

# RESPOSTA ESPECTRAL DE HETEROJUNÇÕES SEMICONDUTORAS

André Luiz Pierre Mattei

Aluno do Instituto Tecnológico da Aeronáutica - Bolsa PIBIC / CNPq

Orientador: Dr. José Roberto Sbragia Senna, LAS

## 1. Introdução

Heterojunções de gap estreito são amplamente utilizadas como detectores de radiação infravermelha, por exibirem baixos níveis de ruído a uma dada temperatura de operação e eficiência quântica próxima de um [1]. Em particular, heterojunções de PbTe/PbSnTe são importantes como fotodetetores de infravermelho e laser a semicondutor [2], sendo normalmente utilizadas na faixa com comprimento de onda acima de  $4 \mu\text{m}$  [1].

O uso de heterojunções permite um aproveitamento melhor da radiação incidente, ou seja, de o aproveitamento de uma faixa mais larga da radiação incidente. Por exemplo, referindo-se à figura 1a, as radiações de comprimento de onda menores são absorvidas à esquerda, enquanto que os comprimentos de onda maiores, penetrando mais profundamente, geram pares elétron-lacunas na região mais à direita.

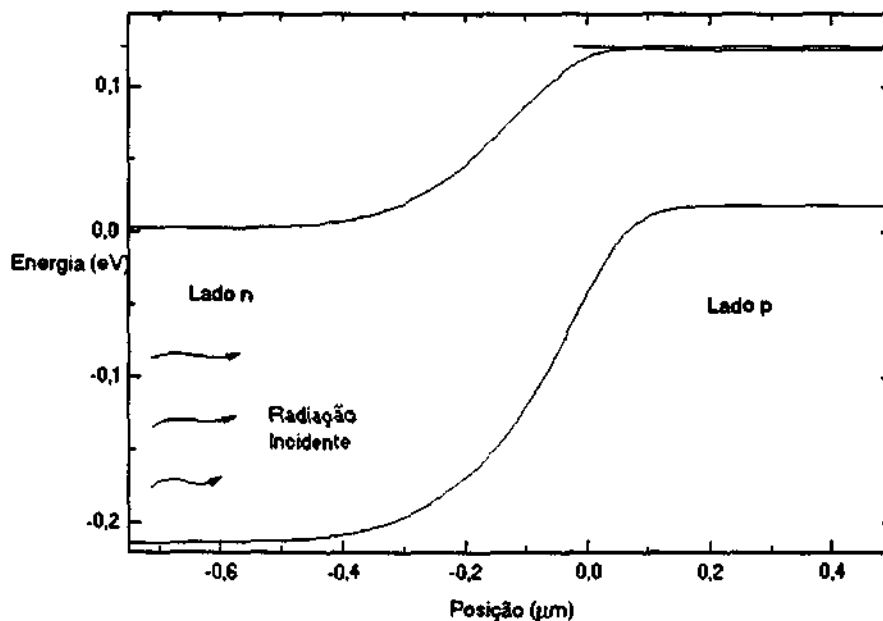


Figura 1a. Diagrama de bandas de energia de uma heterojunção.

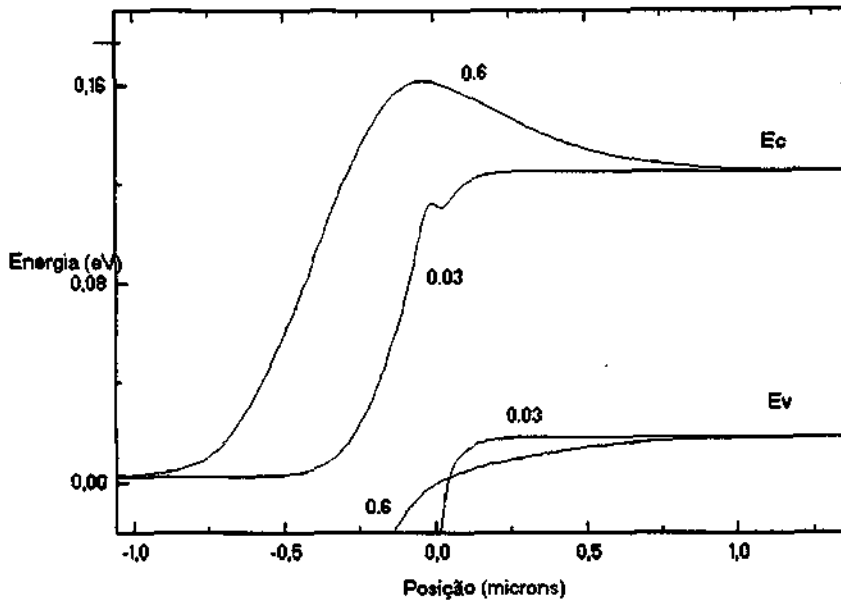


Figura 1b. Diagrama de bandas com presença de barreira na banda de condução.

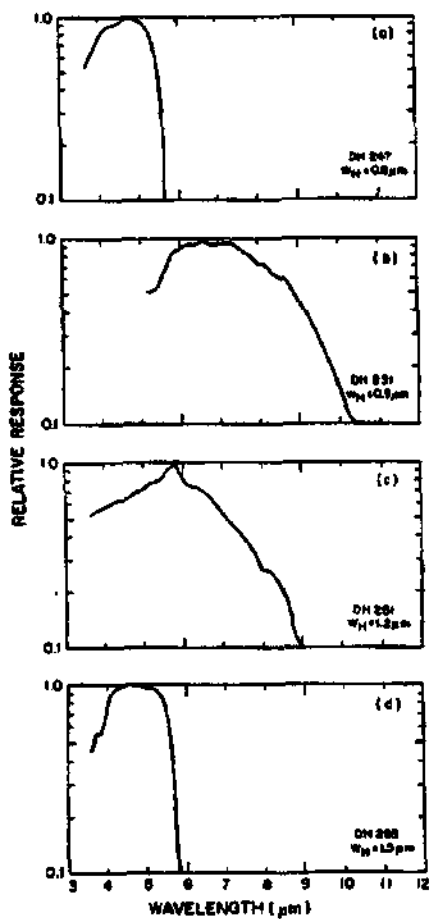


Figura 2. Resposta espectral relativa para diodos tipo I, obtidas variando-se a largura da heterojunção, figura importada de Abramof et al [2].

Se a heterojunção é abrupta podem ocorrer barreiras, como ilustrada na figura 1b, que diminuem a intensidade de corrente foto gerada por altos comprimentos de onda. Como exemplo, temos na figura 2 os resultados obtidos por Abramof et al. [2] para a resposta espectral, medida em condições de curto circuito, de um fotodetector infravermelho a heterojunção PbTe/Pb<sub>0.8</sub>Sn<sub>0.2</sub>Te. Nela podemos observar o desaparecimento da resposta espectral numa certa faixa e relacioná-la ao surgimento de barreiras extras, como conjecturado pelos autores. Uma confirmação quantitativa dessa conjectura requer um modelamento numérico dessas heterojunções.

O modelamento numérico da heterojunção em equilíbrio visa obter os perfis das bandas de condução e valência e determinar a existência e magnitude de barreiras nesses perfis. Utilizamos um modelo unidimensional.

As equações a serem resolvidas são:

• Poisson,

$$\frac{d}{dz}\epsilon(z) \frac{d}{dz}V(z)=[p(z)-n(z)+Nd^+(z)-Na^-(z)] \quad (1)$$

onde:  $V(z)$  é o potencial eletrostático.

$\epsilon(z)$  é a constante dielétrica do material.

$p(z)$  e  $n(z)$  são as concentrações de portadores, lacunas e elétrons respectivamente.

$Nd^+(z)$  e  $Na^-(z)$  as concentrações átomos doadores e aceitadores ionizados, respectivamente.

• Portadores em equilíbrio,

$$n(z)=\int_{Ec}^{E_{top}} g_c(E)f(E)dE \quad (2a)$$

$$p(z)=\int_{E_{bottom}}^{Ev} g_v(E)[1-f(E)]dE \quad (2b)$$

onde:  $g(E)$ = densidade de estados

$$f(E)=\frac{1}{1+e^{(E-E_f)/kT}}$$

No caso do PbTe/PbSnTe:

$$Ec(z)=Ec(-\infty)+\frac{\Delta E}{2}g(z)$$

$$Ev(z)=Ec(z)-Eg(z)$$

## 2. Método de Solução

A substituição das equações 2a, 2b, 3a e 3b na equação 1, resulta numa equação diferencial não linear para  $V(z)$  que é resolvida usando o método de Newton.

São realizadas múltiplas iterações sendo é inicializadas por uma simples aproximação de depleção para a junção abrupta entre dois semicondutores de composição  $x_1$  e  $x_2$ . Consideramos que a solução foi obtida quando a variação de  $V(z)$  e a diferença entre os lados direito e esquerdo da equação (1), o "resíduo", entre duas iterações é menor do que  $0.001\text{eV}$  e  $0.001\text{eV/cm}^2$ .

O programa usa o modelo físico do material de interesse através de chamada de subrotinas que o especificam, podendo ser utilizado o modelo de qualquer junta semicondutora que o usuário desejar.

O código foi implementado em Fortran e os cálculos realizados num microcomputador PC 386 DX-40 com co-processador, de propriedade do autor. A validação foi realizada por comparação com os cálculos de Oda [3] e Miglorato e White [4] para heterojunção de HgCdTe.

## 3. Modelo Físico para a Heterojunção PbTe/PbSnTe.

O modelo utilizado na heterojunção de  $\text{Pb}_{1-x_1}\text{Sn}_{x_1}\text{Te}/\text{Pb}_{1-x_2}\text{Sn}_{x_2}\text{Te}$  é:

$$E_g(x,T) = 1.715 - 0.543 * x + 1. * 10^{-3} * ((12.8^2 + 1.9 * (T + 20.))^2)^{.5} \quad [5]$$

$$m_c(x,T) = \frac{(10.25 + 6.56 * x)}{((5.718 + (24.81 + 15.88 * x) * E_g) * (5.718 + 14.29 * E_g)^2)^{1/3} * E_g} \quad [5]$$

$$m_v(x,T) = \frac{(10.25 + 6.56 * x)}{((5.718 + (12.81 + 8.2 * x) * E_g) * (5.718 + 10. * E_g)^2)^{1/3} * E_g} \quad [5]$$

$$\epsilon(x,T) = \frac{1. * 10^3}{7.75 * x + 18 * E_g - 2.72} \quad [6]$$

$$\Delta E_g(x,T) = E_c(-\infty) + \text{frac} * [E_g(x,T) - E_g(x_1,T)] + V(z)$$

$$\text{frac} = [E_c(\infty) - E_c(-\infty)] / [E_g(x_2,T) - E_g(x_1,T)]$$
$$\text{frac} = 0.27, \text{ com } x_1 = 0.0 \text{ e } x_2 = 0.2 \quad [7]$$

ainda:

$$x(z) = x_2 + (x_1 - x_2) * \text{erfc}(z/w) / 2$$

$$N_d(z) = \text{erfc}(z/w) / 2$$

$$N_a(z) = (2 - \text{erfc}(z/w)) / 2$$

#### 4. Resultados

A figura 3 mostra os perfis das bandas de condução e valência para o dispositivo do tipo I usado por Abramof et al. [2]. A figura 4 mostra a variação da barreira na banda de condução com a variação da largura da heterojunção.

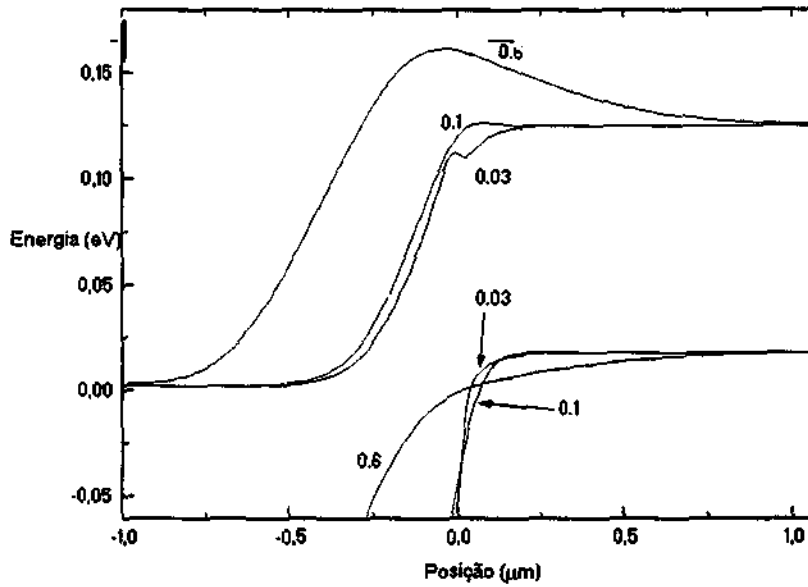


Figura 3. Perfis de banda de energia observados, em 77K, variando a largura da heterojunção do tipo I, conforme tabela 1.

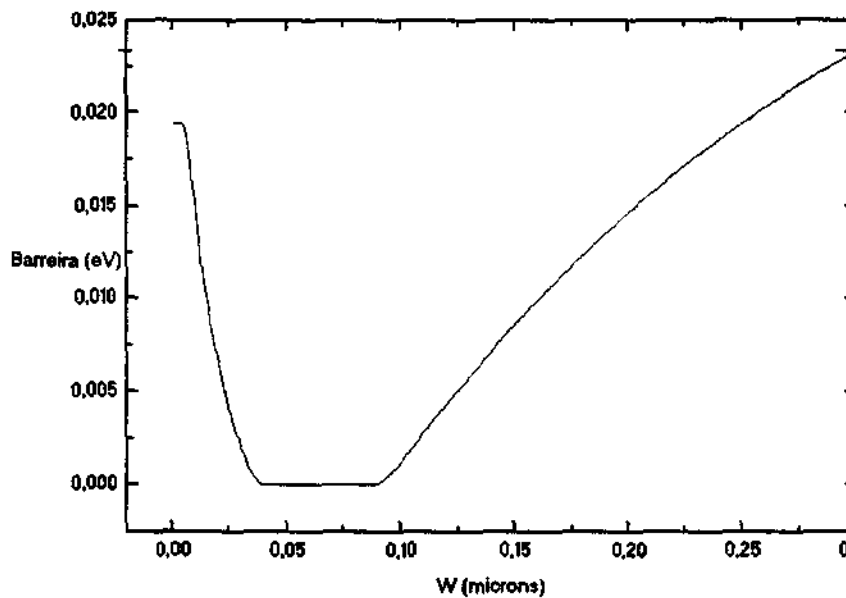


Figura 4. Barreiras apresentadas pela heterojunção tipo I em resposta à variação da largura da heterojunção.

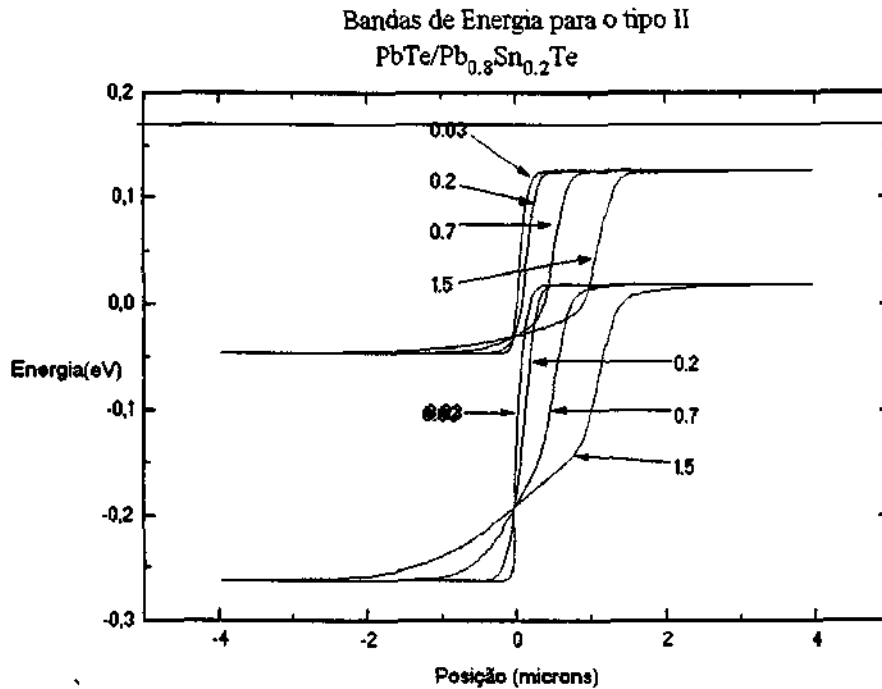


Figura 5. Perfis de banda de energia observados, em 77K, variando a largura da heterojunção do tipo II, conforme tabela 1.

Podemos encontrar na figura 5 os perfis de bandas para o material do tipo II [2]. Nesta figura comprovamos a inexistência de barreiras extras para os elétrons foto gerados em larguras de heterojunção de até 3.5  $\mu\text{m}$ , o que concorda com o verificado experimentalmente por [2].

Na tabela 1, temos as especificações dos materiais tipo I e II usadas por [2] e nos nossos cálculos.

A altura da barreira é definida como a altura da maior barreira encontrada por um elétron, na banda de condução, em movimento do lado p com direção ao lado n.

Tabela 1- Propriedades dos tipos de heterojunções n-PbTe/p-Pb<sub>0.8</sub>Sn<sub>0.2</sub>Te em 77 K.

	concent. de elétrons (cm <sup>-3</sup> )	concent. de lacunas (cm <sup>-3</sup> )
Tipo I	8.0 E+16	3.5 E+17
Tipo II	2.0 E+18	3.5 E+17

## 5. Conclusão

Os resultados obtidos servem para explicar quantitativamente a perda de resposta espectral numa certa faixa de largura da heterojunção tipo I. Servem também para explicar também a inexistência de tal perda na junção tipo II.

Há discrepância entre os valores da largura da heterojunção em que [2] observou a queda na resposta espectral e o que seria esperado pelos nossos cálculos. Ainda estamos investigando os motivos de tal discrepância.

A seguir será elaborado um algoritmo para o cálculo da corrente de curto-circuito em presença de iluminação, a fim de obter curvas teóricas de resposta espectral, e tentar reproduzir teoricamente os resultados experimentais de [8].

## Referências

- [1] H. Zogg, S. Blunier, T. Hoshino, C. Maissen, J. Masek, and A. Tiwari, IEEE Trans. on Elect. Dev. 38, 1110 (1991).
- [2] E. Abramof, S. O. Ferreira, C. Boschetti and I. N. Bandeira, Infrared Phys. 30, 85 (1990).
- [3] N. Oda, Infrared Phys. 27, 49 (1987).
- [4] P. Miglorato and A. M. White, Solid-State Electronics 26, 65 (1983).
- [5] H. Preier, Appl. Phys., 20, 189 (1979).
- [6] S. Nishi, H. Kawamura and K. Murase, Phys. Stat. Sol. (b), 97, 581 (1980).
- [7] M. Kriechbaum, Phys. Review B, 30, 3394, (1984).
- [8] G. Shuxing, C. Boliang and Y. Shixin, Int. Journal of Infrared and Milimeter Waves 12, 251 (1991).

# **RESPOSTA ESPECTRAL DE HETEROJUNÇÕES SEMICONDUTORAS**

**André Luiz Pierre Mattei - Bolsa Iniciação Científica/CNPq  
Aluno do Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA  
Orientador: Dr. José Roberto Sbragia Senna, LAS/INPE**

## **1. Introdução**

Este trabalho visa obter o modelo e o procedimento de projeto de detectores ópticos na faixa de infravermelho por meio do emprego de heterojunções semicondutoras. O trabalho tem sido conduzido de forma a permitir, numa eventual fase subsequente, a obtenção do modelo e o procedimento de projeto de outros dispositivos ópticos (detectores ou diodos emissores de luz) com resposta espectral larga (acima de 80 nm), por meio do emprego de uma configuração que inclui duas camadas ativas com composições distintas (larguras de banda de energia diferentes).

A motivação para o desenvolvimento de pesquisas na área acima apresentada decorre do meu interesse em ciências e aplicações do laser e do interesse do INPE e do CTA em pesquisa de materiais semicondutores e dispositivos ópticos. Dispositivos detectores e emissores de luz de larga resposta espectral são utilizados em sensores ópticos, especialmente os infravermelhos e os de rotação, que, por sua vez, são empregados em instrumentação aeroespacial. O estudo de fontes parcialmente coerentes e os detectores correspondentes, compreendem uma das tarefas de um projeto de pesquisa técnico-científica do Ministério da Aeronáutica. O INPE tem realizados esforços científicos e tecnológicos através do LAS e o CTA através do IEAv e do ITA.



## 2. Detectores de Radiação InfraVermelha

A principal fonte de luz utilizada em aplicações de comunicação a fibra óptica são estruturas a heterojunções semicondutoras como diodos laser (também conhecidos como *injection laser diode*, ILD) e diodos emissores de luz (*light-emitting diodes*, LED). A heterojunção consiste de dois materiais semicondutores adjacentes com diferentes energias de *band-gap*. Estes dispositivos são aplicáveis em sistemas à fibra óptica, pois tem uma potência de saída e dimensões compatíveis com as requeridas por estes sistemas [1].

Devido à profundidade do assunto, como estudo preliminar de entendimento e foco deste trabalho, iremos concentrar-nos em fotodetectores.

Na saída de uma linha óptica de transmissão deve haver um dispositivo receptor que interprete a informação contida no sinal óptico. O primeiro elemento deste receptor é um fotodetector. O fotodetector recebe a potência de luz emergente em sua superfície e converte sua variação em variação de corrente elétrica. Uma vez que a luz emergente do final da fibra é geralmente fraca e distorcida, o fotodetector deve ter altos requisitos de performance. Entre os principais requisitos estão a alta sensibilidade à radiação na faixa de comprimentos de onda utilizada pela fonte em uso e um mínimo de adição de ruído ao sistema [1].

Havia vários materiais passíveis de serem usados no estudo de fotodetectores. Escolhemos trabalhar, inicialmente, com heterojunções de CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Hg<sub>x</sub>Te, pois havíamos encontrado literatura com trabalhos semelhantes ao que pretendíamos empreender e assim, poderíamos usá-los como referência de validação de nosso trabalho, isto é, nossos resultados deveriam ser, no mínimo, tão corretos quanto. Em seqüência, passamos ao PbTe/Pb<sub>x</sub>Sn<sub>1-x</sub>Te, pois se trata de material com pouca literatura publicada, em relação a heterojunções de GaAs e CdTe por exemplo, o que facilitaria uma eventual contribuição original. Tal seleção de materiais é necessária, pois cada material responde de acordo com suas próprias leis físicas aos estímulos sofridos. Assim, internamente ao modelamento do dispositivo, tem-se o modelamento dos materiais constituintes.

### 3. Modelamento do Detector Óptico

#### 3.1. Introdução

Heterojunções semicondutoras de gap estreito são amplamente utilizadas como detectores de radiação infravermelha, por exibirem baixos níveis de ruído a uma dada temperatura de operação e com eficiência quântica próxima de um [2]. Em particular, heterojunções de PbTe/PbSnTe são importantes como fotodetectores de infravermelho e laser a semicondutor [3], sendo normalmente utilizadas na faixa com comprimento de onda acima de 4  $\mu\text{m}$  [2].

A performance de um dispositivo fotodetector a heterojunção semicondutora é frequentemente caracterizada pela resposta espectral quântica, R;

$$N = \frac{F}{\hbar\omega} = \frac{F\lambda}{hc} \quad (1)$$

Sendo N o fluxo incidente de fótons, F o fluxo de energia incidente,  $\hbar$  ( $=2\pi\hbar$ ) a constante de Planck e  $\omega$  a frequência ( $\text{rad.s}^{-1}$ ). Cada fóton carrega  $\hbar\omega$  de energia.

Como nem todo fóton obrigatoriamente gera um par elétron-lacuna, temos a eficiência quântica  $\eta$ ;

$$\eta = \frac{\text{numero de pares eletrons-lacunas gerados}}{\text{numero de fotons incidentes}} \quad (2)$$

Assim a densidade de corrente, j, gerada por um detector quântico ideal é:

$$j = \frac{\eta F}{\hbar\omega} e = \frac{\eta F\lambda}{hc} e \quad (3)$$

Onde 'e' é a carga em módulo de um elétron.

Assim temos condições de definir a resposta quântica de um detector como:

$$R = \frac{\text{corrente}}{F} = \frac{jA}{F} = \frac{\eta A\lambda}{hc} e \quad (4)$$

Sendo A, a área transversal do dispositivo.

Usou-se a terminologia detector quântico, afim de diferenciar de um detector 'clássico' ou térmico, no qual a corrente é proporcional ao fluxo de energia, ou seja, independente do comprimento de onda da radiação.

O uso de heterojunções permite um melhor aproveitamento da radiação incidente, ou seja, o aproveitamento de uma faixa mais larga da radiação incidente. Por exemplo, referindo-se à figura 3.1a, as radiações de comprimento de onda menores são absorvidas à esquerda, enquanto que os comprimentos de onda maiores, penetrando mais profundamente, geram pares elétron-lacunas na região mais à direita.

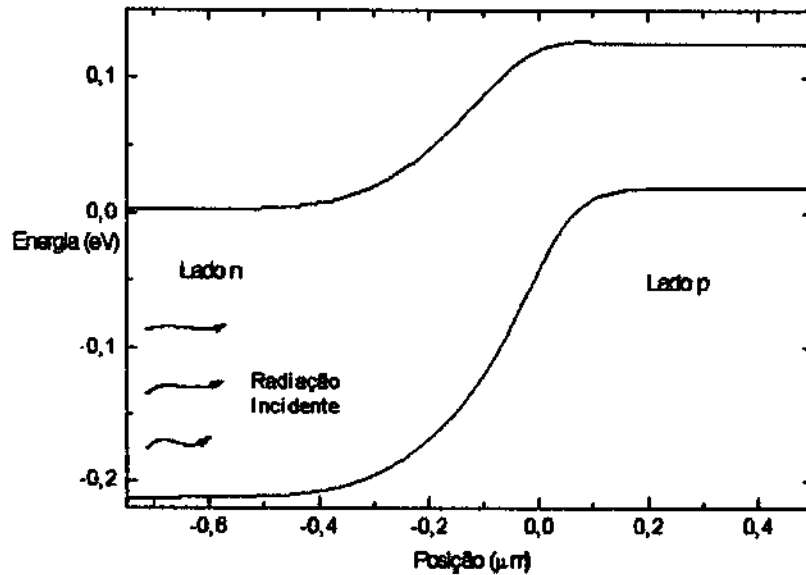


Figura 3.1a. Diagrama de bandas de energia de uma heterojunção.

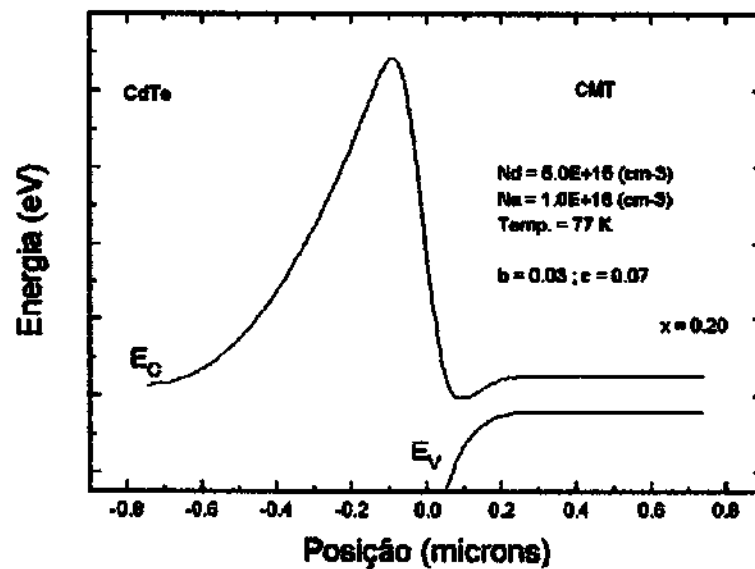


Figura 3.1b. Diagrama de bandas com presença de barreira na banda de condução.

Se a heterojunção é abrupta podem ocorrer barreiras, como ilustrada na figura 3.1b, que diminuem a intensidade de corrente foto gerada por altos comprimentos de onda. Como exemplo,

temos na figura 3.10 os resultados obtidos por Abramof et al. [3] para a resposta espectral, medida em condições de curto circuito, de um fotodetector infravermelho a heterojunção PbTe/Pb<sub>0.8</sub>Sn<sub>0.2</sub>Te. Nela podemos observar o desaparecimento da resposta espectral numa certa faixa e relacioná-la ao surgimento de barreiras extras, como conjecturado pelos autores. Uma confirmação quantitativa dessa conjectura requer um modelamento numérico dessas heterojunções.

O modelamento numérico da heterojunção em equilíbrio visa obter os perfis das bandas de condução e valência e determinar a existência e magnitude de barreiras nesses perfis. Utilizamos um modelo unidimensional.

As equações a serem resolvidas serão:

$$\frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{d}{dz} V(z) = 4\pi e^2 q(z) = 4\pi e^2 [p(z) - n(z) + Nd^+(z) - Na^-(z)] \quad (5a)$$

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \frac{1}{2\pi^2} * \left( \frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} * \sqrt{E - E_c} * f(E) dE; \quad (5b)$$

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} \frac{1}{2\pi^2} * \left( \frac{2m_h}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} * \sqrt{E_v - E} * f(E) dE \quad (5c)$$

$$\text{onde: } \begin{cases} f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k * T}\right)}; & \text{Se de Fermi - Dirac} \\ f(E) = \exp\left(\frac{-(E - E_f)}{k * T}\right); & \text{Se de Boltzman} \end{cases} \quad (5d)$$

e:  $V(z)$  é a Energia Potencial Eletrostática.

$\epsilon(z)$  é a constante dielétrica do material.

$p(z)$  e  $n(z)$  são as concentrações de portadores, lacunas e elétrons respectivamente.

$Nd^+(z)$  e  $Na^-(z)$  as concentrações átomos doadores e aceitadores ionizados, respectivamente.

### 3.2.Método de Solução

A solução das equações (5a) a (5c), resulta numa equação diferencial não linear para  $V(z)$  que é resolvida usando o método de Newton.

São realizadas múltiplas iterações sendo inicializadas por uma simples aproximação de depleção para a junção abrupta, entre dois semicondutores de composição  $x_1$  e  $x_2$ . Consideramos que a solução foi obtida quando a variação de  $V(z)$  e a diferença entre os lados direito e esquerdo da equação (5a), o "resíduo", entre duas iterações torna-se menor do que  $0.001\text{eV}$  e  $0.001\text{eV/cm}^2$ , respectivamente.

#### 3.2.1.O Método de Newton

•Equação Algébrica não-linear:  $f(x) = 0$

$$x = x_0 - x_1 \quad (6a)$$

$$0 = f(x_0 - x_1) \approx f(x_0) - \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0} x_1 \quad (6b)$$

Equação Algébrica para  $x_1$ :

$$\left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x_0} x_1 = -f(x_0) \quad (6c)$$

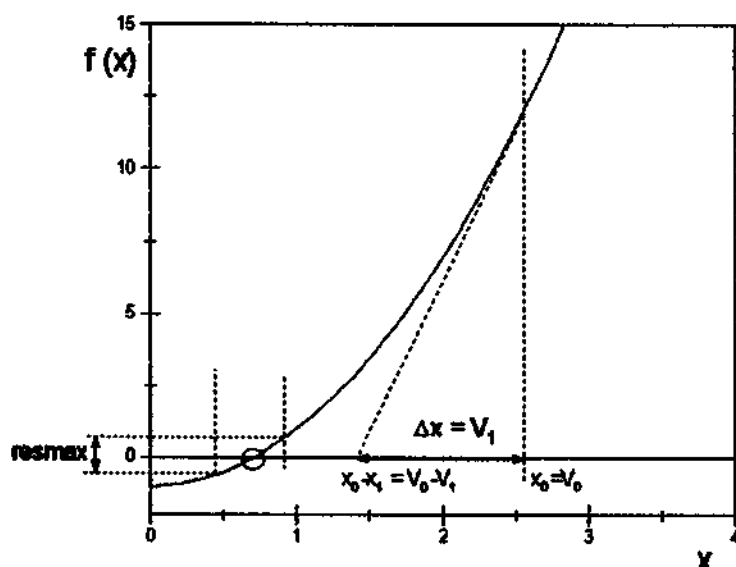


Fig. 3.2. Diagrama ilustrando a solução pelo Método de Newton.

### 3.2.2. Equação de Poisson:

A equação de Poisson é diferencial e não-linear e resolveremos nosso dispositivo unidimensionalmente (eixo z).

Por Gauss:

$$\vec{\nabla} \cdot \epsilon \vec{E} = 4\pi\rho \quad (\text{CGS}) \quad (7)$$

Usando que  $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi \Rightarrow$

$$-\vec{\nabla} \cdot \epsilon \vec{\nabla}\phi = 4\pi\rho \quad (8)$$

onde:  $\begin{cases} \rho \text{ é a densidade de cargas} \\ \vec{E} \text{ é o vetor campo elétrico} \\ \phi \text{ é o potencial eletrostático} \end{cases}$

Como:

$$V(\vec{r}) = -e\phi(\vec{r}) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \vec{\nabla} \cdot \left( \epsilon(\vec{r}) \vec{\nabla} V(\vec{r}) \right) = 4\pi e^2 q(\vec{r}) \quad (9)$$

Note que  $\epsilon$  depende da posição.

Resolvendo unidimensionalmente (eixo z), e para  $\epsilon=1$ , independentemente da posição, então:

$$\nabla^2 V = \frac{d^2 V}{dz^2} = 4\pi e^2 [p(z) - n(z) + N_D^+(z) - N_A^-(z)] = q(V(z)) \quad (10)$$

Se  $\epsilon \neq 1$  e é tal que  $\epsilon = \epsilon(z)$ , temos:

$$\frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{d}{dz} V(z) - 4\pi e^2 q(z) = 0 = F[V] \text{ (funcional)}$$

$$V(z) = V_0(z) - V_1(z)$$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{d}{dz} (V_0(z) - V_1(z)) - 4\pi e^2 q(V_0(z) - V_1(z)) \approx \\ &\approx \frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{d}{dz} V_0(z) - 4\pi e^2 q(V_0(z)) - \frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{d}{dz} V_1(z) + 4\pi e^2 \left. \frac{dq}{dV} \right|_{V_0} V_1(z) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \left[ \frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{d}{dz} + 4\pi e^2 \left. \frac{dq}{dV} \right|_{V_0} \right] V_1(z) = - \frac{d}{dz} \epsilon(z) \frac{d}{dz} V_0(z) - 4\pi e^2 q(V_0(z)) = \text{Res}(z) \end{aligned} \quad (11)$$

$$\underbrace{\left( \left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0} \right)}_{\left. \frac{\partial F}{\partial V} \right|_{V_0}} \underbrace{V_1}_{F[V_0]} \quad \underbrace{\left( -f(x_0) \right)}_{F[V_0]}$$

Com condições de contorno:  $\begin{cases} V(-L_1) = 0 \\ V(L_2) = V_{BI} \end{cases}$

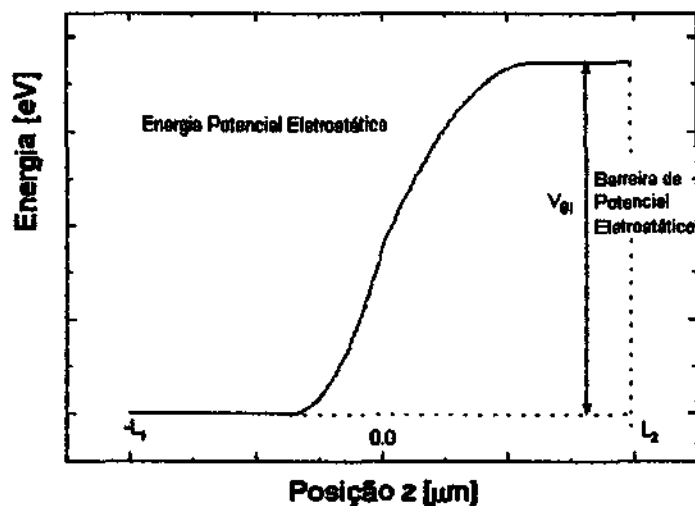


Fig. 3.3. Barreira de Potencial Eletrostático,  $V_{BE}$ , formada ao longo da junção.

A equação de Poisson Linearizada para  $V_1(z)$  é transformada em sistema de equações lineares pela discretização.

### 3.2.3. Discretização

Mantendo o eixo  $z$  como o de comprimento da junção, chamamos os seus limites de  $L_1$  e  $L_2$ , esquerda e direita respectivamente, usaremos  $N$  pontos igualmente espaçados em todo o dispositivo, assim:

$$z_i = -L_1 + i \Delta z; \quad i = 1, 2, 3, \dots, N \quad (12)$$

$$\Delta z = \frac{L_1 + L_2}{N} \quad (13)$$

$$V(z) = V(i); \quad z = z_i \quad (14)$$

$$\begin{aligned} s(z) \frac{dV_1(z)}{dz} &\rightarrow s(i) \left[ \frac{V(i+1/2) - V(i-1/2)}{\Delta z} \right] \Rightarrow \\ \frac{d}{dz} s(z) \frac{dV_1(z)}{dz} &\rightarrow \left[ s(i+1/2) \left( \frac{V(i+1) - V(i)}{\Delta z} \right) - s(i-1/2) \left( \frac{V(i) - V(i-1)}{\Delta z} \right) \right] \frac{1}{\Delta z} = \\ &= \left\{ s(i+1/2)V(i+1) - [s(i+1/2) + s(i-1/2)] + s(i-1/2)V(i-1) \right\} \frac{1}{(\Delta z)^2} \end{aligned} \quad (15)$$

Portanto a equação discretizada fica:

$$(s_{i-1} + s_i)V_{i-1} - (s_{i-1} + 2s_i + s_{i+1})V_i + (s_i + s_{i+1})V_{i+1} - q_i(V_i) = 0 \quad (16)$$

Para  $i=2, 3, \dots, N-1$ .

Já conhecemos  $V_1$  e  $V_N$  (condições de contorno;  $V_1=0$  e  $V_N=V_{BI}$ ), e temos as  $N-2$  equações para as  $N-2$  incógnitas ( $V_2, V_3, \dots, V_{N-1}$ ). Assim, temos um sistema a ser resolvido. Usamos em nossos cálculos  $N=400$ .

### 3.2.4. Junção Fora do Equilíbrio

Para o cálculo do sistema fora do equilíbrio resolvemos as seguintes equações:

$$n(z) = n(0) \exp\left(-\frac{\mu_n}{eD_n}(V(z) - V(0))\right) - \exp\left(-\frac{\mu_n}{eD_n}V(z)\right) \int_0^z \frac{J_n(z')}{D_n} \exp\left(\frac{\mu_n}{eD_n}V(z')\right) dz' \quad (17)$$



$$p(z) = p(0) \exp\left(\frac{\mu_p}{eD_p}(V(z) - V(0))\right) - \exp\left(\frac{\mu_p}{eD_p}V(z)\right) \int_0^z \frac{J_p(z')}{D_p} \exp\left(-\frac{\mu_p}{eD_p}V(z')\right) dz' \quad (18)$$

$$J_n(z) = J_n(0) + \int_0^z (G - R)(z') dz' \quad (19)$$

$$J_p(z) = J_p(0) + \int_0^z (G - R)(z') dz' \quad (20)$$

$$J_n(0) = \frac{n(0) \exp\left(\frac{\mu_n}{eD_n}V(0)\right) - n(L) \exp\left(\frac{\mu_n}{eD_n}V(L)\right) - \int_0^L \int_0^z \frac{\mu_n}{eD_n} V(z)(G - R)(z') dz' dz}{\int_0^L \frac{\mu_n}{eD_n} V(z) dz} \quad (21)$$

$$J_p(0) = \frac{p(0) \exp\left(-\frac{\mu_p}{eD_p}V(0)\right) - p(L) \exp\left(-\frac{\mu_p}{eD_p}V(L)\right) - \int_0^L \int_0^z \left(-\frac{\mu_p}{eD_p}\right) V(z)(G - R)(z') dz' dz}{\int_0^L \left(-\frac{\mu_p}{eD_p}\right) V(z) dz} \quad (22)$$

### 3.2.5. Algoritmo

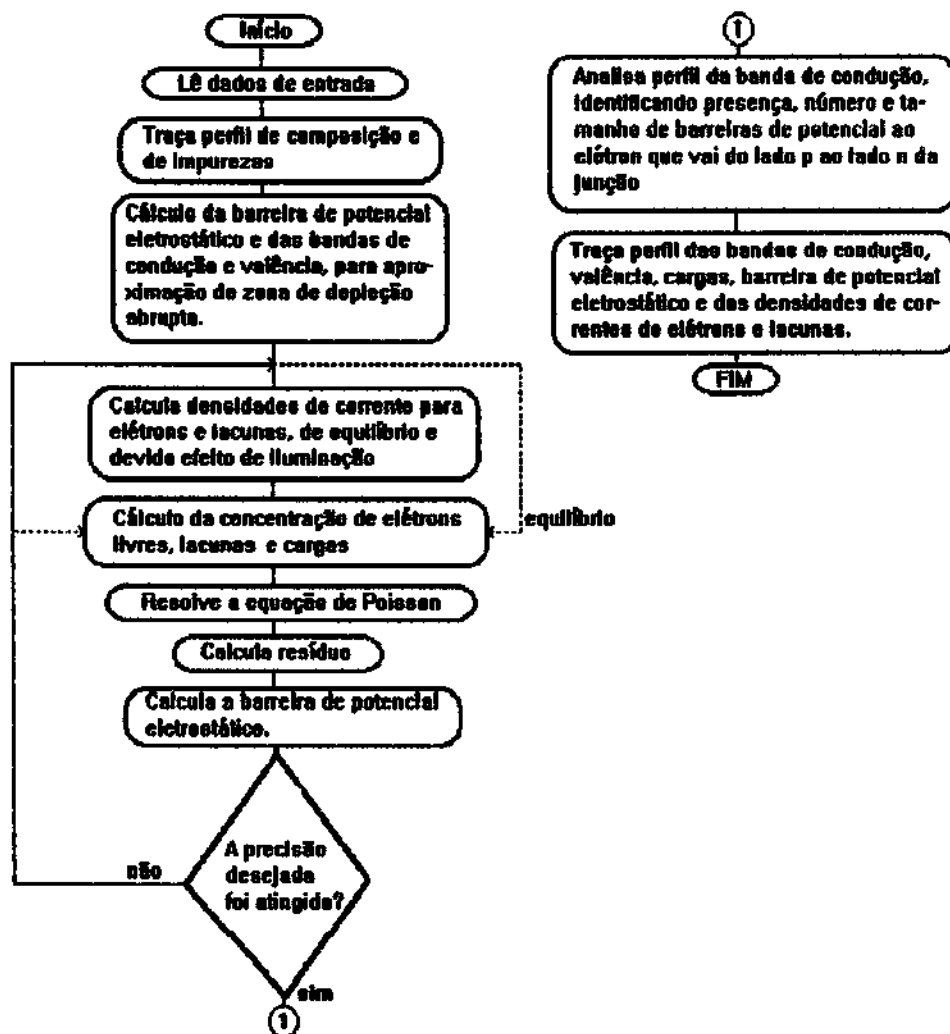


Fig. 3.4. Algoritmo usado na solução da junção semicondutora dentro e fora do equilíbrio e na presença ou não de iluminação.

### 3.2.6. Necessidade de Múltiplas Iterações

Uma questão que poderíamos levantar é a da necessidade de múltiplas iterações. Não poderíamos simplesmente resolver as equações, facilmente encontradas em livros texto?

Não poderíamos simplesmente resolver com aproximação para zona de depleção?

Afim de elucidar tal questão selecionamos um resultado que mostra as duas soluções e suas diferenças e torna clara a necessidade do método adotado.

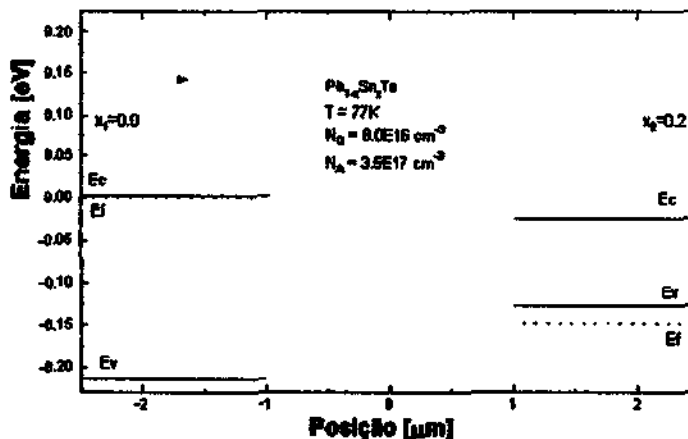


Fig.3.5a. Bandas de energia, condução e valência, e nível de Fermi para as misturas antes de serem unidas para formar a heterojunção.

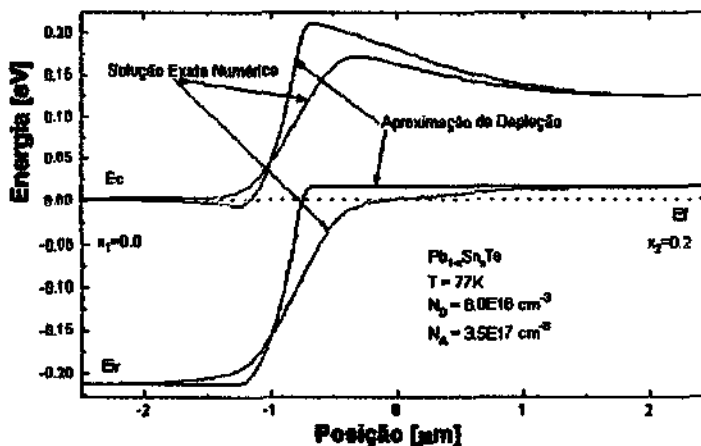


Fig.3.5b. As bandas de energia dobram-se e se ajustam na heterojunção em equilíbrio, mantendo o nível de Fermi constante. A necessidade de múltiplas iterações é evidenciada nesta figura. Os valores obtidos para as bandas de energia são significativamente alterados após as iterações.

A necessidade de múltiplas iterações aumenta com o aumento da dopagem. No caso de junções fracamente dopadas as duas soluções tendem a convergir.

### 3.3. Validação

O código foi implementado em Fortran e os cálculos realizados num microcomputador PC386 DX-40 com co-processor, de propriedade do autor. A validação foi realizada por comparação com os cálculos de Oda [4], Migliorato e White [5] e Bratt e Casselman [6] para heterojunção de  $Hg_xCd_{1-x}Te$ .

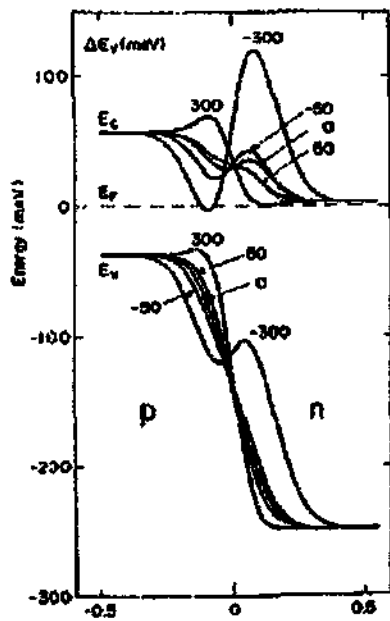


Fig. 3.6a. Diagrama de bandas de energia para CdTe obtido por Oda.

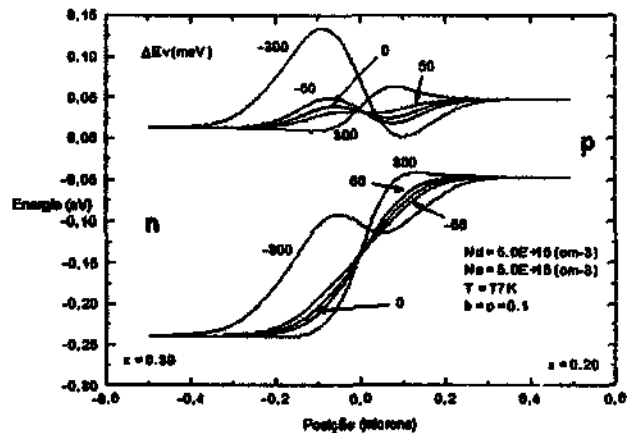


Fig. 3.6b. Diagrama comparativo de bandas de energia obtido pelos nossos cálculos, com dados de entrada idênticos aos de Oda.

No trabalho de Oda, [4], e no nosso, comparando resultados, os diagramas de bandas energia foram obtidos variando um parâmetro que chamamos 'frac'.

$$\text{frac} = \frac{\Delta E_C}{\Delta E_G}$$

(23)

O problema de interesse está na figura 3.7, onde dois semicondutores similares são unidos na interface da heterojunção. O problema é acertar como a diferença entre os dois *band-gaps* são distribuídas entre as diferenças entre as bandas de condução,  $\Delta E_C$ , e valência,  $\Delta E_V$ .

A Regra do Ânion Comum dita a continuidade do topo da camada de valência entre os dois materiais. Como se sabe, tal regra é falha, pois desconsidera que o topo da camada de valência inclui contribuições dos níveis *p* do cátion e tais contribuições são diferentes entre os constituintes da heterojunção, não havendo, assim, razão para tal regra funcionar [7]. A continuidade do topo da camada de valência faria o parâmetro *frac* ser idêntico a um, conforme equação (23).

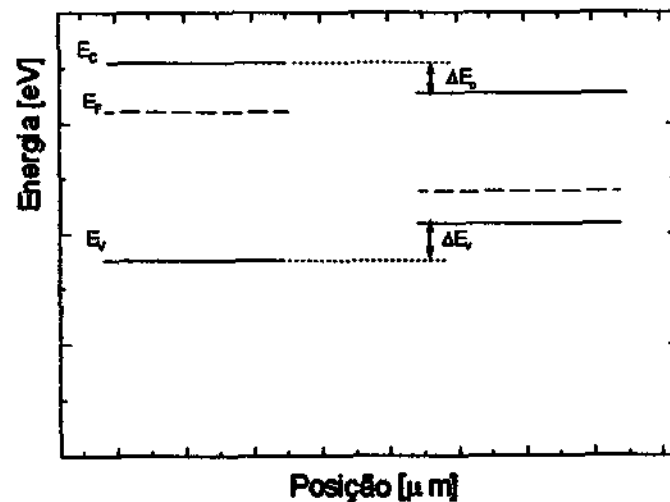


Fig.3.7.As bandas são dobradas na interface da heterojunção devido diferenças nas dopagens. O problema é acertar a que porcentagem o *band-gap* é alocado para  $\Delta E_c$  e  $\Delta E_v$ .

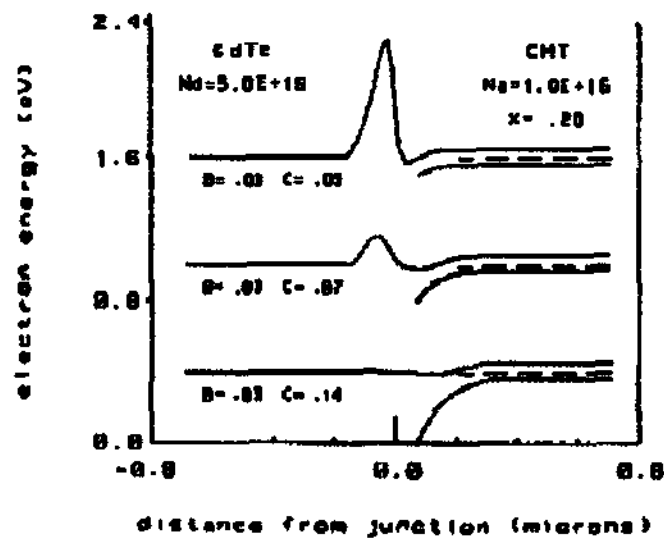


Fig.3.8.Resultados obtido por Migliorato e White [5], para heterojunção de CdTe/CdHgTe, com dados de entrada na própria figura.

Na figura 3.8, temos os resultados obtidos por Migliorato e White [5], aonde foi assumida como válida a regra do ânion comum,  $\text{frac}=1$  então.

A variação dos comprimentos característicos,  $b$  e  $c$ , para a composição e dopantes respectivamente, provocam variação no perfil das bandas. Com a análise da heterojunção estendendo-se de  $-L$  a  $L$  e sendo a coordenada  $z$  a do dispositivo em seu sentido longitudinal, temos:

$$x = x(L) + \frac{x(-L) - x(L)}{2} \operatorname{Erfc}\left(\frac{z}{c}\right);$$

$$N = N(L) + \frac{N(-L) - N(L)}{2} \operatorname{Erfc}\left(\frac{z}{b}\right); \quad (24)$$

As equações (24) foram utilizadas por Migliorato em seu trabalho, referência [5]. Sendo *Erfc*, a função erro complementar.

Com a finalidade de comparar resultados, temos na figura 3.9 os nossos, com os mesmos dados de entrada de Migliorato.

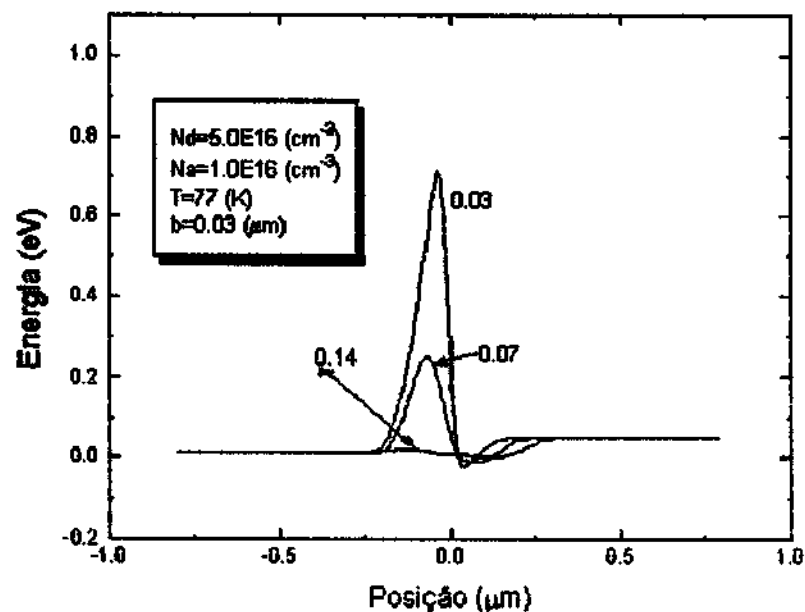


Fig3.9. Resultados que obtivemos com mesmos dados de entrada de Migliorato.

Em nossos cálculos utilizamos  $\text{frac}=1$  e a estatística não degenerada (Boltzman).

A variação de composição e de dopantes foram obtidas, também, por funções erro em nosso programa, como vemos abaixo:

$$x = \frac{x(-L) + x(L)}{2} + \frac{x(-L) - x(L)}{2} \left( -\operatorname{Erf}\left(\frac{z}{c}\right) \right);$$

$$N_D = \frac{N_D(-L)}{2} \operatorname{Erfc}\left(\frac{z}{b}\right);$$

$$N_A = \frac{N_A(-L)}{2} \left( 2 - \operatorname{Erfc}\left(\frac{z}{b}\right) \right) \quad (25)$$

A comparação com resultados obtidos por outros autores nos forneceu a confiança de que necessitávamos para prosseguir nas investigações.

O programa usa o modelo físico do material de interesse através de chamada de subrotinas que o especificam, podendo ser utilizado o modelo de qualquer junção semicondutora que o usuário desejar.

### 3.4. Modelo Físico para a Heterojunção PbTe/PbSnTe.

Com a confiança necessária no modelo de cálculo, partimos para a investigação da heterojunção de PbTe. Para tanto, alteramos apenas as subrotinas que caracterizam o material.

O modelo utilizado na heterojunção de  $\text{Pb}_{1-x_1}\text{Sn}_{x_1}\text{Te}/\text{Pb}_{1-x_2}\text{Sn}_{x_2}\text{Te}$  é:

$$E_g(x, T) = 1715 - 543 \cdot x + 1 \cdot 10^{-3} \cdot \sqrt{(12.8^2 + 1.19 \cdot (T + 20))^2} \quad (26a)$$

$$m_c(x, T) = E_g(x, T) \cdot 3 \sqrt{\frac{10.25 + 6.56 \cdot x}{(5.718 + (24.81 + 15.88 \cdot x) \cdot E_g(x, T)) \cdot (5.718 + 14.29 \cdot E(x, T))^2}} \quad (26b)$$

$$m_v(x, T) = E_g(x, T) \cdot 3 \sqrt{\frac{10.25 + 6.56 \cdot x}{(5.718 + (12.81 + 8.2 \cdot x) \cdot E_g(x, T)) \cdot (5.718 + 10 \cdot E_g(x, T))^2}} \quad (26c)$$

$$\epsilon(x, T) = \frac{1 \cdot 10^3}{7.75 \cdot x + 18 \cdot E_g(x, T) - 2.72} \quad (26d)$$

$$\Delta E_g(x, T) = E_c(0) + \operatorname{frac} * [E_g(x, T) - E_g(x_1, T)] + V(z) \quad (26e)$$

$$\text{frac} = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_g} \quad (26f)$$

$\text{frac}=0.27$  , se  $x_1=0.0$  e  $x_2=0.2$ , [10]

Onde (26a) a (26c) foram obtidos de [8] e (26d) de [9].

Como dado de entrada também optamos pela estatística desejada, se de Boltzman ou se de Fermi-Dirac.

### 3.5. Resultados

Na formação de uma heterojunção p-n podemos ter uma formação tipo degrau ou gradual, dependendo das condições de sua formação.

Alterando a largura de gradação ( $W_h$ ), temos a possibilidade de existência de barreira(s) de potencial eletrostático ao elétron que sai do lado p com direção ao lado n. A presença destas barreiras altera a resposta espectral que seria esperada no caso de sua não existência.

Abramof et al. [3], obtiveram experimentalmente heterojunções de PbSnTe em que foram variadas as dopagens e as larguras de gradação. Foram feitas duas dopagens diferentes, uma chamada de tipo I e outra de tipo II. Para cada uma dessas duas amostras iniciais foi medida a resposta espectral, em curto circuito, para diversas larguras de gradação. As de tipo II não mostraram experimentalmente variações de resposta com a variação de  $W_h$ , as de tipo I, diferentemente, tinham sua resposta espectral alterada com  $W_h$ .

Segundo Abramof, [3]:

$$W_h \cong \sqrt{Dt}; D = 3.5 \cdot 10^{-6} \exp\left(\frac{-1.079 \cdot 10^4}{T}\right); \quad \begin{cases} T \text{ é a temperatura de crescimento em Kelvin;} \\ t \text{ é tempo de crescimento;} e \\ D \text{ a constante de difusão.} \end{cases} \quad (27)$$

Com os mesmos dados de entrada, tentamos repetir teoricamente os resultados. Observamos a inexistência de barreiras para as heterojunções do tipo II e sua presença para as de tipo I. Para as de tipo I, também observamos o desaparecimento das barreiras para uma certa faixa de  $W_h$ , como previsto por [3]. Houve discrepância na previsão dos valores em que tal desaparecimento, ou pelo menos sua diminuição, deveria ocorrer.

A figura 3.10 mostra a resposta espectral para o dispositivo do tipo I usado por Abramof et al. [3]. Dela, temos que deve haver um mínimo da barreira para  $W_h = 0.9\mu\text{m}$ , pois temos resposta para freqüências inferiores ( $E = \hbar\omega$ ) em relação a  $W_h = 0.6\mu\text{m}$  e  $W_h = 1.2\mu\text{m}$ . Da figura 3.11, obtivemos tal mínimo em  $W_h$  pouco menor que  $0.1\mu\text{m}$ ,  $\neq 0.9\mu\text{m}$ . Tentando verificar o comportamento das barreiras com a variação de  $W_h$ , temos na figura 3.12 a variação da barreira na banda de condução com a variação da largura da heterojunção.

A altura da barreira é definida em nossos cálculos como a altura da maior barreira encontrada por um elétron, na banda de condução, fotografado, em movimento do lado p com direção ao lado n.



A estatística usada foi a de Fermi-Dirac.

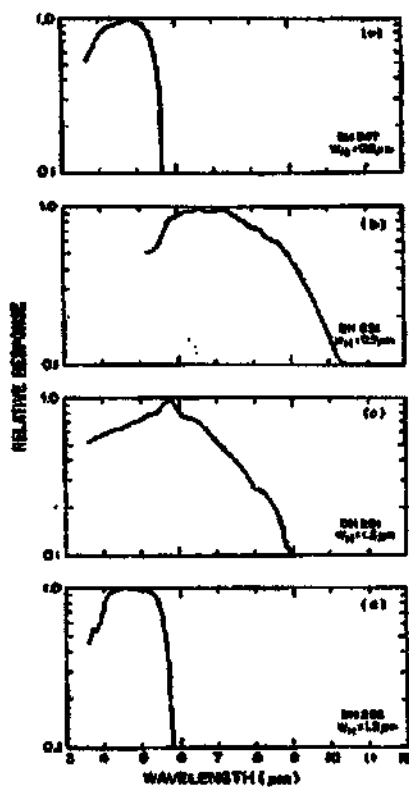


Fig. 3.10. Resposta espectral relativa para diodos tipo I, variando a largura da heterojunção, obtido por Abramof et al. [3].

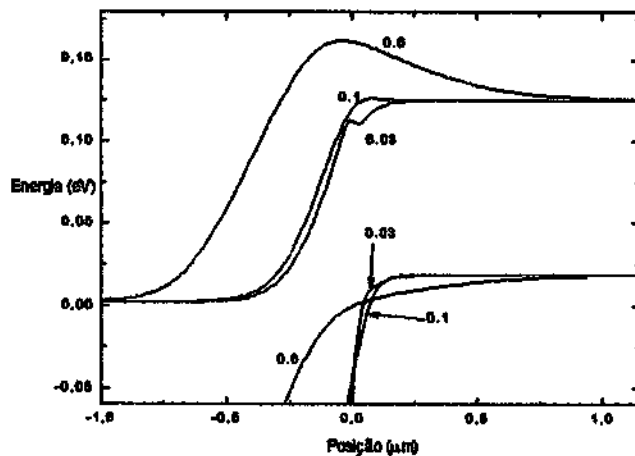


Fig. 3.11. Perfis de banda de energia observados, em 77K, variando a largura da heterojunção do tipo I, conforme tabela 1.

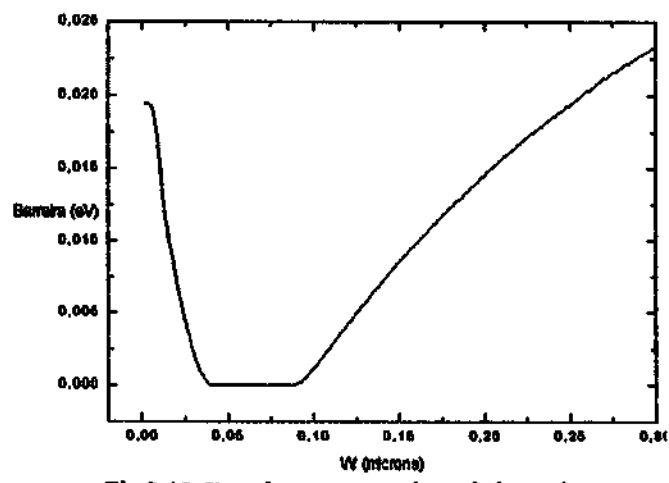


Fig.3.12. Barreiras apresentadas pela heterojunção tipo I em resposta à variação da largura da heterojunção.

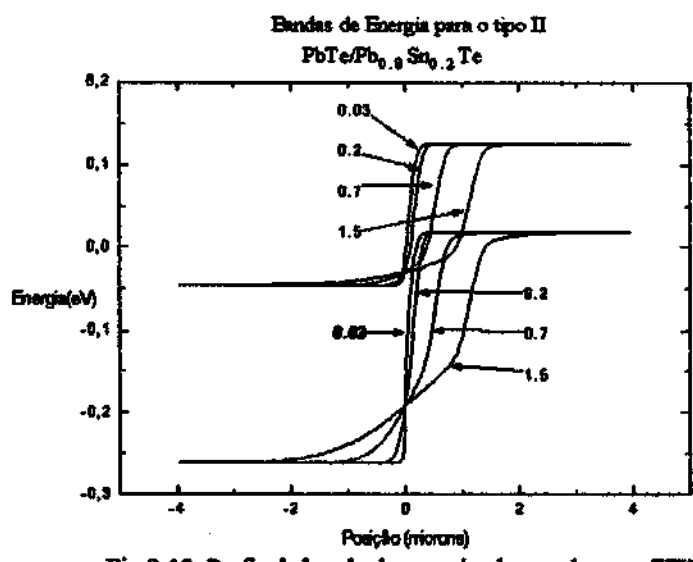


Fig.3.13. Perfis de banda de energia observados, em 77K, variando a largura da heterojunção do tipo II, conforme tabela 1.

Podemos encontrar na figura 3.13 os perfis de bandas para o material do tipo II [3]. Nesta figura comprovamos a inexistência de barreiras extras para os elétrons foto gerados em larguras de heterojunção de até 3.5  $\mu\text{m}$ , o que concorda com o verificado experimentalmente por [3].

Tabela 1- Propriedades dos tipos de heterojunções n-PbTe/p-Pb<sub>0.8</sub>Sn<sub>0.2</sub>Te em 77 K.

	concent. de elétrons (cm <sup>-3</sup> )	concent. de lacunas (cm <sup>-3</sup> )
Tipo I	8.0 E+16	3.5 E+17
Tipo II	2.0 E+18	3.5 E+17

### 3.6. Conclusão

Os resultados obtidos servem para explicar quantitativamente a perda de resposta espectral numa certa faixa de largura da heterojunção tipo I. Servem também para explicar também a inexistência de tal perda nas junções tipo II.

Há discrepância entre os valores da largura da heterojunção em que [3] observou a queda na resposta espectral e o que seria esperado pelos nossos cálculos. Ainda estamos investigando os motivos de tal discrepância. Uma das hipóteses foi quanto ao valor de  $\text{frac}$ , obtido de [10], conforme item 3.2.4.

Tentando verificar o efeito que a variação de  $\text{frac}$  causaria na formação de barreiras, temos a figura 3.14 e 3.15, que, apesar de não explicar as diferenças encontradas, coloca-nos na direção que desejávamos.

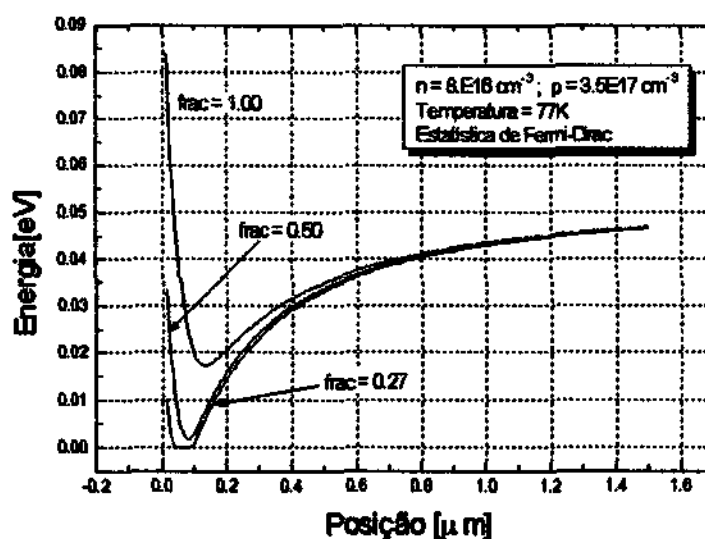


Fig.3.14. Barreira de Energia Potencial Eletrostática encontrada em função de  $W_p$ . A variação de  $\text{frac}$  afeta a posição do mínimo da barreira.

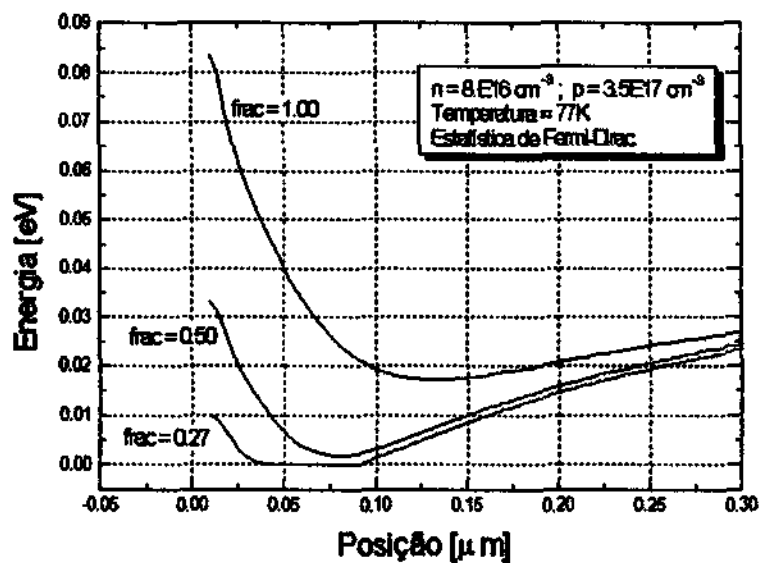


Fig.3.15.Barreira de Energia Potencial Eletrostática encontrada em função de  $W_L$ . Ampliação do resultado mostrado na figura 3.14.

#### 4.Evolução do Trabalho

Está sendo incluído no algoritmo, o cálculo da corrente em presença de iluminação e fora do equilíbrio, a fim de obter curvas teóricas de resposta espectral, e tentar reproduzir teoricamente os resultados experimentais de [3] e [11].

Neste sentido, necessitamos incrementar o conhecimento dos materiais usados no estudo. Constantes como  $\alpha$ , coeficiente de absorção, mobilidade, tempo de recombinação e outras, não estão sendo obtidas na literatura em uma forma desejada, pronta. Encontra-se, por exemplo, a curva experimental de  $\alpha$  para 300 K e para três concentrações. Com estes dados temos de obter a curva teórica aproximada para alfa em função da composição  $x$ .

Incluimos na figura 4.1, abaixo, a curva de  $\alpha$ , a 300K, em função de  $\hbar\omega$  (eV), obtida de R. Dornhaus et al [12], que reproduziu os resultados de I. A. Drabkin et al [13].

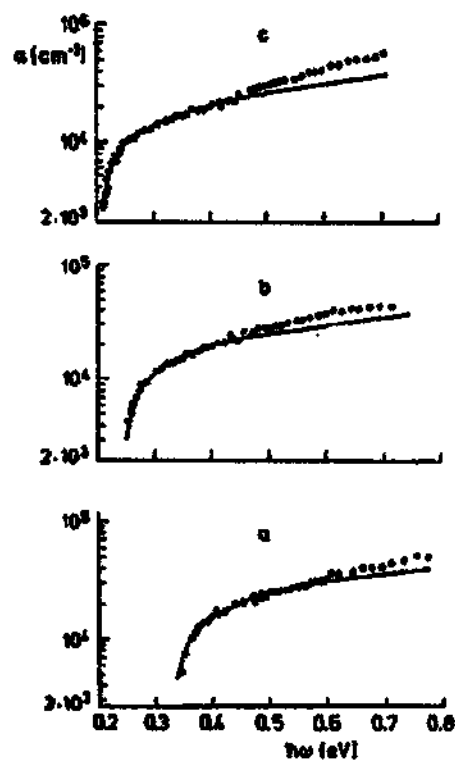


Fig.4.1. Coeficiente de absorção obtido para  $Pb_{1-x}Sn_xTe$ , para três concentrações diferentes ( $x=0.2, 0.1$  e  $0.0$ , c, b e a respectivamente) a temperatura de 300 K, em função de  $\hbar\omega$ .

A curva que aproxima o observado experimentalmente é dada por:

$$\alpha(x, \omega) = (2.018 \cdot 10^6 \cdot x^2 - 4.815 \cdot 10^5 \cdot x + 8.954 \cdot 10^4) \cdot \sqrt{\hbar\omega - E_g(x, 300)} \quad (28)$$

Passaremos em seguida, após a conclusão do programa fora da condição de equilíbrio, a materiais que são utilizados em outras faixas de comprimento de onda. Estes materiais estão bem melhor definidos e estudados na literatura e com o programa operando, passaremos diretamente ao estudo de seu comportamento espectral.

Após, havendo tempo hábil ainda este ano, refinaremos o programa de maneira a torná-lo o mais acessível possível ao usuário.

## 5. Conclusão

Vimos que este trabalho está inserido em um contexto histórico de interesse do LAS/INPE e do CTA, representado pelo ITA e IEAv. Ele visa obter o modelo e o procedimento de projeto de detectores ópticos na faixa de infravermelho por meio do emprego de heterojunções semicondutoras, com ampla utilização em dispositivos sensores ópticos, podendo ser usado como ponto de partida para o estudo de diodos emissores de luz com duas camadas ativas.

Pudemos observar que o modelamento do dispositivo em equilíbrio e sem considerar efeitos de iluminação está concluído. O modelamento sob iluminação e fora do equilíbrio, está em andamento.

## Referências

- [1] G. Keiser, 'Optical Fiber Communications', second edition, Ed. McGraw-Hill (1991).
- [2] H. Zogg, S. Blunier, T. Hoshino, C. Maissen, J. Masek, and A. Tiwari, IEEE Trans. on Elect. Dev. **38**, 1110 (1991).
- [3] E. Abramof, S. O. Ferreira, C. Boschetti and I. N. Bandeira, Infrared Phys. **30**, 85 (1990).
- [4] N. Oda, Infrared Phys. **27**, 49 (1987).
- [5] P. Migliorato and A. M. White, Solid-State Electronics **26**, 65 (1983).
- [6] P. R. Bratt and T. N. Casselman, J. Vac. Sci. Technol. **3**, 238 (1985).
- [7] D. K. Ferry, 'Semiconductors', Ed. Macmillan (1991).
- [8] H. Preier, Appl. Phys., **20**, 189 (1979).
- [9] S. Nishi, H. Kawamura and K. Murase, Phys. Stat. Sol. (b) **97**, 581 (1980).
- [10] M. Kriechbaum, Phys. Review B **30**, 3394, (1984).
- [11] G. Shuxing, C. Boliang and Y. Shixin, Int. Journal of Infrared and Milimeter Waves **12**, 251 (1991).
- [12] R. Dornhaus, G. Nimtz, B. Schlicht, 'Narrow-Gap Semiconductors', Ed. Springer-Verlag (1983).
- [13] I. A. Drabkin, L. Ya. Morgovsky, I. V. Nelson, Yu. I. Ravich, Sov. Phys. Semicond. **6**, 1156 (1973).