processo de clivagem dos espelhos no ar e a deposição do Al₂O₃, pois neste intervalo também foram feitas caracterizações da amostra pela Telebrás; ou defeitos do próprio cristal).

Tivemos problemas deste tipo também com a amostra 1247. Nela surgia uma mancha que inicialmente se manifestava nos mapas do módulo, da fase e do sinal dc. Medidas feitas sob as mesmas condições, mas ao longo de dois meses, mostraram que a mancha permaneceu apenas no mapa do sinal dc. Isto é apresentado nas figuras seguintes onde, neste caso, não houve retirada de alumina em nenhum momento (observar a pequena mancha com alto módulo de sinal na figura 5.26 a)).



Figura 5.26 a) - Mapa do módulo do sinal da amostra 1247 (f=100 kHz, corrente ac = 124 mA, área varrida: 4,0x4,0 μm^2)



Figura 5.26 b) - Mapa da fase do sinal da amostra 1247 (f=100 kHz, corrente ac = 128 mA, área varrida: 4,0x4,0 µm²)



Figura 5.26 c) - Mapa do sinal de da amostra 1247 (f=100 kHz, corrente ac = 128 mA, área varrida: $4,0x4,0 \ \mu m^2$)



Figura 5.27 a) - Mapa do módulo do sinal da amostra 1247 (f=100 kHz, corrente ac = 124 mA, área varrida: 4,0x4,0 μ m²) dois meses depois da medida da figura 5.26



Figura 5.27 b) - Mapa da fase do sinal da amostra 1247 (f=100 kHz, corrente ac = 128 mA, área varrida: 4,0x4,0 μm^2) dois meses depois da medida da figura 5.26



Figura 5.27 c) - Mapa do sinal de da amostra 1247 (f= 100 kHz, corrente ac = 128 mA, área varrida: 4,0x4,0 µm²) dois meses depois da medida da figura 5.26

Comparando as figuras 5.26 a) e 5.27 a) vemos como o desaparecimento da pequena mancha diminui o valor máximo da amplitude do sinal e a distribuição desta no mapa.

O fato da mancha permanecer apenas no mapa do sinal dc, com o passar do tempo, nos leva a acreditar que nesta região estejam ocorrendo problemas de adesão da alumina (bolhas). Quando esta adesão é fraca ocorre que a alumina passa a dilatar-se mais intensamente ali e na mesma frequência de excitação da amostra o que nos levou a obter uma grande amplitude no sinal daquela região.

Capítulo 6

Conclusões e perspectivas

A Microscopia Fototérmica de Reflexão mostrou-se uma técnica extremamente poderosa para uma melhor compreensão dos processos de aquecimento de espelhos de lasers de semicondutor.

O primeiro resultado a que chegamos foi que a camada de alumina que reveste o espelho dos lasers tem, na forma como ela se apresenta, pouca importância na distribuição da temperatura desta região. A diferença nas propriedades térmicas das camadas semicondutoras do laser desempenha um papel muito mais importante na distribuição térmica do espelho.

O aquecimento da superficie do cristal, por onde há emissão de luz, é maior que ao longo da cavidade do laser.

A principal responsável pelo aquecimento do espelho é a absorção da luz emitida pelo próprio dispositivo e não a recombinação dos portadores injetados para alimentá-lo. A absorção desta luz pela camada de alumina é desprezível e o principal processo de aquecimento do espelho é o de absorção superficial (devido à curvatura das bandas de energia, presença de aglomerados de As e defeitos).

As perspectivas para trabalhos futuros estão ligadas ao estudo mais detalhado das causas e conseqüências das manchas que surgiram nos mapas medidos, assim como a um tratamento teórico mais refinado para analisar a influência, sobre a distribuição térmica no espelho dos dispositivos, das camadas crescidas no laser. Este último provavelmente exigirá a solução numérica da equação de difusão de calor devido à quebra de simetria do sistema.

Apêndice 1

Programas usados para cálculos numéricos no Mathematica

Programa para integração numérica da equação (1.45) usando o Mathematica (parâmetros explicitados no texto correspondente)

```
g = 1/(2*N[Pi]);
t[r,z] := NIntegrate[g*p*BesselJ[0,p*r/10]*
 Exp[-(p/4)^2]*Exp[-(Sqrt[p^2-2*I/25])*z/10]/Sqrt[p^2-2*I/25],
 {p,0,Infinity},
 WorkingPrecision->20];
a = Table[0, \{i, 1, 61\}, \{j, 1, 61\}];
Amp = Table[0, \{i, 1, 61\}, \{i, 1, 61\}];
Fas = Table[0, \{i, 1, 61\}, \{j, 1, 61\}];
Do[
  Do[
    \{a[[i,j]] = t[i-1,j-1], \}
    Amp[[i,j]] = Abs[a[[i,j]]],
    Fas[[i,j]] = ArcTan[Re[a[[i,j]]], Im[a[[i,j]]]]
    {i,1,61}
   1,
  {j,1,61}
 l;
ListPlot3D[Amp,AxesLabel->{"z","r","Temperatura /(Po/k) (1/micro.m) "},
 PlotRange->All,Ticks->{\{0\},\{0\},\{0,0.2,0.4\}}];
ListPlot3D[Fas,AxesLabel->{"z","r","Fase (rad)"},
 PlotRange->All, Ticks->{\{0\}, \{0\}, \{0, 0.5, 1.0, 1.5\}}];
```

L

į.

ł

ł

Í

Programa para integração numérica das equações (5.21), (5.35) e cálculo da resultante, usando o Mathematica (a variável de integração é p= $2.\pi$. β)

```
(* k1= condutividade térmica do meio 1 (interno) em W/(microm.k) *)
(* k2= condutividade térmica do meio 2 (externo) em W/(microm.k) *)
(* d= espessura da camada mais externa em microm *)
(* l= termo que representa razão entre a intensidade *)
(*da fonte superficial (i0) e da fonte gaussiana interna (f0) *)
(* por f0=i0/l, ou seja, em que comprimento do meio interno*)
(* temos a mesma energia depositada na superfície, dado em microm *)
(* mil= comprimento de difusão térmica do meio 1 em microm *)
(* mi2= comprimento de difusão térmica do meio 2 em microm *)
(* ra = raio característico da fonte interna em microm *)
(* ral= raio característico da fonte superficial em microm *)
(* Respeitando-se estas unidades de medida temos que o *)
(* resultado da integração é dado em K.microm3/W *)
g = 1/(2*N[Pi]);
k1 = 0.438*10^{(-4)};
k^2 = 0.351 \times 10^{(-4)};
d = 1.56 \times 10^{(-1)};
1 = 9.045;
mi1 = 9.045;
mi2 = 6.103;
ra = 0.5:
ra1 = 0.5;
z=0;
t[r] := NIntegrate[g*p*BesselJ[0,p*r/10]*(
N[Pi]*ra^2*Exp[-p^2*ra^2/4]*(((p^2-2*I/mi2^2)*k2)^{(-1)}-((p^2-k2)^2)^{(-1)})
2*I/mi1^{2}*k1)^{(-1)}
)/(
Exp[-Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d]*(
(k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]/(k1*Sqrt[p^2-2*I/mi1^2]))-1)-
Exp[Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d]*(
(k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]/(k1*Sqrt[p^2-2*I/mi1^2]))+1)
)*(
Exp[Sqrt[p^2-2*l/mi2^2]*(z/10)]+
Exp[-Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*(z/10)]
)+
N[Pi]*ra^2*Exp[-p^2*ra^2/4]/((p^2-2*I/mi2^2)*k2)
),
{p,0,Infinity},
WorkingPrecision->12,PrecisionGoal->5];
```

```
t1[r_] := NIntegrate[-g*p*BesselJ[0,p*r/10]*(
(Exp[2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d-p^2*ra1^2/4]*l*(k1*Sqrt[p^2-
2*I/mi1^2+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2])*N[Pi]*ra1^2)/(
-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*(k1*Sqrt[p^2-2*I/mi1^2]*(1+Exp[2*Sqrt[p^2-
2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*(1-Exp[2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d]))
)*Exp[Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*z/10]+(
1*(k1*Sqrt[p^2-2*I/mi1^2]-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2])*
N[Pi]*ra1^2)/(Exp[p^2*ra1^2/4]*k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*
(k1*Sqrt[p^2-2*I/mi1^2]*(1+Exp[2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d])-k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]+k2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^
2*I/mi2^2]*
(1-Exp[2*Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*d]))
)*Exp[-Sqrt[p^2-2*I/mi2^2]*z/10]
),
{p,0,Infinity},
WorkingPrecision->12,PrecisionGoal->5];
a = Table[0, \{i, 1, 101\}];
Amp = Table[0, \{i, 1, 101\}];
Fas = Table[0, \{i, 1, 101\}];
a1 = Table[0, \{i, 1, 101\}];
Amp1 = Table[0, \{i, 1, 101\}];
Fas1 = Table[0, \{i, 1, 101\}];
res = Table[0, \{i, 1, 101\}];
Ampr = Table[0, \{i, 1, 101\}];
Fasr = Table[0, \{i, 1, 101\}];
     Dof
          \{a[[i]]=t[i-1],
           a1[[i]] = t1[i-1],
           res[[i]]=a[[i]]+a1[[i]],
           Amp[[i]] = Abs[a[[i]]],
            Amp1[[i]] = Abs[a1[[i]]],
           Ampr[[i]] = Abs[res[[i]]],
           Fas[[i]] = ArcTan[Re[a[[i]]], Im[a[[i]]]],
           Fas1[[i]] = ArcTan[Re[a1[[i]]], Im[a1[[i]]]],
           Fasr[[i]] = ArcTan[Re[res[[i]]], Im[res[[i]]]]
           {i,1,101}
        ];
ListPlot[Amp,AxesLabel->{"r","Temperatura/f0
(K. microm3/W) "},PlotRange->All,Ticks->
```

 $\{\{0\},\{0,0.2,0.4\}\}\}$

123

```
ListPlot[Fas,AxesLabel->{"r","Fase (rad)"},
PlotRange->All,Ticks->{\{0\},\{0,0.5,1.0,1.5\}}];
ListPlot[Amp1,AxesLabel->{"r","Temperatura/f0
(K. microm3/W) "},PlotRange->All,Ticks->
\{\{0\},\{0,0.2,0.4\}\}\};
ListPlot[Fas1.AxesLabel->{"r", "Fase (rad)"},
PlotRange->All, Ticks->{\{0\}, \{0, 0.5, 1.0, 1.5\}}];
ListPlot[Ampr,AxesLabel->{"r","Temperatura/f0
(K. microm3/W) "},PlotRange->All,Ticks->
\{\{0\},\{0,0.2,0.4\}\}\}
ListPlot[Fasr,AxesLabel->{"r","Fase (rad)"},
PlotRange->All.Ticks->{\{0\}, {0.0.5.1.0.1.5}}];
```

Apêndice 2

Cálculo do dR/dT efetivo

Vamos calcular o dR/dT efetivo para um sistema de três camadas (ar, Al_2O_3 e GaAs), conforme mostrado na figura A2-1, considerando incidência normal da luz.



Figura A2.1 - Esquema da incidência e reflexão da luz do laser sonda na superficie do amostra

Sendo E_0 o módulo do campo elétrico incidente e R_1 e R_2 as refletividades nas interfaces ar-alumina e alumina-GaAs respectivamente, temos que os campos elétricos E_1 e E_2 podem ser escritos como :

$$E_{1} = R_{1}^{1/2} \cdot E_{0} \cdot e^{i.(k.x - \omega.t)}$$
(A2-1)

$$E_{2} = (1 - R_{1}) \cdot R_{2}^{1/2} \cdot E_{0} \cdot e^{i.(k.x - \omega.t + \phi)}$$
(A2-2)

onde consideramos ondas planas, eixo x perpendicular às interfaces e desprezamos as reflexões de ordem superior.

A diferença de fase ϕ entre os campos E_1 e E_2 é devida à diferença de caminho óptico (apenas E_2 atravessa a alumina) e vale :

$$\phi = \frac{2.\pi.n_a.2.e}{\lambda}$$
(A2-3)

onde n_a é o índice de refração da alumina (parte real), *e* é a espessura desta camada e λ é o comprimento de onda da radiação.

A intensidade do campo refletido resultante vale então :

$$I = (E_1 + E_2) . (E_1^* + E_2^*) = E_0^2 . \{R_1 + (1 - R_1)^2 . R_2 + 2 . (1 - R_1) . (R_1 . R_2)^{1/2} . \cos(\phi)\}$$

Sendo ${E_0}^2$ a intensidade do campo incidente (I₀) podemos escrever a equação anterior como :

$$I / I_0 = R_1 + (1 - R_1)^2 R_2 + 2.(1 - R_1) (R_1 R_2)^{1/2} \cos(\phi)$$
 (A2-4)

Consideraremos os índices de refração (contidos nas refletividades e em ϕ) e a espessura da camada de alumina (contida em ϕ) funções da temperatura.

O cálculo da variação desta intensidade relativa com a temperatura nos dá que :

$$\frac{1}{I_0} \cdot \frac{\Delta I}{\Delta T} = \frac{dR_1}{dT} \cdot \left\{ 1 - 2 \cdot (1 - R_1) \cdot R_2 - 2 \cdot \sqrt{R_1 \cdot R_2} \cdot \cos(\phi) + \frac{1 - R_1}{\sqrt{R_1 \cdot R_2}} \cdot R_2 \cos(\phi) \right\} + \frac{dR_2}{dT} \cdot \left\{ (1 - R_1)^2 + \frac{1 - R_1}{\sqrt{R_1 \cdot R_2}} \cdot R_1 \cos(\phi) \right\} + \frac{d\phi}{dT} \cdot \left\{ 2 \cdot (1 - R_1) \cdot \sqrt{R_1 \cdot R_2} \sin(\phi) \right\}$$
(A2-5)

onde consideramos que a variação de temperatura ΔT é a mesma em qualquer uma das interfaces pois a camada de alumina será muito fina.

Usando a equação (A2-3) temos que :

$$\frac{d\phi}{dT} = \frac{4 \cdot \pi}{\lambda} \left(e \cdot \frac{dn_a}{dT} + n_a \cdot \frac{de}{dT} \right) =$$

$$= \frac{4 \cdot \pi \cdot n_a \cdot e}{\lambda} \cdot \left(\frac{1}{n_a} \cdot \frac{dn_a}{dT} + \frac{1}{e} \cdot \frac{de}{dT} \right) =$$

$$\phi \cdot \left(\frac{1}{n_a} \cdot \frac{dn_a}{dT} + \alpha_T \right)$$
(A2-6)

onde α_T é o coeficiente de dilatação linear da alumina.

Escrevendo as refletividades em função das partes real e imaginária dos índices de refração (o índice <u>a</u> indica alumina e o <u>b</u> indica GaAs) temos, para $k_a = 0$ e o índice de refração do ar independente da temperatura :

$$R_{1} = \frac{(n_{a} - 1)^{2}}{(n_{a} + 1)^{2}} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{1}{R_{1}} \cdot \frac{dR_{1}}{dT} = \frac{4}{(n_{a}^{2} - 1)} \cdot \frac{dn_{a}}{dT} \quad (A2-7)$$

$$R_{2} = \frac{(n_{b} - n_{a})^{2} + k_{b}^{2}}{(n_{b} + n_{a})^{2} + k_{b}^{2}} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{dR_{2}}{dT} = \alpha \cdot \frac{dn_{b}}{dT} + \beta \cdot \frac{dn_{a}}{dT} + \gamma \cdot \frac{dk_{b}}{dT} \quad \text{onde}$$

$$\alpha = \frac{4 \cdot n_{a} \cdot [n_{b}^{2} - n_{a}^{2} - k_{b}^{2}]}{[(n_{b} + n_{a})^{2} + k_{b}^{2}]^{2}}$$

$$\beta = \frac{-4 \cdot n_{b} \cdot [n_{b}^{2} - n_{a}^{2} + k_{b}^{2}]^{2}}{[(n_{b} + n_{a})^{2} + k_{b}^{2}]^{2}}$$

$$\gamma = \frac{8 \cdot n_{a} \cdot n_{b} \cdot k_{b}}{[(n_{b} + n_{a})^{2} + k_{b}^{2}]^{2}}$$

$$(A2-8)$$

A camada de alumina deve ter a espessura de um quarto do comprimento de onda, nesta camada, emitido pelo laser e este valor foi calculado no capítulo 5 como sendo 156 nm.

Os valores das propriedades ópticas e térmicas necessárias estão listados abaixo junto com as respectivas fontes bibliográficas.

* $n_a = 1,57$ para um comprimento de onda de 666 nm [9] * $dn_a / dT = 13 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ (valor médio para safira no visível) [19] * $\alpha_T = 5x10^{-6}$ ou $6.7x10^{-6}$ K-1 a depender da orientação da rede [19] * $n_b = 3.809$ para um comprimento de onda de 666 nm [23] * $k_b = 0.173$ para um comprimento de onda de 666 nm [23] * $\frac{1}{n_b} \cdot \frac{dn_b}{dT} = (4.5 \pm 0.2)x10^{-5}$ K⁻¹ para comprimentos de onda entre 5 e 20 µm (onde n_b vale 3.2597) [23]

Considerando $k_a = 0$ e $dk_a/dT = dk_b/dT = 0$ podemos substituir os valores nas fórmulas (A2-8), (A2-7), (A2-6) e (A2-5) para obter :

$$\frac{1}{I_0} \cdot \frac{\Delta I}{\Delta T} \cong [10 + 8, 0.\cos(\phi) - 2, 5, \phi. \sin(\phi)] \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$$
(A2-9)

Usando (A2-3), com e = 156 nm, e substituindo em (A2-9) chegamos a :

$$\frac{1}{I_0} \cdot \frac{\Delta I}{\Delta T} \approx 21 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1} \qquad (A2-10)$$

É simples mostrar que (A2-10) corresponde a um valor de dR/dT efetivo :

$$\Delta I = \Delta R_{ef} I_0 = \left(\frac{dR_{ef}}{dT} \Delta T\right) I_0 \implies \frac{1}{I_0} \frac{\Delta I}{\Delta T} = \frac{dR_{ef}}{dT}$$
(A2-11)

onde dR_{ef}/dT é um valor efetivo devido as duas interfaces.

Seguindo o mesmo raciocínio chegamos a que (A2-4) nos dá o valor de R efetivo pois I = R_{ef} .I₀ e substituindo os valores das propriedades ópticas em (A2-7), (A2-8) e (A2-3) podemos obter o valor deste R_{ef} como sendo :

$$R_{ef} \cong 0,38 \qquad (A2-12)$$

A partir de (A2-10), (A2-11) e (A2-12) podemos escrever que :

$$\frac{1}{R_{ef}} \cdot \frac{dR_{ef}}{dT} \approx 54 \times 10^{-6}$$
 (A2-13)

Considerando apenas a camada de GaAs (alumina removida) podemos substituir em (A2-8) os parâmetros deste material, índice <u>b</u>, e do ar, índice <u>a</u> e independente da temperatura, chegando a :

$$R_{GaAs} \cong 0,34 \qquad (A2-13)$$

$$\frac{1}{R_{GaAs}} \cdot \frac{dR_{GaAs}}{dT} \cong 43 \times 10^{-6}$$
 (A2-14)

As fórmulas (A2-12) a (A2-14) nos permitem escrever que :

1

÷

1

$$\frac{dR_{ef}}{R_{ef}} \cdot \frac{R_{GaAs}}{dR_{GaAs}} \cong 1,3$$
 (A2-15)

ou seja, para uma mesma variação da temperatura, devemos esperar uma queda, no módulo do sinal ac, de cerca de 1,3 vezes devido à retirada da alumina.

Apêndice 3

Absorção na alumina e na superfície

Consideremos a trajetória da luz emitida pelo laser amostra como indicado na figura abaixo :



Figura A3.1 - Caminho da luz do laser amostra na região do espelho frontal

onde E_T representa o campo elétrico que atravessa a alumina e atinge o ar (desprezamos aqui os processos de reflexão).

Sendo E_0^2 a intensidade de luz incidente temos :

* $I_{inc} = E_0^2$ * $I_T = E_T^2 = E_0^2$. e -(α .d)

onde α é o coeficiente de absorção da alumina, d é a espessura da camada desta última e I_T é a intensidade transmitida para o ar.

A intensidade de luz absorvida pela alumina valerá então :

$$I_{ab} = I_{inc} - I_T = E_0^2 .(1 - e^{-\alpha.d})$$
 (A3-1)

O valor de α para a safira é da ordem de 10^{-10} nm⁻¹ [9] e como o valor de d é 156 nm (calculado no capítulo 5) temos α .d = 1,56x10⁻⁸ o que nos permite substituir a exponencial pela sua expansão até primeira ordem em torno do valor zero para seu argumento :

$$e^{-\alpha.d} \cong 1-\alpha.d$$
 (A3-2)

Substituindo (A3-2) em (A3-1) ficamos com :

$$I_{ab} \approx E_0^2 . \alpha.d \Rightarrow \alpha \approx \frac{I_{ab}}{E_0^2 . d}$$
 (A3-3)

Precisamos obter os valores de E_0^2 e de I_{ab} . O primeiro é facilmente obtido através das medidas de luz por corrente. Usemos a caracterização inicial do laser 627 (figura 4-7). Nela podemos ver que para uma corrente de 94 mA há uma emissão em torno de 60 mW. Considerando que esta emissão se dá em uma área circular com um raio aproximado de 1,15 µm (espessura que vai do centro da região ativa até o fim da camada de GaAlAs confinante de luz na figura 4-2) temos uma intensidade transmitida da ordem de 15x10⁻⁶ mW/nm². É importante notar aqui que o valor da área empregado para o cálculo da intensidade transmitida foi superestimado e que isto concorre para diminuir o valor do coeficiente de absorção α . Substituindo esta intensidade em $I_T = E_0^2$. e ^{-(α .d)} juntamente com (A3-2) e d = 156 nm temos que :

$${\rm E_0}^2 \approx \frac{15 \times 10^{-6}}{1 - 156.\alpha}$$
 (A3-4)

em mW /nm² para α em nm⁻¹.

O valor de I_{ab} vem da seguinte expressão :

$$\frac{\Delta R}{R} = \left(\frac{1}{R} \cdot \frac{dR}{dT}\right) \cdot \left(\frac{\Delta T}{f0}\right) \cdot f0 \qquad (A3-5)$$

onde $f0 = I_{ab}/l$, o valor do lado esquerdo da equação vem dos dados experimentais, o primeiro parênteses foi calculado no apêndice 2, equação (A2-13), e o valor do segundo parênteses vem dos cálculos numéricos do capítulo 5, pois I_{ab} será a intensidade de energia usada para aquecer o espelho.

A figura 5-11 nos dá como valor máximo $\Delta R/R \cong 525 \times 10^{-6}$. A equação (A2-13) nos dá $\left(\frac{1}{R}, \frac{dR}{dT}\right) = 54 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Usando o gráfico da amplitude resultante na figura 5-5 temos $\Delta T/f0 \cong 1,10 \times 10^5 \text{ K}.\mu\text{m}^3/\text{W}$ (máximo valor). Substituindo estes valores em (A3-5) chegamos a :

$$f0 \cong 8.8 \times 10^{-5} \text{ W/}\mu\text{m}^3$$
 (A3-6)

Precisamos agora determinar o valor de l tal que a relação entre as fontes interna e superficial respeite o discutido na análise das figuras 5-14 e 5-15 onde
percebemos que a contribuição apenas da fonte interna (figura 5-15) faz com que o sinal caia a 25% do valor que tem na região onde as duas fontes são importantes (figura 5-14), ou seja, precisamos de um valor de l tal que se satisfaça a relação :

$$\left(\frac{\Delta T}{f0}\right)_{int} = 0.25 \left(\left(\frac{\Delta T}{f0}\right)_{int} + \left(\frac{\Delta T}{f0}\right)_{sup} \right) \Rightarrow \left(\frac{\Delta T}{f0}\right)_{sup} = 3. \left(\frac{\Delta T}{f0}\right)_{int}$$
(A3-7)

onde desprezamos a diferença de fase entre as contribuições e somamos algebricamente as componentes de cada fonte.

A figura 5-5 nos dá que para um valor de $l = 9.045 \mu m$ a amplitude da fonte superficial é cerca de 10.9 vezes o valor obtido para a fonte interna (em r = 0). O fator *l* surge multiplicando a expressão da integral da temperatura devida à fonte superficial (iguala a dimensão das integrais das duas fontes) e isto nos permite encontrar o valor de que satisfaz a (A3-7) através de uma simples regra de três.

$$l = \frac{3 \times 9.045}{10.9} \cong 2.50 \ \mu \text{m}$$
 (A3-8)

Usando (A3-8) e que f $0 = I_{ab}/l$ chegamos, através de (A3-6), a :

$$I_{ab} \cong 22,1 \times 10^{-8} \text{ mW/nm}^2$$
 (A3-9)

Substituindo (A3-9) e (A3-4) em (A3-3) chegamos a um valor de α da ordem de 10^{-4} nm⁻¹, ou seja, para que a absorção, na alumina, da luz emitida pelo laser amostra fosse a principal responsável pelo aquecimento do espelho precisaríamos que o coeficiente de absorção do Al₂O₃ fosse cerca de um milhão de vezes maior do que ele o é (note que o valor de α obtido é tão diferente do real que a simples inclusão das reflexões, no modelo usado, não alteraria as conclusões).Podemos então afirmar que a absorção pela alumina da luz emitida pela amostra tem uma participação insignificante no aquecimento do espelho do laser.

Outra possível causa para o aquecimento do espelho dos lasers é o fato da curvatura das bandas de energia na superfície do cristal diminuir localmente o "gap" de energia, favorecendo assim, os processos de absorção. A presença, na superfície do cristal, de aglomerados de As e defeitos em geral também aumenta a absorção.

Podemos ter uma idéia da absorção de luz necessária para que estes processos sejam os responsáveis pelo aquecimento do espelho. A percentagem de radiação emitida pela amostra que precisa ser absorvida para gerar o aquecimento esperado do espelho é dada pela razão I_{ab} / E_0^2 onde I_{ab} é dada em (A3-9) e E_0^2 em (A3-4) (para α da ordem de 10⁻¹⁰ nm⁻¹). O valor então obtido é de

$$\frac{I_{ab}}{E_0^2} \cong 1,5\%$$
 (A3-10)

ou seja, os processos superficiais (curvatura de bandas de energia, aglomerados de As, defeitos, ...) precisam absorver 1,5% da radiação emitida pelo laser amostra para gerarem o respectivo aquecimento do espelho.

De uma maneira simplificada, podemos considerar que uma redução no valor da condutividade térmica do meio a um quarto do considerado leva a um aumento de quatro vezes no valor de ($\Delta T/f0$) obtido numericamente. Isto é verdade se desconsideramos a camada de Al₂O₃, já demonstrado ser pouco importante, e substituímos o GaAs pelo GaAlAs. Neste caso o valor obtido em (A3-10) cai para 0,4% mostrando que o valor da absorção na superfície do cristal necessária para aquecer o espelho da amostra possui valores que não fogem à realidade (considerando toda a perda do dispositivo e uma relação entre as fontes de calor dada por l = 2,5 µm).

Apêndice 4

Cálculo dos níveis de energia do poço de potencial

Na figura 3.6, a camada de GaAs provoca uma descontinuidade nos níveis de energia das bandas de valência (ΔE_v) e condução (ΔE_c) das camadas de GaAlAs dadas por:

*
$$\Delta E_v \sim 0.33 \Delta E_g$$
 [5]

* $\Delta E_c \sim 0.67 \Delta E_g$ [5]

* $\Delta E_g = (E_g)_{GaAlAs} - (E_g)_{GaAs} \sim x.1,27eV$ [5] onde x determina a concentração de Al em Ga_{1-x}Al_xAs

Esta descontinuidade funciona como confinante de elétrons e buracos na camada ativa.

Trataremos elétrons (e buracos) como portadores livres com a mesma massa que têm no "bulk" do cristal (o tratamento de elétrons e buracos é análogo). O Hamiltoniano para os elétrons na banda de condução da camada ativa é:

$$H_{c}(\mathbf{r}) = V_{c}(z) - \frac{\hbar^{2}}{2m_{c}} \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} - \frac{\hbar^{2}}{2m_{c}} \frac{\partial^{2}}{\partial r_{p}^{2}} = V_{c}(z) - \frac{\hbar^{2}}{2m_{c}} \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} + H(r_{p}) \qquad (A4-1)$$

onde * o subíndice c indica a banda de condução

- * z define a direção normal às interfaces
- * \mathbf{r}_{p} está contido no plano das interfaces
- * $V_c(z)$ é a energia potencial da banda de condução na região ativa

A equação de Schrödinger é :

$$H_{c}(\mathbf{r}) \mathbf{u}(\mathbf{r}) = E.\mathbf{u}(\mathbf{r}) \qquad (A4-2)$$

Usando a técnica de separação de variáveis, ou seja, escrevendo $u(\mathbf{r}) = \psi_k(\mathbf{r}_p).v(z)$ e substituindo na equação (A4-2) com H_c dado em (A4-1) chegamos à conclusão que v(z) deve satisfazer à equação:

$$\{ V_c(z) - \frac{\hbar^2}{2m_c} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \} v(z) = E_z v(z) \qquad (A4-3)$$

onde para ΔE_c suficientemente grande podemos tomar $V_c(z)$ como um poço de potencial infinito obtendo como soluções de (A4-3)

$$v(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \cos(\frac{l\pi}{L_z}z)$$
 para $l = 1, 3, 5, ...$

e

$$v(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \operatorname{sen}(\frac{l\pi}{L_z}z)$$
 para $l = 2, 4, 6, ...$ (A4-4)

com

$$\mathrm{E}_{\mathrm{z}} = \frac{l^2 \, \pi^2 \, \hbar^2}{2 m_{\mathrm{c}} L_{\mathrm{z}}^2} = \mathrm{E}_{\mathrm{lc}}$$

onde L_z é a espessura da camada ativa.

Os detalhes da resolução que leva às equações (A4-4) podem ser encontrados na referência [5]

A separação de variáveis nos dá ainda que a equação que $\psi_k(\mathbf{r}_p)$ deve satisfazer é:

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}_{p}) \,\psi_{k}(\mathbf{r}_{p}) = (\mathbf{E} - \mathbf{E}_{z}) \,\psi_{k}(\mathbf{r}_{p}) \qquad (A4-5)$$

onde $\psi_k(\mathbf{r}_p)$ é uma função de onda de Bloch bidimensional:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_{p}) = \mathbf{u}_{\mathbf{k}p}(\mathbf{r}_{p}) \cdot \exp(i \, \mathbf{k}_{p} \mathbf{r}_{p}) \qquad (A4-6)$$

onde $u_{kp}(\mathbf{r}_p)$ tem a periodicidade da rede cristalina (maiores detalhes sobre funções de Bloch na referência [6]).

Em analogia com o "bulk" do semicondutor temos:

$$H(\mathbf{r}_{p}) \psi_{k}(\mathbf{r}_{p}) = \frac{\hbar^{2} k_{p}^{2}}{2m_{c}} \psi_{k}(\mathbf{r}_{p}) \qquad (A4-7)$$

A energia total para os elétrons na banda de condução será:

$$E_{c}(\mathbf{k}_{p},l) = \frac{\hbar^{2} k_{p}^{2}}{2m_{c}} + E_{lc} ; l = 1,2,3,4...$$
 (A4-8)

e analogamente para os buracos da banda de valência teremos:

$$E_{v}(k_{p},l) = \frac{\hbar^{2}k_{p}^{2}}{2m_{v}} + l^{2}\frac{\hbar^{2}\pi^{2}}{2m_{v}}\frac{1}{L_{z}^{2}} = \frac{\hbar^{2}k_{p}^{2}}{2m_{v}} + E_{lv} \quad ; l=1,2,3,4... \quad (A4-9)$$

As funções de onda completas são:

$$\psi_{c}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{L_{z}}} \quad \psi_{bc} \ (\mathbf{r}_{p}) \qquad (A4-10)$$

$$sen(\frac{l\pi}{L_{z}}z) \ ; l=2,4,6...$$

$$\psi_{v}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2}{L_{z}}} \psi_{kv}(\mathbf{r}_{p})$$

$$sen(\frac{l\pi}{L_{z}}z) ; l=1,3,5...$$
(A4-11)
$$sen(\frac{l\pi}{L_{z}}z) ; l=2,4,6...$$

para elétrons e buracos respectivamente e normalizadas para $\psi_{kp}~(\textbf{r}_p)$ normalizadas.

Regras de Seleção:

Imagine que o sistema seja perturbado por um campo elétrico polarizado no plano da camada ativa (direção x) e se propagando pelo poço. O hamiltoniano de interação do elétron com este campo é :

$$\mathbf{H}' = \frac{-e}{m} \mathbf{A}.\mathbf{p} \qquad (A4-12)$$

onde $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \mathbf{x} (A_0 / 2) \exp [i(\mathbf{wt} - \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})]$ é o potencial vetor e **p** é o momento do elétron.

A probabilidade de transição do elétron da banda de condução para a de valência é proporcional, em primeira ordem, ao elemento de matriz:

$$\langle \psi_{\mathbf{v}} | \mathbf{H}' | \psi_{\mathbf{c}} \rangle \propto \int_{cristal} \psi_{\mathbf{v}}^{*}(\mathbf{r}) \exp\left[-i(\mathbf{k_{0}}\cdot\mathbf{r})\right] \mathbf{p}_{\mathbf{x}} \psi_{\mathbf{c}'}(\mathbf{r}) d\mathbf{V} =$$

$$\int_{cristal} \mathbf{u_{kv}}^{*}(\mathbf{r_{p}}) \exp\left[-i(\mathbf{k_{p}}+\mathbf{k_{0}})\cdot\mathbf{r_{p}}\right] CS\left(\frac{l\pi}{L_{z}}z\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \mathbf{u_{kc}}(\mathbf{r_{p}}) \exp\left[+i(\mathbf{k_{p}}'\cdot\mathbf{r_{p}})\right]$$

$$\operatorname{CS}\left(\frac{l'\pi}{L_z}z\right)\mathrm{dV}$$
 (A4-13)

onde CS significa cosseno ou seno conforme 1 (l') seja ímpar ou par respectivamente.

A parte transversal desta integral contém o termo exp [$-i(\mathbf{k_p} - \mathbf{k_p'} + \mathbf{k_0}) \mathbf{r_p}$] onde, na prática, $\mathbf{k_0}$ é desprezível frente aos outros dois. As oscilações da exponencial só permitem que a integral assuma valores apreciáveis em:

$$\mathbf{k}_{\mathbf{p}} = \mathbf{k}_{\mathbf{p}}' \qquad (A4-14)$$

Usando a ortogonalidade das funções seno e cosseno temos que a integração em z só assume valores apreciáveis em:

$$l = l'$$
 (A4-15)

A conclusão é que a transição ocorre entre elétrons e buracos com o mesmo momento transversal e a mesma E_z , limitando o espectro de emissão.

Detalhes de Teoria de Perturbação Dependente do Tempo podem ser encontrados na referência [4]

Densidade de Estados:

Consideremos os elétrons em um poço de potencial infinito bidimensional, ou seja, confinados em um retângulo de área $L_x L_y$ (plano onde está \mathbf{k}_p) e sem energia potencial nesta região.

O problema do poço infinito pode ser resolvido independentemente para as variáveis x e y, como feito anteriormente para z, nos dando que:

$$k_x = n\pi / L_x$$
, $n = 1,2,3,...$
 $k_y = m\pi / L_y$, $m = 1,2,3,...$

onde o momento do elétron é $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$

A área no espaço $\mathbf{k}_{\mathbf{p}}$ que contém um autoestado é:

$$A_k = \pi^2 / L_x L_y = \pi^2 / A_p$$
 (A4-16)

A área que contém momentos menores que $\hbar k \in \pi (k/2)^2$ onde usamos o raio k/2 pois +k e -k definem o mesmo estado de energia. O número de estados nesta área será:

N(k) =
$$\frac{\pi k^2}{4} \cdot \frac{1}{A_k} \cdot 2 = \frac{k^2 A_p}{2\pi}$$
 (A4-17)

onde o fator 2 é incluído devido às orientações de spin de cada elétron. O número de estados entre k e k+dk é:

$$n(k) dk = \frac{dN(k)}{dk} dk = A_p \frac{k}{\pi} dk \qquad (A4-18)$$

e de energias entre E e E + dE será:

$$n(E) dE = \frac{dN(k)}{dk} \cdot \frac{dk}{dE} \cdot dE = A_p \cdot \frac{k}{\pi} \cdot \frac{dk}{dE} \cdot dE$$
 (A4-19)

Usando em (A4-8) que $\mathbf{k}_{p} \rightarrow \mathbf{k}$ e l = um temos $\mathbf{k} = \sqrt{\frac{2m_{c}}{\hbar^{2}}}$ (E - E um c)^{1/2} e logo $\frac{dk}{dE} = \sqrt{\frac{2m_{c}}{\hbar^{2}}} \cdot \frac{1}{2} (E - E_{um c})^{-1/2}, \text{ consequentemente:}$

$$\mathbf{n}(\mathbf{E}) = \frac{A_p}{\pi} \cdot \sqrt{\frac{2m_c}{\hbar^2}} \cdot (E - E_{\text{um } c})^{1/2} \left\{ \sqrt{\frac{2m_c}{\hbar^2}} \cdot \frac{1}{2} \cdot (E - E_{\text{um } c})^{-1/2} \right\} = \frac{A_p}{\pi} \cdot \frac{2m_c}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{2} \qquad (A4-20)$$

A densidade de estados, número de estados por área, será :

$$\rho(E) = \frac{1}{A_p} \cdot n(E) = \frac{m_c}{\pi \hbar^2} , \text{ para } l = 1$$
(A4-21)

Valores de $E > E_{l'c}$ indicam que o elétron possui l'estados diferentes acessíveis (l = 1, 2, 3, ..., l') e a densidade de estados deve ser multiplicada por este valor l'. Matematicamente :

$$\rho(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{m_c}{\pi \hbar^2} H(E - E_{nc})$$
 (A4-22)

onde H(x) = 0, se x < 0

1, se x > 0 "função degrau de Heaviside"

A figura A4.1 compara a densidade volumétrica de estados para sistemas de poço quântico ($\rho(E) / L_z$) com a densidade volumétrica de

estados para o "bulk" de sistemas semicondutores comuns. Vale a pena notar a coincidência dos gráficos nas esquinas dos degraus.



Figura A4.1 - (a) Os dois primeiros estados quantizados para elétrons e buracos (n=1,n=2) e suas autofunções no poço de potencial infinito. (b) O gráfico da densidade volumétrica de estados ($1/AL_z$). dN(E) / dE, ou seja, número de estados por unidade de área e energia dividido pela espessura da camada ativa.[21]

Bibliografia

[1] - Handbook of Mathematical Functions, edited by Milton Abramowitz and Irene A. Stegun, Dover (1972)

[2] - Arfken, G. ; Mathematical Methods for Physicists, (San Diego: Academic Press Inc., 1985)

[3] - Sakurai, J. J.; Modern Quantum Mechanics, (New York: Addison - Wesley Publishing Company, 1994)

[4] - Cohen-Tannoudji, C.; Quantum Mechanics, (New York: John Wiley & Sons, 1977)

[5] - Eisberg, R.; Fundamentos da Física Moderna, (Rio de Janeiro: Guanabara Dois S. A., 1979)

[6] - Ashcroft, N. W.; Solid State Physics, (Philadelphia: Saunders College, 1988)

[7] - P. W. Epperlein and L. Bona ; Appl. Phys. Lett., 62 (24), 3074 (1993)

[8] - D. D. Sell, H. C. Casey Jr. and K. W. Wecht ; J. Appl. Phys., 45 (6), 2650 (1974)

[9] - Handbook of infrared optical materials, edited by Paul Klocek, Maial Rekker Inc.

[10] - W. Nakwaski ; J. Appl. Phys. , 64 (1), 159 (1988)

[11] - A. M. Mansanares, T. Velinov, Z. Bozoki, D. Fournier and A. C. Boccara;
 J. Appl. Phys., 75 (7), 3344 (1994)

[12] - H. Fujii, Y. Ueno and K. Endo ; Appl. Phys. Lett. , 62 (17), 2114 (1993)

[13] - P. W. Epperlein and O. J. F. Martin ; Inst. Phys. Conf. Ser., n° 120, 353 (1991)

[14] - P. W. Epperlein; Jpn. J. Appl. Phys., 32, 5514 (1993)

[15] - F. P. Dabkowski, A. K. Chin, P. Gavrilovic, S. Alie and D. M. Beyea; Appl. Phys. Lett., 64 (1), 13 (1994)

[16] - H. Brugger and P. W. Epperlein ; Appl. Phys. Lett. , 56 (11), 1049 (1990)

[17] - P. W. Epperlein, G. L. Bona and P. Roentgen ; Appl. Phys. Lett. , 60 (6), 680 (1992)

[18] - J. I. Pankove ; Optical Processes in Semiconductors, (New York: Dover, 1971)

[19] - Handbook of Optics, edited by Walter G. Discroll, McGraw-Hill (1978)

[20] - R. B. Martins; Revista Telebrás - Edição Tecnologia, 18 (60), 37 (1994)

[21] - A. Yariv; Quantum Electronics, (New York: John Wiley & Sons, 1989)

[22] - S. Sze ; Physics of Semiconductor Devices , (New York: John Wiley & Sons, 1981)

[23] - Handbook of Optical Constants of Solids, edited Edward D. Palik, Academic Press Handbook Series (1985)

[24] - C. Kittel ; Introdução à Física do estado Sólido , (Guanabara Dois, 1978)

[25] - J. R. Reitz, F. J. Milford and R. W. Christy ; Fundamentos da Teoria Eletromagnética , (Editora Campus, 1982)

[26] - H. Okamoto ; Jpn. J. Appl. Phys. , 26 (3), 315 (1987)

[27] - L. L. Chang and L. Esaki ; Physics Today , p. 37, (october 1992)

[28] - L. P. Bychkova and O. I. Davarashvili ; Quantum Electronics, 26 (4), 310 (1996)

[29] - R. B. Martins; Revista Telebrás - Edição Tecnologia, 19 (63), 62 (1996)

[30] - A. Paradisi, A. C. Sachs, A. Gobbi, J. R. Filho and R. B. Martins ; IEEE Photonics Technology Letters, 8 (5), 605 (1996)

[31] - A. M. Mansanares, J. P. Roger, D. Fournier and A. C. Boccara ; Appl. Phys. Lett., 64 (1), 4 (1994)

[32] - W. C. Tang, H. J. Rosen, P. Vettiger and D. J. Webb ; Appl. Phys. Lett., 60 (9), 1043 (1992)

[33] - K. L. Chen, H. H. Lin, G. J. Jan, Y. H. Chen and P. K. Tseng; Appl. Phys. Lett., 66 (20), 2697 (1995)

[34] - L. Pottier ; Appl. Phys. Lett., 64 (13), 1618 (1994)

[35] - R. E. Wagner and A. Mandelis ; Semicond. Sci. Technol., 11, 300 (1996)

[36] - M. P. Pires, P. L. Souza and J. P. von der Weid ; Brazilian Journal of Physics, 26 (1), 252 (1996)

[37] - T. Kobayashi and G. Iwane ; Jpn. J. Appl. Phys., 16 (8), 1403 (1977)

[38] - O. J. F. Martin, G. L. Bona and P. Wolf ; IEEE Journal of Quantum Electronics, 28 (11), 2582 (1992)

[39] - Y. F. Chen, J. L. Shen, L. Y. Lin and Y. S. Huang ; J. Appl. Phys., 73 (9), 4555 (1993)

[40] - A. Jakubowicz ; J. Appl. Phys., 74 (11), 6488 (1993)

[41] - A. N. Petrovsky, A. O. Salnick, V. V. Zuev, D. O. Mukhin, M. M. Mekhtiev, J. Pelzl, A. C. Boccara and D. Fournier; Solid State Communications, 81 (3), 223 (1992)

[42] - F. A. McDonald; Can. J. Phys., 64, 1023 (1986)

[43] - R. L. Thomas, L. D. Favro and P. K. Kuo ; Can. J. Phys., 64, 1234 (1986)

[44] - M. Bertolotti, M. Albani, R. Li Voti, G. Liakhou, F. Michelotti, C. Sibilia, A. Ferrari, A. Syrbu and V. P. Yaklovev; SPIE volume 1985, p. 716

[45] - J. Opsal, A. Rosencwaig and D. L. Willenborg ; Applied Optics, 22 (20), 3169 (1983)

[46] - B. C. Forget, D. Fournier and V. E. Gusev ; Appl. Phys. Lett., 61 (19), 2341 (1992)

[47] - A. M. Mansanares, J. P. Roger, D. Fournier and A. C. Boccara ; Journal de Physique IV 4, C7-207 (1994)

[48] - Photoacoustic and Thermal Wave Phenomena in Semiconductors, edited by Andreas Mandelis, North-Holland (1987)