



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Carlos Eduardo de Almeida Brito

Estudo do transporte eletrônico de uma junção P-i-N com poço quântico único de GaAs

Manaus - AM
2016

Suporte Financeiro:



Carlos Eduardo de Almeida Brito

**Estudo do transporte eletrônico de uma junção P-i-N
com poço quântico único de GaAs**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas (UFAM) como requisito necessário para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Eduardo Adriano Cotta

Manaus - AM
Agosto, 2016

© *Todos os direitos autorais reservados.*

Ficha Catalográfica

Ficha catalográfica elaborada automaticamente de acordo com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

B862e Brito, Carlos Eduardo de Almeida
Estudo do transporte eletrônico de uma junção P-i-N com poço quântico único de GaAs / Carlos Eduardo de Almeida Brito. 2016
90 f.: il. color; 31 cm.

Orientador: Eduardo Adriano Cotta
Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Amazonas.

1. Heteroestrutura. 2. Poço Quântico. 3. Tunelamento. 4. Contato Ôhmico. 5. Transmissividade. I. Cotta, Eduardo Adriano II. Universidade Federal do Amazonas III. Título

Carlos Eduardo de Almeida Brito

**Estudo do transporte eletrônico de uma junção P-i-N
com poço quântico único de GaAs**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Amazonas (UFAM) como requisito necessário para a obtenção do título de Mestre em Física avaliada pela Comissão Julgadora composta pelos membros:

COMISSÃO JULGADORA

Professor Dr. Eduardo Adriano Cotta
Universidade Federal do Amazonas (UFAM) - Presidente

Professor Dr. Carlos Augusto de Moraes Cruz
Universidade Federal do Amazonas (UFAM)- Membro

Professor Dr. José Ricardo de Souza
Universidade Federal do Amazonas (UFAM)- Membro

Aprovado em 25 de outubro de 2016.

Local da defesa: Auditório Prof. José Leitão, Bloco do Departamento de Física, Setor Norte, *Campus* da Universidade Federal do Amazonas - Manaus.

Faça as coisas o mais simples que puder, porém não as mais simples.
(Albert Einstein)

Agradecimentos

À minha mãe por todo apoio durante esses anos de estudos, pelos conselhos e paciência comigo. Agradeço por todo amor, minha rainha.

Ao meu orientador, Prof. Eduardo Adriano Cotta, por sua amizade, sua orientação no decorrer desse trabalho. Muito obrigado por todos os conselhos que vem desde a época de PIBIC.

Aos meus amigos Aldemir e Everton por suas longas amizades, por todas as conversa descontraidas, pelo apoio nos momentos em que precisei, por me "aturar" quando os resultados não saiam de forma satisfatória e ficarem me ouvindo sobre esses problemas, ao Diego pelas horas de estudos durante as disciplinas, pelos conselhos e pela sua amizade.

A minha namorada Verena Rocha, que por mais que a tenha conhecido quase no fim do mestrado, vem me ajudado muito nessas horas difíceis. Por todas as conversas sobre os mais variados assuntos, por todas as correções linguísticas, por todo carinho e amor.

Aos professores José Ricardo e Denilson que me permitiram acesso ao Cluster quando precisei, ao Prof. Sanderson pela ajuda com o programa Fortran, ao Prof. José Roberto pela ajuda e ensinamentos sobre o programa Maple.

Ao meu "co-Orientador" e amigo José Wilson Matias Pinto, por toda a ajuda com esse trabalho, por todas as conversas e conselhos independente do local.

Agradeço a todos aqueles que contribuíram com esse trabalho, desculpe não poder colocar todos.

‘A CAPES pelo apoio financeiro no decorrer desse trabalho.

RESUMO

Neste trabalho estudamos as propriedades elétricas de dispositivos com dupla barreira de potencial, tanto de forma teórica quanto experimental. Para as análises experimentais foi fabricado uma amostra P-i-N com duas barreiras de potencial de *AlAs* com largura de 200Å e entre elas poço quântico de *GaAs* de largura de 100Å, onde o dispositivo foi crescido por MBE (*Molecular Beam Epitaxy*). Primeiramente é feito uma abordagem teórica sobre heteroestruturas semicondutoras compostas de poços quânticos. Para ocorrer o transporte eletrônico pelo dispositivo é necessário a deposição de contatos metálicos na superfície do dispositivo, por isso foi feito um estudo sobre o comportamento na interface do semiconductor quando é inserido um metal, abordando os fenômenos de transporte de corrente e os tipos de contatos formados (Schottky ou Ôhmico), mostrando que o contato feito na amostra P-i-N é do tipo Ôhmico. Para a caracterização da resistência e da resistividade dos contatos foi estudado e aplicado o método TLM (*Transmission Line Model*). Posteriormente para o diodo de tunelamento ressonante foram discutidos modelos teóricos para o transporte da corrente de tunelamento, onde calculamos a probabilidade de tunelamento do elétron pelo sistema. Neste caso, levou-se em consideração na equação de Schrodinger a tensão externa, mostrando que as funções de onda nas barreiras e poço quântico têm como solução analítica que consiste na combinação linear das funções de Airy. Finalmente, a transmissividade foi obtida usando o formalismo do Método de Matriz de Transferência, para isso foi desenvolvido um algoritmo no programa *Maple15*[®] que calcula o coeficiente de transmissão t , a partir desses resultados foi possível levantar curvas da transmissividade em função da energia do elétron incidente e curvas da densidade de corrente de tunelamento em função da tensão externa. Esses resultados foram comparados com os das literaturas e com o resultado experimental da curva i-V da amostra P-i-N. Por fim, foi proposto uma nova morfologia de amostra para trabalhos futuros.

Palavras-chave: **Heteroestrutura. Poço Quântico. Tunelamento. Contato Ôhmico. Transmissividade. Densidade de Corrente de Tunelamento.**

ABSTRACT

In this work the electrical properties of devices with double potential barrier studied both theoretically and experimentally. For the experimental analysis was made a sample P-i-N with two AlAs potential barriers with a width of 200Å and between quantum well of 100Å wide GaAs, the device was grown by MBE (Molecular Beam Eptaxy). First and made a theoretical approach to semiconductor heterostructures composed of quantum wells. To place the electronic transport the device is required deposition of metal contacts on the device surface, so it was made a study of the behavior in the semiconductor interface when and inserted a metal, addressing current transport phenomena and the types of contacts formed (Schottky or ohmic). To characterize the resistance and resistivity of the contacts has been studied and applied the method TLM (Transmission Line Model) , showing that the contact made in the sample P -i- N is of the type ohmic. Subsequently to the diode resonant tunneling, theoretical models for the transport of tunneling current were discussed, showing the exact calculation of the probability of tunneling of electrons through the system. In this case, it took into consideration the Schrodinger equation the external voltage, showing that the wave functions in the barriers and quantum well has the analytical solution, the linear combination of Airy functions.

Finally, the transmissivity was obtained using the formalism of the transfer matrix method, so it was developed an algorithm in *Maple15*[®] program that calculates T transmission coefficient, from these results it was possible to transmissibility curves as a function of the energy of the incident electron and curves of the tunneling current density according to the external voltage. These results were compared with those of literatures and the experimental result of the sample curve ixV P-i-N. Finally, a new sample morphology was proposed for future work.

Keywords: Heterostructure . Quantum well. Tunneling . Ohmic contact . Transmissivity . Tunneling Current Density.

LISTA DE FIGURAS

1.1	Curva i-V de um Diodo Tunel	1
1.2	Diodo de Dupla Barreira	2
1.3	Diodo de Dupla Barreira	3
2.1	Sílicio Dopado: (a) com Fósforo: Tipo N; (b) com Gálio:Tipo P.	6
2.2	Célula unitária do GaAS.	6
2.3	Curva de Dispersão:(a) GaAs; (b) AlAs	7
2.4	(a) Diposição das camadas dos materiais (AlGaAs/GaAs/AlGaAs); (b) Representação de um poço quântico e seus níveis de energia.	8
2.5	Composição de um Diodo de Tunelamento Ressonante.	9
2.6	Representação do dispositivo sob a presença de uma tensão externa: (a) Criação do poço triangular na interface entre a camada de acumulação e a barreira de potencial; (b) Tunelamento 3D-2D; (c) Tunelamento 2D-2D; . .	10
3.1	Níveis de energia do metal e do semiconductor tipo-n antes da formação da junção.	12
3.2	Diagrama de bandas de energia após o contato entre um metal e um semiconductor do tipo: (a) tipo n; (b) tipo p.	13
3.3	Tipos de transporte na Barreira <i>Schottky</i> : (1) Emissão Termiônica; (2) Tunelamento Quântico.	14
3.4	Barreira <i>Schottky</i> no equilíbrio.	14
3.5	Representação da barreira <i>Schottky</i> com tensão externa sob duas condições: (a) Polarização direta; (b) Polarização reversa.	15
3.6	Diagrama da banda de uma barreira <i>Schottky</i> mostrando os dois processos referente ao tunelamento quântico. W é a largura da região de depleção no equilíbrio, E_m é uma energia menor que a altura da barreira $e\phi_b$, x_1 é a largura da barreira para Emissão de Campo-Termiônico x_2 é a largura da barreira para Emissão de Campo	19

3.7	Comportamento i-V de acordo com o tipo de transporte de corrente: A- Emissão Termiônica; B- Emissão de Campo; C- Emissão de Campo-Termiônico.	19
3.8	Resistências que atuam na junção metal-semicondutor.	20
3.9	(a) Vista frontal dos contatos; (b) Dimensões da vista superior do contatos metálicos sobre o semicondutor.	21
3.10	(a) Esquema da mesa para medida TLM, (b) Gráfico da resistência em função das distancias.	22
4.1	Processo do tunelamento ressonante em um DRT Ref. [43].	25
4.2	Perfil do potencial de uma heteroestrutura contendo um poço quântico sem a aplicação de tensão externa.	26
4.3	Forma da banda de condução de um sistema dupla barreira de potencial submetida a um campo elétrico externo.	29
5.1	(a) Representação da heteroestrutura P-i-N após a corrosão; (b) Imagem da amostra obtida por AFM no Laboratório de Óptica de Materiais-OptiMa após a corrosão química, a parte superior do plator é referente a camada P e a inferior N.	40
5.2	(a) Representação esquemática para medidas elétricas na amostra.	41
5.3	Resistência de contato em função da distância, como o erro das medidas foram de aproximadamente $R = 0,5\Omega$, então o valor dos erros são o tamanho dos pontos	42
5.4	Representação de uma dupla barreira de potencial finita de altura V_0	44
5.5	Coeficiente de Transmissão para uma heteroestrutura sem tensão externa, contendo duas barreiras de potencial em função da anergia do elétron incidente. As barreiras possuem comprimento $lb = 20\text{\AA}$ e o poço $lp = 50\text{\AA}$ a altura das barreiras $V_0 = 0,5eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_{AlGaAs}^* = 0,1087m_0$ e do poço quântico $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [3] e a Figura inserida no gráfico é o resultado obtido no programa QWs sendo $E_0 = 94,7meV$ e $E_1 = 398,9meV$	44
5.6	Coeficiente de Transmissão para uma heteroestrutura com tensão externa, contendo duas barreiras de potencial em função da energia do elétron incidente. As barreiras possuem comprimento $lb = 20\text{\AA}$ e o poço $lp = 50\text{\AA}$ com altura das barreiras $V_0 = 0,5eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_{AlGaAs}^* = 0,1087m_0$ e do poço quântico $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$. Na Figura (a) Tensão $V = 0,16V$ e na (b) $V = 0,4V$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [3].	45
5.7	Representação de uma tripla barreira de potencial finita, de altura V_0	46

- 5.8 Coeficiente de Transmissão sem tensão externa aplicada para uma heteroestrutura contendo três barreiras de potencial em função da energia do elétron incidente. As barreiras possuem comprimento $lb = 20\text{\AA}$ e o poço $lp = 50\text{\AA}$ com altura de barreiras $V_0 = 0,5eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_{AlGaAs}^* = 0,1087m_0$ e do poço quântico $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [3] e a figura inserida no gráfico é o resultado obtido no *Software* QWs sendo $E_0 = 88,4meV$, $E_1 = 100,8meV$, $E_2 = 366,3meV$ e $E_3 = 417,3meV$ 47
- 5.9 Coeficiente de Transmissão sem tensão externa aplicada para uma heteroestrutura contendo cinco barreiras de potencial em função da anergia do elétron incidente.As barreiras possuem comprimento $lb = 20\text{\AA}$ e o poços $lp = 50\text{\AA}$ a altura das barreiras é $V_0 = 0,5eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_{AlGaAs}^* = 0,1087m_0$ e do poço quântico $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [39] e a Figura inserida no gráfico é o resultado obtido no programa QWs com níveis de energia $E_3 = 104,9meV$, $E_4 = 342,4meV$, $E_5 = 3700,7meV$, $E_6 = 403,2meV$ e $E_7 = 431,1meV$ 48
- 5.10 Logarítimo da densidade de corrente de tunelamento em função da tensão aplicada para uma heteroestrutura contendo duas barreiras. As barreiras possuem comprimento $lb = 20\text{\AA}$ e o poço $lp = 50\text{\AA}$ a altura das barreiras é $V_0 = 0,5eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_b^* = 0,094m_0$ e do poço quântico $m_p^* = 0,0636m_0$, com temperatura $T = 0,001K$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,005eV$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [39] 50
- 5.11 Densidade de corrente de tunelamento em função da tensão aplicada para uma heteroestrutura contendo duas barreiras. As barreiras possuem comprimento $lb = 50\text{\AA}$ e o poço $lp = 90\text{\AA}$ a altura das barreiras é $V_0 = 0,25eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_b^* = 0,078m_0$ e do poço quântico $m_p^* = 0,041m_0$, com temperatura $T = 5K$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,04eV$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [38] 51
- 5.12 Logarítimo da densidade de corrente de tunelamento em função da tensão aplicada para uma heteroestrutura contendo três barreiras. As barreiras possuem comprimento $lb = 50\text{\AA}$ e os poços $lp = 90\text{\AA}$ a altura das barreiras é $V_0 = 0,5eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_b^* = 0,094m_0$ e dos poços quântico $m_p^* = 0,0636m_0$, com temperatura $T = 0,001K$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,005eV$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [39] 52

- 5.13 Densidade de corrente de tunelamento em função da tensão aplicada para uma heteroestrutura contendo três barreiras. As barreiras possuem comprimento $lb = 50\text{\AA}$ e os poços $lp = 90\text{\AA}$ com a altura das barreiras $V_0 = 0,25eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_b^* = 0,078m_0$ e dos poços quântico $m_p^* = 0,041m_0$, com temperatura $T = 5K$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,04eV$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [38]. 53
- 5.14 Coeficiente de Transmissão sem tensão externa aplicada para a amostra P-i-N em função da anergia do elétron incidente. As barreiras possuem comprimento $lb = 200\text{\AA}$ e o poço $lp = 100\text{\AA}$ a altura das barreiras é $V_0 = 0,446eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_{AlAs}^* = 0,15m_0$ e do poço quântico $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$ 55
- 5.15 Logarítmo do coeficiente de Transmissão sem tensão externa aplicada para a amostra P-i-N em função da anergia do elétron incidente. As barreiras possuem comprimento $lb = 200\text{\AA}$ e o poço $lp = 100\text{\AA}$ a altura das barreiras é $V_0 = 0,446eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_{AlAs}^* = 0,15m_0$ e do poço quântico $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$. A Figura inserida no gráfico é o resultado obtido no programa QWs 55
- 5.16 Curva i-V da amostra P-i-N, com temperatura de $T = 300K$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,0092eV$. A linha sólida representa a curva ixV obtida experimentalmente e os pontos representam o resultado obtido pelo algoritmo desenvolvido. 56
- 5.17 Logarítmo curva experimental i-V da amostra P-i-N. 57
- 5.18 Curva experimental i-V da amostra P-i-N, com temperatura de $T = 10K$ $T = 300K$ 57

LISTA DE TABELAS

3.1	Tipos de contato de acordo com as funções trabalho do semicondutor e do metal.	12
5.1	Energia dos estados ressonantes com diferentes métodos para um sistema com dupla barreira de potencial.	46
5.2	Energia dos estados ressonantes com diferentes métodos para um sistema com tripla barreira de potencial.	47
5.3	Energia dos estados ressonantes com diferentes métodos para um sistema com quántupla barreira de potencial.	49

LISTA DE ABREVEATURAS:

MBE - *Molecular Beam Epitaxi*. Epitaxia por Feixe Molecular.

DBD - *Double Barrier Diode*. Diodo de Dupla Barreira.

RTD - *Resonant Tunneling Diode*. Diodo de Tunelamento Ressonante.

TLM - *Transmission Line Model*. Modelo de Linha de Transmissão.

MMT - Método Matriz de Transferência.

BV - Banda de Condução..

BC - Banda de Valência.

MS - Metal Semicondutor.

TE - *Thermionic Emission*. Emissão Termiônica.

FE - *Field Emission*. Emissão de Campo.

TFE - *Thermionic Field Emission*. Emissão Termiônica de Campo.

SUMÁRIO

1	Introdução	1
2	Dispositivos Semicondutores	5
2.1	Semicondutores	5
2.2	Heteroestruturas Semicondutoras	8
2.3	Diodo de Tunelamento Ressonante (DTR)	8
3	Junção Metal Semicondutor	11
3.1	A Física na interface Metal-Semicondutor: Barreira <i>Schottky</i>	11
3.1.1	Transporte de corrente na junção	13
3.2	A Física na interface Metal-Semicondutor: Contato Ôhmico.	20
3.2.1	Resistência de contato	20
3.2.2	Medidas de Resistência do contato usando o modelo de linha de transmissão (<i>Transmission Line Model</i> - TLM)	21
4	Transporte Através de um Diodo de Tunelamento Ressonante	24
4.1	Tunelamento ressonante e a Resistência Diferencial Negativa	24
4.2	Densidade de Corrente de Tunelamento	25
4.3	Cálculo do Coeficiente de Transmissão	28
4.3.1	Probabilidade de Transmissão para duas Barreiras de Potencial com Tensão Externa V	28
4.3.2	Método de Matriz Transferência	35
5	Resultados	40
5.1	Resistividade e resistência dos Contatos	41
5.2	Coeficiente de Transmissão para DTR	43
5.2.1	Dupla barreira de potencial sem tensão externa	43
5.2.2	Dupla barreira de potencial com tensão externa	45
5.2.3	Tripla barreira de potencial sem tensão externa	46

5.2.4	Quíntupla barreira de potencial sem tensão externa	48
5.3	Densidade de Corrente	50
5.3.1	Dupla barreira	50
5.3.2	Tripla barreira	52
5.4	A amostra	54
5.4.1	Transmissividade	55
5.4.2	Medidas da curva ixV da P-i-N	56
6	Conclusão	59
	Referências Bibliográficas	60
	Apêndice A	64
	Apêndice B	66
	Apêndice C	70

Introdução

Devido ao avanço das técnicas de crescimento para dispositivos semicondutores nas últimas décadas, o estudo de heteroestruturas que levam em consideração o comportamento quântico das partículas aumentaram significativamente. Com isso, foi possível desenvolver dispositivos contendo poços, fios e pontos quânticos, tais heteroestruturas tem grande impacto tecnológico, podendo ser desenvolvido sensores de infravermelho, dispositivos capazes de fazer o transporte do *Spin* do elétron, assim como, Diodos de Tunelamento Ressonante onde o transporte pelo dispositivo ocorre devido aos níveis de energias discretos dentro do poço quântico, que é o dispositivo foco deste trabalho. Por isso, vamos fazer um resumo histórico do surgimento desses diodos.

Tudo começou quando, em 1956, os engenheiros da *Bell Labs* descobriram um defeito em um transistor FET. O dispositivo tinha um comportamento diferente de um FET convencional quando o nível de dopagem na junção PN excedia certo limite. Esaki e dois estagiários foram designados para investigar o problema. Eles descobriram que no caso de alta concentração de dopagem o comportamento da junção PN apresentava fenômenos estranhos, como resistência elétrica negativa. Para resolver o problema bastava dopar o transistor abaixo do limite da resistência negativa.

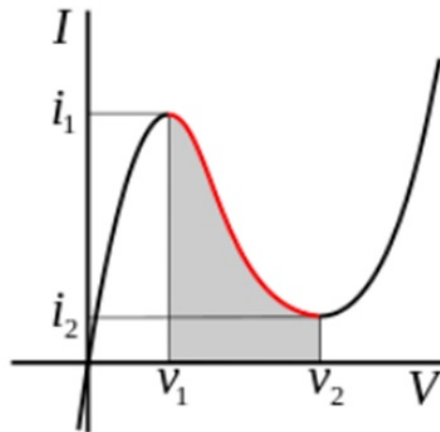


Figura 1.1 - Curva i-V de um Diodo Túnel

Mesmo após o problema ser resolvido, Esaki continuou sua pesquisa, criando diodos de germânio com junção PN altamente dopada. Descobriu que, ao contrário dos diodos convencionais, em que a corrente elétrica tem um comportamento exponencial quando a voltagem é aplicada em um sentido, ele observou na curva i-V (Figura 1.1) desse novo dispositivo, que a corrente elétrica ia aumentando a medida que a tensão aumentava

até um determinado valor v_1 , após essa tensão, a corrente diminuía (Resistência Diferencial Negativa) até v_2 e depois voltava a aumentar. Ele descobriu que a origem dessa zona de resistência negativa tinha como origem elétrons que tunelavam pela barreira do diodo. Com isso em 1958 Leo Esaki desenvolveu o primeiro dispositivo semiconductor que leva em consideração a natureza quântica das partículas: O Diodo Túnel [1]. Este diodo deu origem a uma nova classe de dispositivo que exibe o fenômeno quântico de tunelamento proporcionando uma alta velocidade de chaveamento acompanhada de um baixo consumo de potência, dando início ao desenvolvimento de dispositivos ultra-rápidos.

O estudo experimental em heteroestruturas semicondutoras (material composto de diversas camadas com diferentes tipos de semicondutores) contendo poços quânticos tornou-se mais intenso devido ao aprimoramento das técnicas de fabricação. A técnica que apresenta um crescimento mais preciso e uniforme é a Epitaxia por Feixe Molecular (*Molecular Beam Epitaxy*-MBE) possibilitando que a heteroestrutura seja crescida, camada atômica por camada atômica. Com esse avanço, foi possível implementar uma gama de novos dispositivos diferentes dos convencionais (transistores de efeito de campo e bipolares) [2].

Um dos fenômenos mais interessantes dos novos dispositivos é o tunelamento de elétrons através de barreiras de potencial, abordado primeiramente por Esaki em 1973 [3] e posteriormente por Chang em 1974 [4]. Esse fenômeno ocorre em heteroestruturas formadas por um poço quântico posicionado entre duas barreiras de potencial, denominada Diodo de Dupla Barreira (*Double Barrier Diode*-DBD), mostrado na Figura 1.2. Dispositivos semicondutores que trabalham com o tunelamento de portadores em múltiplas barreiras são denominados Diodos de Tunelamento Ressonante (*Resonant Tunneling Diode*-RTD).

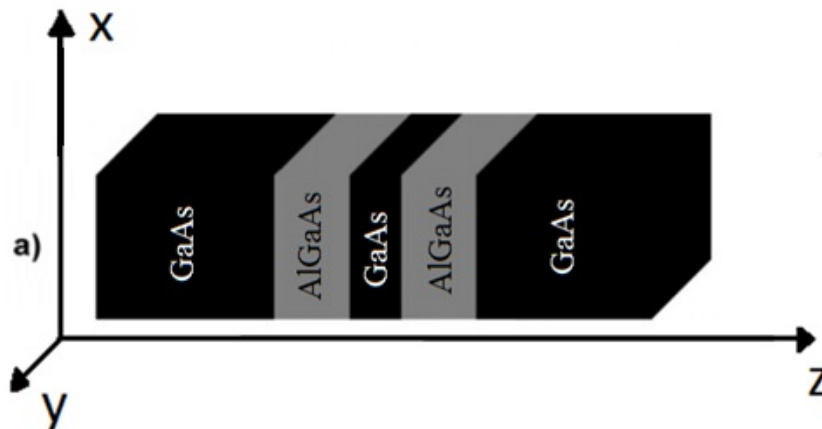


Figura 1.2 - Diodo de Dupla Barreira

Em um RTD os níveis de energias dentro do poço quântico são discretos devido ao confinamento. Tomando o caso em que o portador de carga seja o elétron, sua passagem pelo dispositivo é condicionada ao tunelamento através das barreiras de potencial, onde o tunelamento ressonante só ocorre quando a energia do elétron incidente se iguala ao nível de energia discreto dentro do poço quântico. Um dos métodos utilizado para a determinação da probabilidade de tunelamento do elétron pelo sistema é o Método da Matriz de Transferência [5], e com isso é possível determinar a densidade de corrente de

tunelamento usando o modelo proposto por Esaki [3].

Nesta dissertação é feita primeiramente o estudo teórico do comportamento do elétron em heteroestruturas semiconduras, analisando o comportomanto das bandas de energias quando é inserido na interface do semiconductor um contato metálico, assim como a distorção das bandas ao aplicar uma tensão externa, fenômeno que é conhecido como efeito *Stark*. Nesta parte também foi analisada o efeito do confinamento dentro do poço quântico desse dispositivo e através desses estudos foi desenvolvido um algoritmo usando o software *Maple15*[®] para efetuar o cálculo do coeficiente de transmissão através de heteroestruturas contendo um ou mais poços quânticos, assim, como o cálculo da densidade de corrente de tunelmento das mesmas. E, a segunda parte consiste em estudar as propriedades elétricas da amostra P-i-N crescida no Instituto de Física da Universidade de São Paulo-USP no Laboratório de MBE, coordenado pelo Professor Alain Quivy, caracterizando a resistência de contato da amostra e obter o comportamento da corrente em função da tensão aplicada.

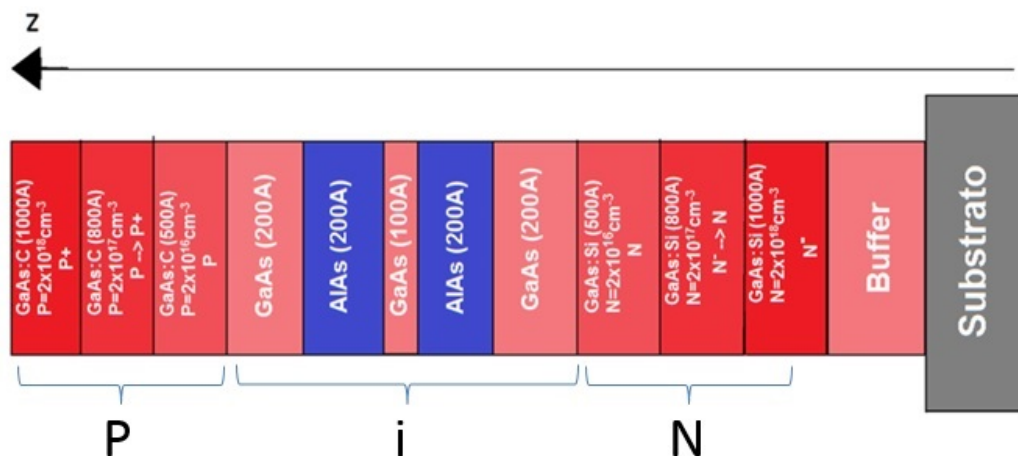


Figura 1.3 - Diodo de Dupla Barreira

Na Figura 1.3 é mostrado a representação da amostra P-i-N. O substrato é de GaAs, depois dele é crescida uma camada *Buffer* que é responsável de retirar as imperfeições do substrato, posteriormente foi crescida uma região do tipo N dopada com Silício, após essa região foi crescida uma região isolante (i), ou seja, não dopada que é composta de duas barreiras de potencial de AIAs e poço quântico de GaAs e por fim crescida uma região do tipo P de GaAs dopada com Carbono. Com o intuito de evitar a difusão de dopantes para as barreiras e poço foram crescidas na interface das barreiras uma camada espaçadoras de GaAs, assim como, as camadas dopadas possuem dopagens graduais.

Essa dissertação está dividida em 6 capítulos adicionada de dois apêndices com o o cálculo para densidade de corrente de tunelamento e o algoritmo desenvolvido, onde no Capítulo 1 é feita uma introdução.

Os estudos teóricos nesta dissertação iniciam-se no Capítulo 2, o qual abordará a Física de Semicondutores discutindo os tipos de semicondutores em relação ao seu *gap* de energia. Em seguida, faz-se um tratamento qualitativo sobre heteroestruturas semicondutoras e também analisar o comportamento para um Diodo de Tunelamento Ressonante, explicando como ocorre o transporte eletrônico no mesmo.

No capítulo 3 é abordado conceitos básicos sobre a Junção Metal Semicondutor, explicando o comportamento das bandas de energia nessa interface, como a criação de contatos do tipo barreira *Schottky* ou contato Ôhmico, discutindo os processos de transporte de corrente na junção. Será abordado o Modelo de Linha de Transmissão (TLM) para a determinação da resistividade e resistência de contato, sendo possível saber se o tipo de contato é *Schottky* ou Ôhmico através do levantamento da curva i - V entre os contatos.

No capítulo 4 é apresentado um estudo sobre o transporte eletrônico através de heteroestruturas compostas de um poço quântico, discutindo sobre o tunelamento ressonante e a resistência diferencial negativa, mostrando seu impacto na curva da corrente em função da tensão. Prosseguindo com o estudo teórico, dissertaremos sobre a densidade de corrente de tunelamento proposto por Esaki [1]. Para a determinação dessa corrente é necessário efetuar o cálculo do coeficiente de transmissão através da heteroestrutura, esse coeficiente foi obtido usando o formalismo Matriz de Transferência levando em consideração os efeitos perturbativos da tensão externa.

O capítulo 5 é dedicado aos resultados e discussões tanto teórico quanto experimental. Neste capítulo foi primeiramente feito o teste do algoritmo desenvolvido, para isso foram reproduzidos resultados das literaturas, comparando gráficos da transmissividade em função da energia do elétron incidente e também gráficos da densidade de corrente de tunelamento em função da tensão externa. Com o intuito de validar mais ainda o algoritmo desenvolvido nessa dissertação, com o auxílio do software QW's desenvolvido no Instituto de Estudos Avançados (IEAv-ITA) foram montadas tabelas com os valores dos estados ligados dentro do poço das heteroestruturas propostas na literatura. Assim foi possível comparar os valores encontrados na literatura, assim como o fornecido pelo software QW's e com obtidos nesta dissertação. Posteriormente foram executadas as medidas elétricas na amostra P-i-N com o intuito de determinar a resistência, e a resistividade dos contatos, após a caracterização dos contatos foi feito a medida do comportamento da corrente em função da tensão da amostra e com isso comparar o modelo teórico com as medidas experimentais.

No capítulo 6, foram obtidos os resultados e perspectivas para futuros trabalhos.

Dispositivos Semicondutores

Essa parte do trabalho é voltada para a apresentação de alguns conceitos básicos necessários para melhor compreensão do dispositivo a ser estudado. Será abordado alguns modelos sobre o estudo dos semicondutores e algumas de suas propriedades, assim como heteroestruturas semicondutoras contendo um ou mais poços quânticos e Diodos de Tunelamento Ressonante.

2.1 Semicondutores

Semicondutores são materiais que possuem bandas de energia proibida da ordem de alguns elétrons-volts (eV), denominadas “*band-gap*”. O *gap* é a energia necessária para que ocorra a transição eletrônica da Banda de Valência (BV) para a Banda de Condução (BC). A condutividade elétrica dos semicondutores depende de alguns fatores, um deles é a excitação térmica, uma vez que na temperatura do zero absoluto o semicondutor se comporta como um isolante. À medida que a temperatura aumenta, a condutividade cresce rapidamente devido ao fato da probabilidade de excitação dos portadores da BV para BC crescer com o aumento da energia térmica (condutividade intrínseca) [6].

Outras maneiras de aumentar a condutividade de um semicondutor é por meio da excitação óptica ou dopagem [6]. Na fotoexcitação, um semicondutor é excitado de maneira que a energia do fóton incidente seja maior que a energia de *gap* do semicondutor, com isso elétrons da banda de valência são transferidos para a banda de condução. A condutividade do material aumenta proporcionalmente com a intensidade da radiação incidente e volta ao seu valor inicial quando a fonte é desligada.

A segunda maneira de aumentar a condutividade é quando acrescentamos impurezas em um semicondutor (Semicondutores Extrínsecos), tais impurezas são chamadas de dopantes. Ao adicionar elementos de forma que ocorra a ocupação deles na rede cristalina do semicondutor, através de ligações covalentes, esses dopantes se tornam elementos substitucionais e dependendo do elemento que for usado como dopante o semicondutor terá um elétron sobrando ou um buraco em excesso, denominados semicondutores do tipo N ou tipo P [7], respectivamente. Um exemplo de um semicondutor extrínseco do tipo N é o caso do Silício (Si), pertencente a família 4A, dopado com Fósforo (P) ou Arsênio (As). Tanto o P quanto o As, pertencem a família 5A, ou seja, possuem cinco elétrons na camada de valência. Ao se inserir um dos dois elementos no cristal de Si, ocorrem ligações covalentes entre quatro elétrons e um deles fica livre, ou seja, é o chamado elétron livre, que ganha movimento e gera corrente elétrica, como ilustrado na Figura 2.1 – a. Para o caso da dopagem do tipo P, há adição de Boro (B) ou Gálio (Ga) ao silício. Quando são adicionados ao cristal de silício, criam lacunas ou buracos, que conduzem corrente, pois

ambos possuem três elétrons na camada de valência, exemplificado na Figura 2.1 – b.

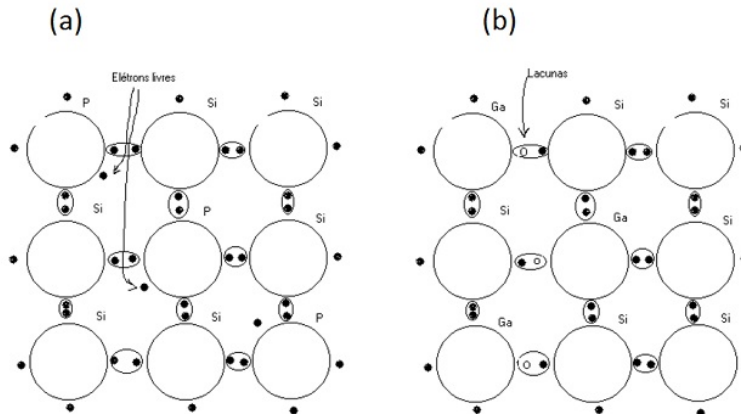


Figura 2.1 - Silício Dopado: (a) com Fósforo: Tipo N; (b) com Gálio: Tipo P.

Alguns materiais semicondutores mais estudados da tabela periódica para a aplicação em dispositivos optoeletrônicos são do grupo *IV*, como o Ge e o Si, compostos binários *III – V* como GaAs, AlAs, Inp; além dos compostos ternários $Al_xGa_{1-x}As$, onde x é a fração do cristal ocupadas por átomos de alumínio x e $1 - x$ é a fração ocupada por átomos de Gálio (Ga). Os materiais do grupo *III – V* citados anteriormente são os mais utilizados para aplicação em dispositivos optoeletrônicos. Por possuírem estruturas cristalinas semelhantes e, devido a isso, a diferença entre seus parâmetros de redes são pequenos (menor 0.15% a temperatura ambiente) [8], assim as tensões na rede são basicamente nulas em heteroestruturas. Semicondutores como o *GaAs* e $Al_xGa_{1-x}As$ são que tem uma estrutura cristalina tipo blenda de zinco, veja a célula unitária na Figura 2.2.

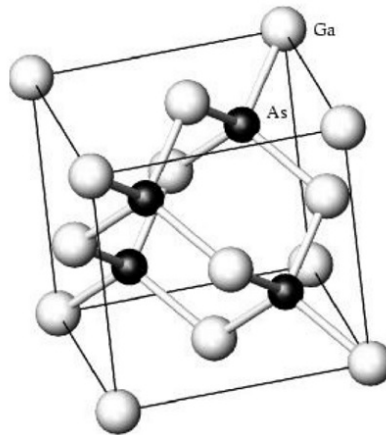


Figura 2.2 - Célula unitária do GaAS.

Uma das principais ligas utilizadas na fabricação de dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos de baixa dimensionalidade são aquelas compostas pelo *GaAs* e suas ligas. Esse fato pode ser explicado devido a uma gama de vantagens oferecidas por esses materiais, dentre eles podemos citar: ótima qualidade na interface, pequena diferença entre as constantes dielétricas, alta mobilidade eletrônica a baixas temperaturas [12]. Em relação

às propriedades elétricas e ópticas, como a condutividade e a absorção óptica, estão relacionadas diretamente a sua estrutura de bandas de energia (Banda de Valência e Banda de Condução). As bandas de energia têm origem na sobreposição dos níveis de energia dos átomos, quando estes se agrupam para formar o sólido.

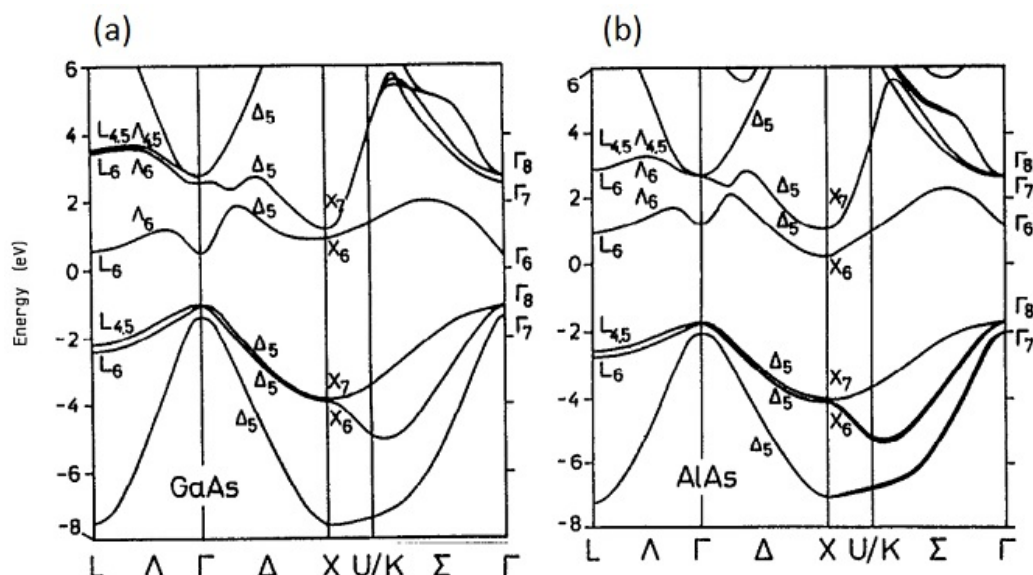


Figura 2.3 - Curva de Dispersão:(a) GaAs; (b) AlAs .

Ao se formar a banda de valência (BV) e a banda de condução (BC) é gerada uma lacuna de energia que existe entre o topo da banda de valência e o fundo da banda de condução, comumente denominada gap . O material será considerado um semicondutor se a energia de seu gap (E_g) tiver um valor maior que zero e menor que aproximadamente 3 eV[13]. A Figura 2.3 – a mostra a curva de dispersão de energia em função do vetor de onda k em algumas direções de alta simetria como X , L e K do GaAs. Trata-se de uma estrutura com gap direto, onde o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução estão no centro da zona de Brillouin, em $k = 0$, o ponto Γ e possui energia de gap $E_g = 1.424\text{eV}$ em $T = 300\text{K}$ e $E_g = 1.5194\text{eV}$ para $T = 2\text{K}$ [9]. Já para o AlAs seu gap é indireto, pois o máximo da banda de valência (no ponto Γ) não coincide com o mínimo da banda de condução (que se encontra no ponto χ), conforme mostrado na Figura 2.3 – b. Para a liga de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ a estrutura é a mesma do GaAs, com a diferença que uma certa quantidade x de Gálio (Ga) tenha sido substituído por alumínio, para essa liga, os parâmetros como massa efetiva, gap de energia e entre outros, depende da concentração x de Al, vale lembrar que para concentrações maiores que 45% de alumínio a liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ passa de gap direto para gap indireto[9], cuja a equação para determinar a energia de gap desses materiais é, com $0 < x < 0,45$ é dada por:

$$E_g(x) = 1,424 + 1,247x \quad (2.1)$$

Na próxima seção vamos falar como é composto uma heteroestrutura semicondutora e como é formado um poço quântico com seus estados discretos.

2.2 Heteroestruturas Semicondutoras

Heteroestruturas semicondutoras consistem de um dispositivo formado por dois ou mais materiais diferentes superpostas em camadas planas, onde as espessuras são precisamente controladas. Uma das técnicas que possibilita esse tipo de crescimento epitaxial é a **MBE**, permitindo que cada camada do mesmo semicondutor seja crescida monocamada por monocamada, através de feixes moleculares [10]. Essas camadas são crescidas uma sobre a outra em um mesmo substrato ao longo de uma direção definida, conforme a Figura 2.4 – a. Como os materiais possuem energia de *gap* diferentes, tal disposição faz com que os níveis de Fermi dos semicondutores se alinhem e como consequência desse alinhamento as bandas de energia dos semicondutores são distorcidas, com isso, é formado um poço quântico com níveis de energia discreto, mostrado na Figura 2.4 – b.

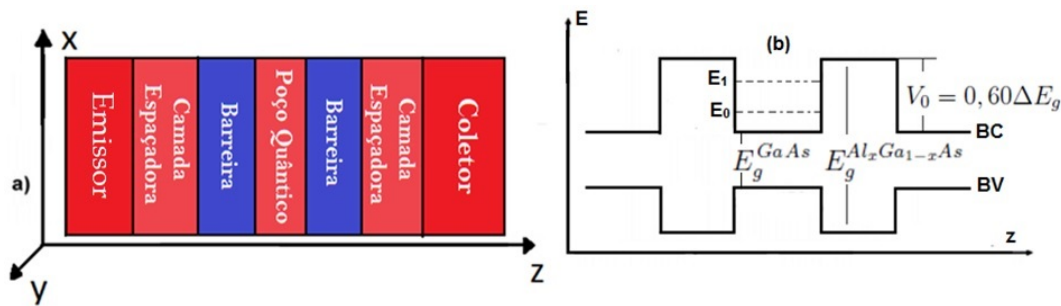


Figura 2.4 - (a) Disposição das camadas dos materiais (AlGaAs/GaAs/AlGaAs); (b) Representação de um poço quântico e seus níveis de energia.

Para o caso de um dispositivos formado de um poço quântico entre duas barreiras de potencial, elétrons são aprisionados no poço devido ao potencial das barreiras, se a largura do poço for menor que $100nm$ [2] níveis de energia são discretos dentro do poço na direção de crescimento da heteroestrutura. Por isso que o poço quântico é denominado como um sistema bi-dimensional ($2D$), pois o movimento dos elétrons é quantizado em uma direção (z) e livre nas outras. Os níveis de energia dentro do poço são determinados resolvendo a equação de Schrodinger para o caso do potencial unidimensional.

Um parâmetro importante que ocorre após a formação do poço quântico é denominado de *band-offset*, que descreve os valores das alturas das barreiras e é dado pela diferença dos *gap* de cada material ΔE_g , para o caso do sistema $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ temos que: $\Delta E_g = E_g^{Al_xGa_{1-x}As} - E_g^{GaAs}$. Para materiais compostos de AlGaAs, 60% da ΔE_g [11] está na banda de condução e os outros 40% está na banda de valência.

A seguir, será mostrado do que é composto um Diodo de Tunelamento Ressonante e os dois tipos de tunelento que podem ocorrer pelo dispositivo.

2.3 Diodo de Tunelamento Ressonante (DTR)

Podemos definir um diodo de tunelamento ressonante como uma heteroestrutura semicondutora que possui um poço quântico não dopado inserido entre duas barreiras de potencial não dopadas, essa configuração é denominada de região *i* (*insulator*) do DTR, e encontra-se inserida entre duas camadas fortemente dopadas. Elas são responsáveis

pelo transporte dos portadores através da estrutura quando aplicamos uma diferença de potencial entre as extremidades do diodo. Essas regiões são identificadas como emissor e receptor, como mostrado na Figura 2.5, dependendo da polaridade dos potenciais elétricos externos aplicados, esses contatos podem ser dopados tanto com impurezas aceitadoras **tipo-P** quanto doadoras **tipo-N**. Para um diodo com dopagem onde um dos contatos seja do tipo-P e o outro do tipo-N cria-se um dispositivo P-i-N, onde temos como portadores majoritários, tanto elétron quanto buracos, que é o DTR estudado nesse trabalho.

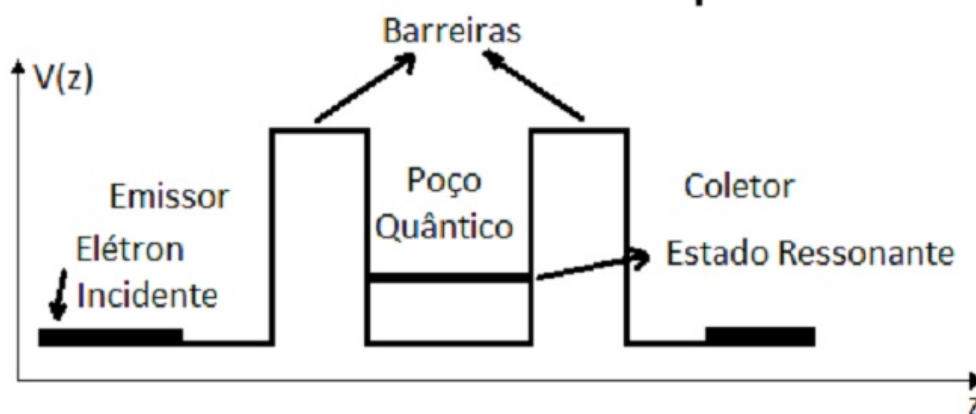


Figura 2.5 - Composição de um Diodo de Tunelamento Ressonante.

A concentração de dopagem alta faz com que o nível de Fermi que antes se encontrava na banda proibida, desloque-se para dentro da banda de condução. Geralmente é inserida uma camada semicondutora não dopada usando o mesmo material do poço quântico, denominada camada espaçadora, entre os contatos e as barreiras com o intuito de minimizar os efeitos de impurezas no transporte.

Sabemos que o fenômeno do tunelamento refere-se à possibilidade de uma partícula atravessar regiões que são energeticamente proibidas do ponto de vista da mecânica clássica. Quanticamente existe uma probabilidade não nula de portadores de cargas do emissor tunelarem pelo dispositivo mesmo que sua energia seja menor que a altura da barreira de potencial, apresentando uma máxima probabilidade de tunelamento quando a energia do portador no emissor coincidir com um dos níveis de energia dos estados ligados dentro do poço quântico, esse nível é denominado como estado ressonante.

Para que as energias dos estados ressonantes dentro do poço possam se alinhar com a energia da partícula incidente do emissor, devemos aplicar um campo elétrico externo no dispositivo. Na presença de um campo elétrico o perfil do potencial sofre uma deformação, alinhando-se na direção do campo elétrico (Efeito *Stark*), conseqüentemente os níveis de energias dentro do poço quântico mudam. Aplicando uma voltagem nos terminais do dispositivos forma-se no emissor uma região de acumulação de carga e, por consequência um poço quântico triangular, que também terá seus próprios níveis ressonantes ($2D$) como mostrado na Figura 2.6 – *a*. Com isso, o efeito de tunelamento pode ocorrer de duas formas distintas:

i) Tunelamento $3D - 2D$: Neste caso os portadores do contato ($3D$) tunelam ressonantemente através dos estados quantizados dentro do poço quântico ($2D$), mostrado na Figura 2.6 – *b*.

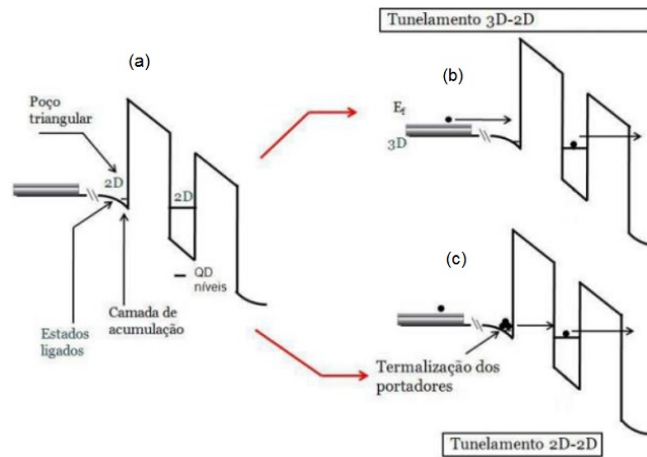


Figura 2.6 - Representação do dispositivo sob a presença de uma tensão externa: (a) Criação do poço triangular na interface entre a camada de acumulação e a barreira de potencial; (b) Tunelamento 3D-2D; (c) Tunelamento 2D-2D;

ii) Tunelamento $2D - 2D$: Os portadores termalizam para os estados de menor energia do poço triangular ($2D$), dessa forma o tunelamento ocorre quando os portadores acomodados nesses estados possuem a mesma energia dos níveis confinados no poço quântico ($2D$), ilustrado na Figura 2.6 – *c*.

Antes da compreensão sobre o transporte eletrônico pela heteroestrutura, é preciso que seja depositados filmes metálicos na interface do semiconductor, por isso o próximo capítulo refere-se aos fenômenos físicos referente ao processo de metalização de um semiconductor.

Junção Metal Semicondutor

Nesse capítulo é apresentado conceitos sobre o comportamento na interface de um semicondutor ao se inserir um contato metálico, apresentando os dois tipos de contatos formados: Barreira Schottky e Contato Ôhmico. Posteriormente, são apresentados os tipos de transporte de corrente por essa junção, e finalmente é mostrado como determinar a resistência desses contatos.

3.1 A Física na interface Metal-Semicondutor: Barreira *Schottky*

O contato entre um metal e um semicondutor pode ser de dois tipos, que depende da natureza tanto do metal quanto do semicondutor: o primeiro, é o do tipo ôhmico, que é caracterizado por uma baixa resistividade e por um comportamento linear da corrente em função da tensão aplicada. O segundo tipo de contato formado é o contato Schottky, em que quando uma tensão é aplicada reversamente, responde com uma corrente aproximadamente nula e uma corrente crescendo exponencialmente para voltagens aplicadas no outro sentido.

Os primeiros dispositivos eletrônicos a serem observados usavam o contato metal semicondutor, as primeiras observações datam de 1874 feitas por Broun [12], que notou a importância da tensão aplicada e das condições superficiais na resistência total do contato. Em 1931, Wilson [13] formulou a teoria de transporte de semicondutores baseada na teoria das estruturas de bandas em sólidos. Em 1938, Schottky propôs que a barreira de potencial tivesse como origem as cargas espaciais estáveis no semicondutor. O modelo baseado nesta consideração é conhecido como Barreira Schottky. Nos semicondutores em geral, principalmente nos do grupo III-V, na junção Metal-Semicondutor (MS) pode formar tanto uma barreira Schottky como um contato ôhmico, as condições do tipo de contato são mostrados na Tabela 1.

Uma junção formada por dois materiais diferentes é conhecida como Heterojunção, quando esses dois materiais são unidos o diagrama de banda de energia exibe uma descontinuidade na interface da junção, um exemplo de heterojunção é aquela formada a partir de semicondutores diferentes, por exemplo GaAs/AlGaAs.

Outro tipo de Heterojunção é formada pela junção entre um metal e um semicondutor, no qual apresenta utilidade para fabricação de dispositivos (um exemplo é o Diodo Schottky). O diagrama de bandas de energia dos materiais antes do contato são mostrados na Figura 3.1. Quando os dois materiais estão separados, seus níveis de Fermi têm posições relativas diferentes ao nível de vácuo, que dependem exclusivamente de suas

Tabela 3.1 - Tipos de contato de acordo com as funções trabalho do semicondutor e do metal.

Semicondutor tipo n	$\left\{ \begin{array}{l} \phi_m > \phi_s \\ \phi_m < \phi_s \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \text{Contato Retificador} \\ \text{Contato Ôhmico} \end{array} \right.$
Semicondutor tipo p	$\left\{ \begin{array}{l} \phi_m > \phi_s \\ \phi_m < \phi_s \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \text{Contato Ôhmico} \\ \text{Contato Retificador} \end{array} \right.$

respectivas funções trabalho do metal ϕ_m e do semicondutor ϕ_s , lembrando o nível de vácuo é uma região onde um elétron ganha energia suficiente e tem condições de desprender do material tornando-se, assim, um elétron livre.

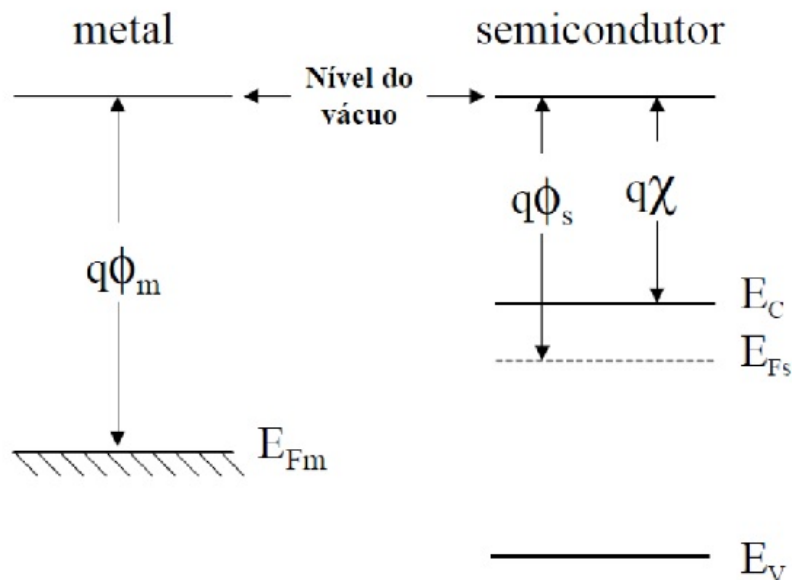


Figura 3.1 - Níveis de energia do metal e do semicondutor tipo-n antes da formação da junção.

Em uma junção entre um semicondutor e outro tipo de material ocorre uma descontinuidade na interface devido à diferença de função trabalho dos materiais. Sabemos que em $T = 0K$ os elétrons ocupam os estados de menor energia, de modo a preencher todos os estados até um certo nível E_F [7], o nível de Fermi, que por definição é o nível de maior energia ocupado por um sistema quântico a temperatura zero. Então podemos definir a função trabalho do metal ϕ_m como sendo a energia necessária para retirar um elétron do nível de Fermi até o nível de Vácuo, ou seja, é a diferença entre a energia do nível de Vácuo (E_{vac}) e a energia de Fermi (E_F), portanto a função trabalho do metal é definida por $\phi_m = E_{vac} - E_{FM}$. Nos semicondutores, a energia necessária para retirar um elétron do material é dado por sua afinidade eletrônica χ que é a diferença entre o nível de vácuo e a energia mínima da banda de condução do semicondutor (E_C). A Figura 3.1 mostra as posições de cada nível usando como referência o nível de Vácuo. Expressando de forma matemática, a afinidade eletrônica é definida por $\chi = E_{vac} - E_C$.

Quando um metal é colocado em contato com um semicondutor, ocorre uma difusão de cargas de um lado para o outro de modo a igualar os dois níveis de Fermi, esse ali-

nhamento acarreta uma distorção das bandas de condução e de valência do semicondutor, formando uma barreira de potencial com altura ϕ_B e com largura da região de depleção W , chamada de Barreira *Schottky*. O sentido de movimento dos elétrons depende dos valores relativos das funções trabalho dos materiais, para o caso em que $\phi_m > \phi_s$ elétrons vão fluir do semicondutor para o metal, o inverso acontece quando temos $\phi_m < \phi_s$.

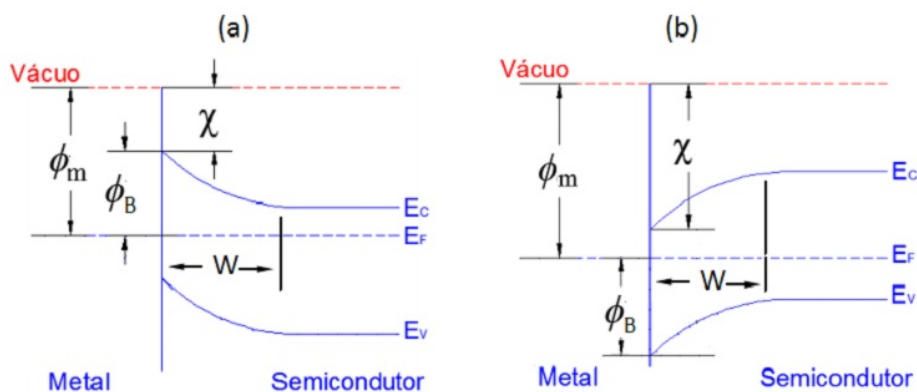


Figura 3.2 - Diagrama de bandas de energia após o contato entre um metal e um semicondutor do tipo: (a) tipo n; (b) tipo p.

Na Figura 3.2 mostra o diagrama de bandas de energia para o caso em que a função trabalho do metal seja maior que a do semicondutor do tipo-n, podemos observar que a distorção das bandas de energia são para cima, em direção ao metal, com função trabalho ϕ_m e afinidade eletrônica χ , a altura da barreira ϕ_B é dada por $\phi_B = (\phi_m - \chi)$. Comparando as Figuras 3.1 e 3.2 – a, podemos observar as posições relativas de E_{FM} e E_{FS} , nota-se então que a diferença entre o máximo da barreira e o mínimo da banda de condução é $(\phi_m - \phi_s)$. Essa diferença caracteriza o potencial de contato, ou potencial interno, entre o metal e o semicondutor em equilíbrio, $V_{bi} = (\phi_m - \phi_s)$, que é responsável pelo controle do fluxo de elétrons do semicondutor para o metal. Na Figura 3.2 – b é apresentado o caso em que o semicondutor é do tipo p, com a diferença da curvatura das bandas de energia serem para baixo, em direção ao metal e não para cima como no do tipo n. A altura da barreira potencial pode ser controlada através da polarização externa aplicada, se a mesma for direta, o potencial diminui e se for reversa o potencial aumenta, com isso podemos observar que um contato Schottky tem um comportamento de corrente e tensão semelhante ao de uma junção p-n.

Uma diferença importante da junção metal-semicondutor para uma junção p-n é que na primeira o fluxo de corrente é dominado por portadores majoritários, e na segunda o fluxo é devido a portadores minoritários. No processo, o transporte de corrente é constituído por portadores majoritários na junção metal-semicondutor polarizada diretamente e envolve a emissão de elétrons do metal, semelhante à emissão termiônica no cátodo quente de uma válvula de vácuo.

3.1.1 Transporte de corrente na junção

Para o estudo do transporte de corrente através do contato metal-semicondutor e tomando o caso de um semicondutor tipo-n com uma tensão externa V aplicada diretamente, será abordado dois mecanismos de transporte de corrente: Emissão Termiônica

(1) e o Tunelamento Quântico (2), como mostrado na Figura 3.3. O primeiro mecanismo é responsável pelo comportamento retificador do contato com movimento de elétrons que partem do semicondutor para o metal por cima da barreira (V_{Bi}), e o segundo é o principal mecanismo de condução em contatos ôhmicos.

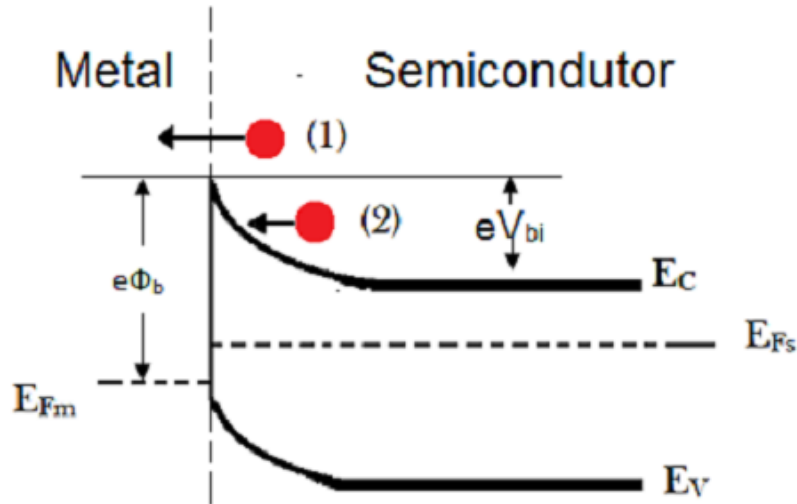


Figura 3.3 - Tipos de transporte na Barreira *Schottky*: (1) Emissão Termiônica; (2) Tunelamento Quântico.

3.1.1.1 Emissão Termiônica

O mecanismo de fluxo de corrente mais importante presente no tipo de junção metal-semicondutor é a emissão termiônica. Como já foi citado, esta corrente corresponde ao fluxo de elétrons passando do semicondutor para o metal e vice-versa. Embora a corrente devido a buracos possa ser considerada em alguns casos, o movimento de elétrons é quem predomina no fluxo da corrente total do sistema. Os dispositivos de barreira Schottky são unipolares, nos quais consideramos duas componentes de densidade de corrente de elétrons, sendo uma densidade de corrente devido ao transporte de elétrons do semicondutor para o metal, J_{sm} , e uma densidade devido ao fluxo de elétrons na direção oposta, J_{ms} .

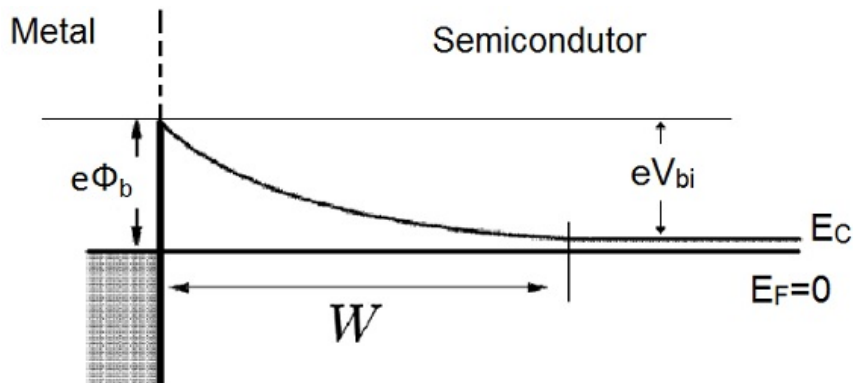


Figura 3.4 - Barreira *Schottky* no equilíbrio.

Na condição de equilíbrio, ou seja, sem tensão externa aplicada, as densidades

de corrente possuem o mesmo valor, com isso a corrente líquida do sistema é nula e o diagrama das bandas é mostrado na Figura 3.4. Para a determinação das condições de contorno a serem usadas no caso da aplicação de uma tensão externa V , considera-se que a posição do nível de Fermi do semicondutor é zero, outras condições é que a altura da barreira com polarização direta é eV_{bid} e reversa é eV_{bir} , tais precessos serão abordados a seguir.

3.1.1.1.1 Polarização direta

Se uma tensão positiva for aplicada ao metal em relação ao semicondutor, a barreira Schottky é dita polarizada diretamente e a banda de condução do semicondutor é elevada com respeito a posição de equilíbrio. Essa variação na diferença de potencial observada é representada pelo novo potencial de contato $eV_{bid} = e(V_{bi} - V)$, onde V é o potencial externo aplicado. Com o aumento do encurvamento da banda do semicondutor o número de elétrons com energia suficiente para superar a barreira do lado do semicondutor cresce à medida que a tensão V aumenta. Conseqüentemente, ocorre um aumento da densidade de corrente J_{sm} . Entretanto, como a altura $e\phi_m$ para elétrons sendo transportados do metal para o semicondutor não se altera com a tensão aplicada, e com isso a densidade de corrente J_{ms} permanece aproximadamente constante, Figura 3.5 – a.

3.1.1.1.2 Polarização reversa

Ao aplicar uma tensão negativa ao metal com respeito ao semicondutor, a junção é dita polarizada reversamente. A consequência dessa polarização reversa é que a altura da barreira de potencial aumenta, $eV_{bir} = e(V_{bi} + V)$, como mostrado na Figura 3.5 – b, com isso um número menor de elétrons possuem uma energia para superar a barreira de potencial, ou seja, uma quantidade menor de elétrons irá fluir pelo sistema, fazendo com isso, a componente J_{sm} se tornar tão pequena quanto maior for a tensão externa aplicada.

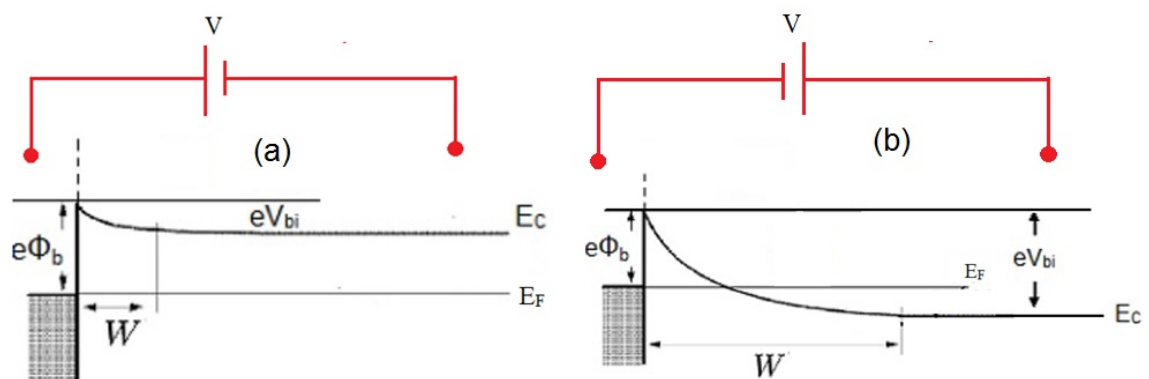


Figura 3.5 - Representação da barreira Schottky com tensão externa sob duas condições: (a) Polarização direta; (b) Polarização reversa.

3.1.1.1.3 Densidade de corrente

De acordo com desenvolvido por Bethe [25] para a emissão termiônica, a densidade de corrente que flui do semicondutor do tipo n para o metal ($J_{s \rightarrow m}$) é dada pela

concentração de elétrons que possuem energia para ultrapassar a barreira é determinada por:

$$J_{s \rightarrow m} = \int_{e(\phi_b - V)}^{\infty} ev_z dn \quad (3.1)$$

onde v_z é a velocidade dos elétrons na direção do transporte na junção, $e(\phi_b - V)$ é a energia mínima necessária para os elétrons transpor a barreira. Para a densidade de portadores (dn) é, temos que:

$$dn = g_C(E)f(E)dE \quad (3.2)$$

sendo $g_C(E)$ a densidade de estados na Banda de Condução e $f(E)$ é a distribuição de Fermi-Dirac para a probabilidade de o estado estar ocupado. A distribuição $f(E)$ é dada por:

$$f(E) = \exp\left(\frac{-(E - E_F + eV_n)}{k_B T}\right) \quad (3.3)$$

onde $eV_n = (E_C - E_F)$. Desta forma, temos que a densidade de portadores é dada por [24]:

$$dn = \frac{4\pi e (m^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{(E - E_C)} \exp\left(\frac{-(E - E_F + eV_n)}{k_B T}\right) dE \quad (3.4)$$

sendo m^* é a massa efetiva dos elétrons e h é a constante de Planck. Assumindo que toda energia dos elétrons seja cinética:

$$E - E_C = \frac{1}{2}m^*v^2 \quad (3.5)$$

tomando a derivada em relação a velocidade:

$$dE = m^*v dv \quad (3.6)$$

mas

$$\sqrt{E - E_C} = v\sqrt{\frac{m^*}{2}} \quad (3.7)$$

Substituindo esses resultados da equação 3.7 em 3.7:

$$dn = 2 \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 \exp \left(\frac{eV_n}{K_B T} \right) \exp \left(\frac{-m^* v^2}{k_B T} \right) (4\pi v^2 dv) \quad (3.8)$$

Essa equação fornece o número de elétrons por unidade de volume que tem velocidade entre v e $v + dv$ distribuídas em todas as direções. Separando a velocidade em suas componentes temos:

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 \quad (3.9)$$

Com a relação $4\pi v^2 dv = dv_x dv_y dv_z$, e as equações (9) e (10), obtemos:

$$\begin{aligned} J_{s \rightarrow m} &= 2 \left(\frac{m^*}{h} \right)^3 \exp \left(\frac{-eV_n}{k_B T} \right) \int_{v_{0z}}^{\infty} v_z \exp \left(\frac{-m^* v_z^2}{2k_B T} \right) dv_z \\ &\int_{-\infty}^{\infty} v_x \exp \left(\frac{-m^* v_x^2}{2k_B T} \right) dv_x \int_{-\infty}^{\infty} v_y \exp \left(\frac{-m^* v_y^2}{2k_B T} \right) dv_y \end{aligned} \quad (3.10)$$

Assim

$$J_{s \rightarrow m} = \left(\frac{4\pi e m^* K_B^2}{h^3} \right) T^2 \exp \left(\frac{-eV_n}{K_B T} \right) \exp \left(\frac{-m^* v_{0z}^2}{2k_B T} \right) \quad (3.11)$$

A velocidade mínima necessária para transpor a barreira é v_{0z} e é dada por:

$$\frac{1}{2} m^* v_{0z}^2 = e(V_{bi} - V) \quad (3.12)$$

Em que V_{bi} é o potencial de contato (barreira efetiva) para tensão igual a zero e V a tensão aplicada em polarização direta. Assim

$$J_{s \rightarrow m}(V) = \left(\frac{4\pi e m^* k_B^2}{h^3} \right) T^2 \exp \left(-\frac{e(V_{bi} - V)}{k_B T} \right) \exp \left(-\frac{eV_n}{k_B T} \right) \quad (3.13)$$

Considerando a diferença $eV_n = (E_C - E_F)$, verificamos que a altura da barreira é $e\phi_b = e(V_{bi} + V_n)$, portanto temos a função de densidade de corrente escrita em termos da altura da barreira e da voltagem aplicada como sendo:

$$J_{s \rightarrow m}(V) = A^* T^2 \exp \left(-\frac{e\phi_b}{k_B T} \right) \exp \left(\frac{eV}{k_B T} \right) \quad (3.14)$$

onde $A^* = \frac{4\pi e m^* k_B^2}{h^3}$ é a constante A de Richardson para emissão termiônica.

Uma vez que a altura da barreira independe da tensão para elétrons se movendo do metal para o semicondutor, o fluxo de elétrons para dentro do semicondutor não é afetado pela aplicação de tensão. Logo, a densidade de corrente que flui do metal para o semicondutor $J_{s \rightarrow m}$ deve ser igual $-J_{s \rightarrow m}$ quando $V = 0$, ou seja:

$$J_{m \rightarrow s}(0) = -A^*T^2 \exp\left(-\frac{e\phi_b}{k_B T}\right) \quad (3.15)$$

Assim, a densidade de corrente líquida por unidade de área $J = J_{s \rightarrow m}(V) - J_{m \rightarrow s}(0)$ é dada pela soma dessas duas corrente:

$$J = A^*T^2 \exp\left(-\frac{e\phi_b}{k_B T}\right) \left[\exp\left(\frac{eV}{k_B T}\right) - 1 \right] \quad (3.16)$$

Através da equação 3.16, podemos ratificar a nossa discussão qualitativa. Observa-se que sob condições de polarização direta a corrente de emissão termiônica de elétrons aumenta exponencialmente, e sob condições de polarização reversa o termo exponencial tende a zero, de maneira que o termo constante passa a representar o fluxo total de corrente. Consequentemente, a característica corrente-tensão é assimétrica, apresentando as propriedades de retificação discutida anteriormente. Podemos reescrever a equação 3.16 da seguinte forma:

$$J = J_0 \left(e^{\frac{eV}{k_B T}} - 1 \right), \quad (3.17)$$

onde $J_0 = A^*T^2 e^{-\frac{e\phi_b}{k_B T}}$ é a corrente de saturação por unidade de área. Podemos também analisar a largura da Barreira Schottky dependendo da tensão aplicada. Para o caso de uma polarização direta (tensão negativa no semicondutor tipo-n), a largura W da região de depleção juntamente com a altura de barreira $e\phi_b$ de potencial para elétrons vindo do semicondutor para o metal diminui e a corrente J acentua-se (chegando a um ponto que seu comportamento é linear). Sob polarização reversa, a largura da região de depleção e a corrente tende ao seu limite inferior J_0 . O comportamento do transporte do dispositivo pode ser observado na curva i - V da Figura 3.7 curva A.

3.1.1.2 Tunelamento quântico

Devemos considerar que, sob certas circunstâncias, é possível que elétrons com energia menores que a altura da barreira V_{bi} , sejam capazes de penetrar na Barreira Schottky, contribuindo também para o fluxo de corrente líquida observada no material. Isto em geral ocorre quando a densidade de doadores (ou aceitadores) no semicondutor torna-se muito grande, resultando numa curvatura de banda mais acentuada, produzindo uma barreira muito fina a qual permite que elétrons passem através dela. De acordo com a equação de Schrodinger, os elétrons podem atravessar a barreira de potencial através do Tunelamento Quântico. O tunelamento para o sistema de Barreira Schottky pode ser de dois tipos: Emissão de Campo, Emissão de Campo Termiônico, podendo ser observadas respectivamente na Figura 3.6.

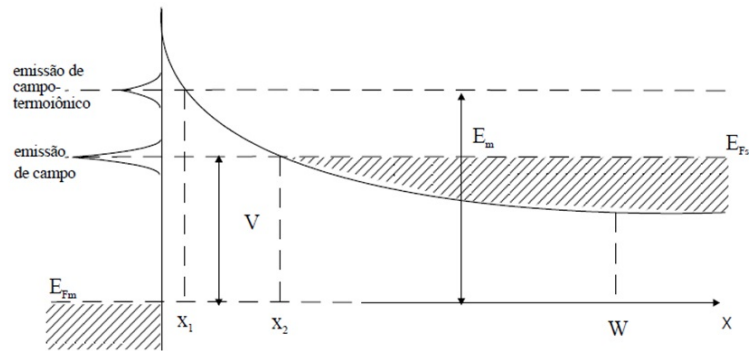


Figura 3.6 - Diagrama da banda de uma barreira *Schottky* mostrando os dois processos referente ao tunelamento quântico. W é a largura da região de depleção no equilíbrio, E_m é uma energia menor que a altura da barreira $e\phi_b$, x_1 é a largura da barreira para Emissão de Campo-Termiônico x_2 é a largura da barreira para Emissão de Campo .

3.1.1.2.1 Emissão de Campo (*Field Emission - FE*)

Esse tipo de tunelamento ocorre quando a densidade de dopantes no semicondutor é alta $10^{18}cm^{-3} - 10^{19}cm^{-3}$, devido a essa alta concentração de dopagem a largura da barreira Schottky diminua de W para x_2 , com isso a corrente sob polarização direta não seja mais predominantemente pelo processo de emissão termiônica, mas sim pelo tunelamento de elétrons com energias muito próximas à energia de Fermi do Semicondutor. Podemos observar na Figura 3.7 curva *B* o comportamento menos retificador para esse tipo de transporte de corrente.

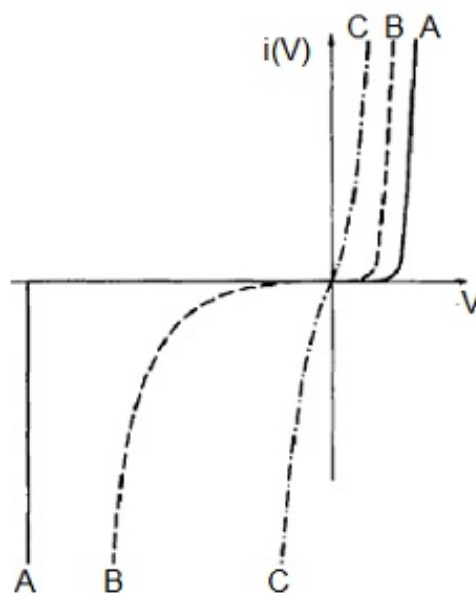


Figura 3.7 - Comportamento i - V de acordo com o tipo de transporte de corrente: A- Emissão Termiônica; B- Emissão de Campo; C- Emissão de Campo-Termiônico.

3.1.1.2.2 Emissão Termiônica de Campo (*Thermionic Field Emission - TFE*)

Tomando o caso para um semicondutor com concentração de dopagem ($N \geq 10^{19} \text{ cm}^{-3}$), elétrons poderão ser excitados para níveis de energias maiores, se E_m é um nível de energia menor que o topo da barreira, com uma largura da efetiva x_1 , mostrado na Figura 3.6. Como a largura é bem mais estreita que no processo de emissão de campo. Nesta situação a probabilidade de tunelamento aumenta rapidamente e o elétron ganha energia térmica para um nível de energia maior (Termiônica) ocasionando o aumento da probabilidade de tunelamento. Nesse tipo de processo é onde podemos observar o melhor comportamento do contato ôhmico, explicitado na Figura 3.7, curva *C*.

3.2 A Física na interface Metal-Semicondutor: Contato Ôhmico.

No estudo da resistência de contato em uma junção metal-semicondutor, utiliza-se o parâmetro da resistividade de contato ρ_c , cuja definição para um contato de área A , através do qual flui uma determinada corrente é dado por:

$$\rho_c = R_c A \quad (\Omega \cdot \text{cm}^2) \quad (3.18)$$

onde R_C é a resistência de contato.

A maneira mais usual de se obter um contato ôhmico é depositar metais sobre um semicondutor dopado e através de um tratamento térmico adequado fazer com que ocorra a difusão de alguns componentes do metal para o semicondutor criando, assim, uma região altamente dopada. Muitos metais podem ser utilizados para compor a junção metal-semicondutor de forma a se obter uma altura e largura de barreira adequadas à formação do contato ôhmico.

3.2.1 Resistência de contato

Tomando o caso de dois contatos metálicos depositados em um semicondutor como ilustrado na Figura 3.8, as resistências que atuam nessa configuração são as resistências de contatos R_c entre o metal e o semicondutor, a resistência dos metais depositados R_m e também a resistência do semicondutor R_s .

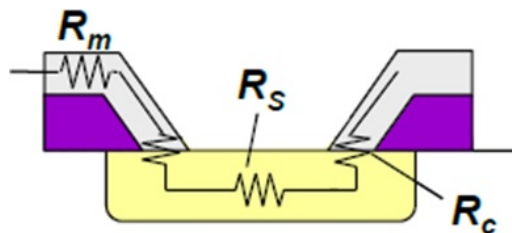


Figura 3.8 - Resistências que atuam na junção metal-semicondutor.

Como as resistências que atuam no dispositivo estão em série, a resistência total R_T é dada pela soma das resistências, ou seja

$$R_T = 2R_m + 2R_c + R_s \quad (3.19)$$

Como $R_c \gg R_m$, então desprezamos o primeiro termo, e a resistência total é simplesmente:

$$R_T = 2R_c + R_s \quad (3.20)$$

Existem vários métodos para determinar essas resistências, primeiramente vamos abordar o método que utiliza duas pontas de contato:

3.2.2 Medidas de Resistência do contato usando o modelo de linha de transmissão (*Transmission Line Model - TLM*)

Para a medida de resistência de contato usando dois contatos metálicos, tratamos o caso em que o transporte de corrente é feito horizontalmente pelo semicondutor, tomando como exemplo a Figura 3.9 – a, que consiste em dois contatos metálicos com largura l e comprimento “ w ”, separados por uma distância d (Figura 3.9 – b), depositados sobre um semicondutor do tipo-N.

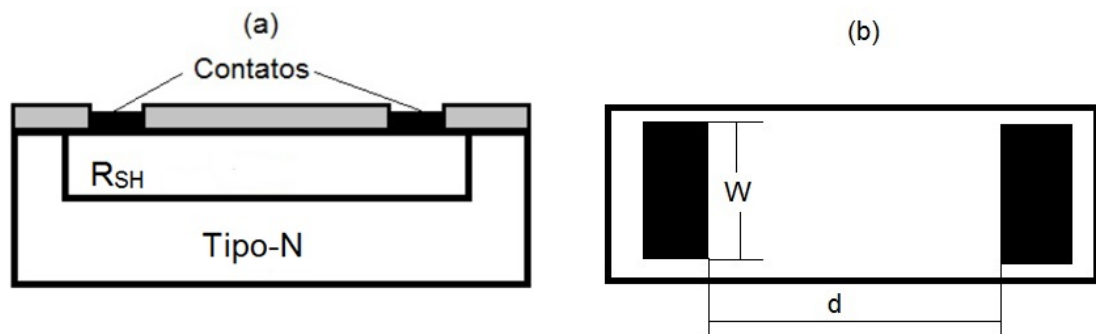


Figura 3.9 - (a) Vista frontal dos contatos; (b) Dimensões da vista superior do contatos metálicos sobre o semicondutor.

Quando é formada a junção, ocorre a difusão de metal sobre a superfície do semicondutor, com isso, é gerada uma região altamente dopada na interface. Desta forma, o transporte de corrente será feito através dessa região, assim, a resistência do semicondutor que era antes R_s , passará a ser a resistência dessa região entre os contatos, ou seja, a resistência total é

$$R_T = 2R_c + \frac{R_{sh}}{w}d \quad (3.21)$$

onde R_{sh} é chamada de “resistência de folha” mostrada na Figura 3.9 – a.

A técnica TLM consiste em construir uma série de contatos paralelos (veja Figura 3.10 – a), de forma que a distância entre o contato seguinte seja, por exemplo, múltipla do contato anterior, um exemplo de como os contatos podem ser dispostos é apresentado na Figura 3.10 – a. Posteriormente aplicamos uma tensão externa em cada par de

contatos, com isso é possível obter o gráfico da tensão versus corrente de cada par, consequentemente, determinar a resistência entre eles e, com esses valores gerar um gráfico da resistência total R_t dos contatos em função da distância d entre eles (veja Figura 3.10 – b). Usando a regressão linear é possível obter os valores da resistência de contato R_C e da resistência de folha R_{SH} da equação 3.21.

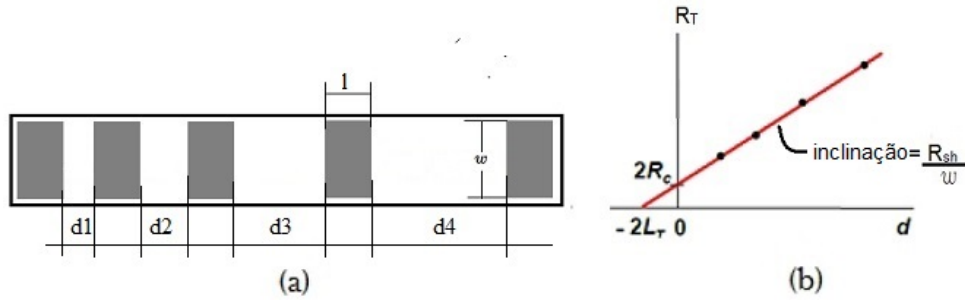


Figura 3.10 - (a) Esquema da mesa para medida TLM, (b) Gráfico da resistência em função das distâncias.

No método de Linha de Transmissão é necessário determinar o comprimento de transferência L_T , que por definição é a medida em que um elétron viaja num semicondutor sob um contato metálico antes de fluir para o outro contato, esse comprimento é dado por

$$L_T = \sqrt{\frac{\rho_c}{R_{sh}}} \quad (3.22)$$

A área efetiva do contato A_{eff} pode se expressa por:

$$A_{eff} = w \cdot L_T \quad (3.23)$$

Agora a resistividade passa a depender da área efetiva do contato, logo a equação 3.18 será expressa por

$$\rho_c = R_c \cdot A_{eff} \quad (3.24)$$

Substituindo a área efetiva na equação 3.24, a resistividade do contato ficará:

$$\rho_c = R_c \cdot L_T \cdot w \quad (3.25)$$

Manipulando a equação 3.22, obtemos

$$\rho_c = R_{sh} \cdot L_T^2 \quad (3.26)$$

Igualando as equações 3.25 e 3.26, obtemos

$$R_c = \frac{R_{sh}L_T}{w} \quad (3.27)$$

e lembrando que

$$R_T = 2R_c + \frac{R_{sh}}{w}d \quad (3.28)$$

e fazendo a substituição, ficaremos

$$R_T = \frac{2R_{sh}L_T}{w} + \frac{R_{sh}}{w}d = \frac{R_{sh}}{w}(2L_T + d) \quad (3.29)$$

Após a realização dos contatos metálicos e determinado o tipo de contato, faz-se necessário a compreensão de como ocorre o transporte eletrônico através do dispositivo estudado. Na parte seguinte do trabalho será abordado um tratamento teórico sobre heteroestrutura do tipo de dupla barreira de potencial, assim como o estudo do comportamento da corrente.

Transporte Através de um Diodo de Tunelamento Ressonante

Nesse capítulo é apresentado inicialmente um estudo sobre o transporte eletrônico de uma heteroestrutura semicondutora contendo um poço quântico, onde tal dispositivo apresenta o tunelamento ressonante e a resistência diferencial negativa. Posteriormente é apresentado um modelo teórico sobre o cálculo da densidade de corrente de tunelamento, mostrando que para o cálculo dessa corrente é necessário obter o coeficiente de transmissão do sistema. Para a obtenção do coeficiente de transmissão foi usado o Método de Matriz de Transferência (MMT), para isso primeiramente foi resolvido de forma analítica as funções de onda, levando em consideração a tensão externa na equação de Schrodinger independente do tempo.

4.1 Tunelamento ressonante e a Resistência Diferencial Negativa

Com toda teoria abordada até agora podemos concluir que o transporte em um DTR é governado pelo fenômeno de tunelamento ressonante do emissor para o interior do poço através da primeira barreira de potencial. A Figura 4.1 mostra o que acontece com a banda de condução desse dispositivo e seu impacto na curva $i - V$ do dispositivo. Dessa forma, para uma determinada energia da partícula incidente E na primeira barreira, o transporte dos portadores através da heteroestrutura é descrito pela probabilidade de transmissão $t^*(E)t(E)$ das funções de onda calculadas a partir da equação de Schrodinger.

Para explicar o comportamento da dependência da densidade de corrente em função da tensão em um DTR vamos tomar o caso de um dispositivo contendo apenas duas barreiras de potencial, e entre elas um poço quântico estreito com apenas um estado ligado acessível e seus portadores de cargas sejam elétrons. Para entender como ocorrem as mudanças do potencial nessa região, a Figura 4.1 mostra o comportamento da banda de condução para quatro voltagens diferentes aplicadas no dispositivo, neste caso foram desprezadas as camadas espaçadoras e, com isso, a camada de acumulação não é formada, portanto o transporte de portadores no sistema irá acontecer via tunelamento $3D - 2D$. Quando aplicado uma diferença de potencial V entre os terminais do dispositivo, devido ao Efeito *Stark* esse estado quase ligado começa a ter o seu valor absoluto abaixado. A Figura 4.1 – *a* mostra que o nível de energia dentro do poço está acima do nível de energia da partícula incidente, enquanto a tensão aplicada não for alta o suficiente para que o nível de energia dentro do poço coincida com o valor do nível de Fermi do contato emissor a densidade de corrente é aproximadamente zero, como mostrado no gráfico $i - V$ da Figura 4.1 – *e*. À medida que essa tensão vai aumentando, a energia dentro do poço diminui em

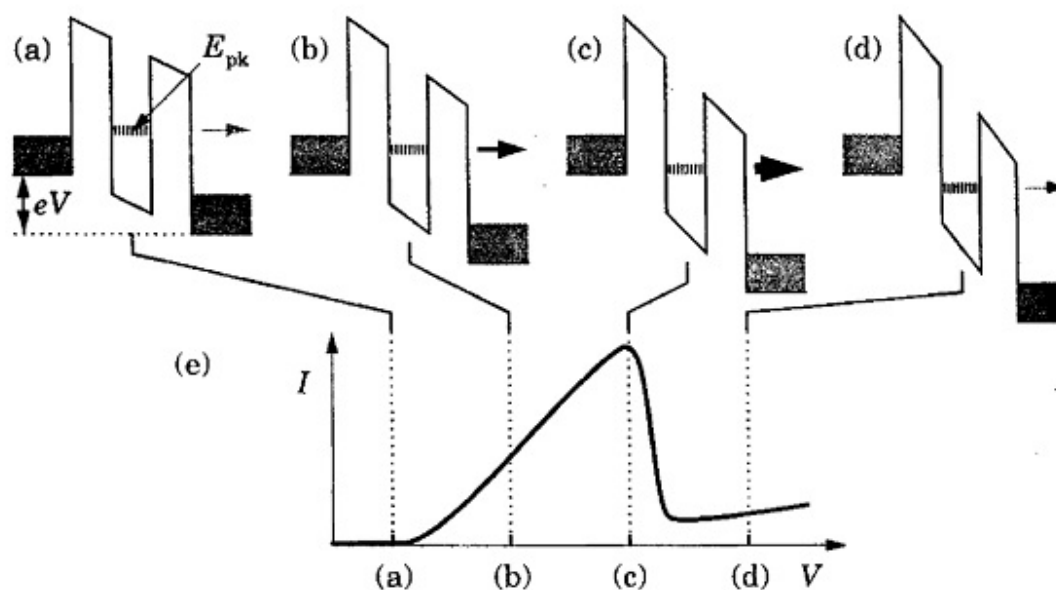


Figura 4.1 - Processo do tunelamento ressonante em um DRT Ref. [43].

relação à energia do elétron incidente, como pode-se observar na Figura 4.1 – b. Quando o nível de energia dentro do poço coincide com o nível de Fermi do coletor, ou seja, os dois níveis entram em ressonância, elétrons do emissor começam a tunelar através da estrutura e o elétron deixa de “enxergar” a barreira de potencial. À medida que a tensão externa for aumentando, mais a banda de condução vai distorcendo (Figura 4.1 – c) e cada vez mais elétrons atravessam o dispositivo e, conseqüentemente, a corrente no sistema aumenta, conforme mostrado na Figura 4.1 – e. A corrente vai aumentando até o instante em que o estado quase ligado dentro do poço coincide com o fundo da banda de condução do emissor, figura 4.1 – c. A partir desse ponto não ocorre mais a ressonância entre os dois níveis, com isso a probabilidade de tunelamento diminui drasticamente, fazendo com que a densidade de corrente seja basicamente zero (Figura 4.1 – d). Na última condição do processo descrito, como pode-se observar ocorre uma região de Resistência Diferencial Negativa - NDR (*Negative Differential Resistance*). A NDR que faz com que esse dispositivo seja tão útil em aplicações tecnológicas. Essa variação abrupta de corrente faz com que os dispositivos sejam ótimos para chaveamento, funcionando na faixa de GHz. Continuando a aumentar a voltagem externa surge uma nova zona de resistência diferencial positiva, se houver outros estados ressonantes o processo descrito volta a se repetir. Se não existir outros estados teremos somente um pico assimétrico, isso ocorre devido ao fato dos elétrons começarem a passar por cima da segunda barreira ou até mesmo através de níveis de ressonâncias superiores. Com isso as barreiras de potencial tornam-se cada vez mais transparentes aos elétrons. Assim, cada pico da curva i-V do dispositivo deve-se ao tunelamento através de um estado quase-ligado dentro do poço.

4.2 Densidade de Corrente de Tunelamento

Como vai ser mostrando a seguir, a corrente de tunelamento que flui através de um diodo de tunelamento ressonante depende basicamente da probabilidade de transmissão

pela heteroestrutura. É possível encontrar vários trabalhos relacionados ao cálculo da corrente a partir do coeficiente de transmissão [12-14]. Dada a importância, esta parte do trabalho é voltado ao estudo do transporte eletrônico em dispositivos semicondutores contendo um ou mais poços quânticos, foi calculado inicialmente a densidade de corrente de tunelamento total J_t para um dispositivo contendo um poço quântico interposto por duas barreiras de potencial usando o modelo proposto originalmente em 1973 por Tsu e Esaki [1], a fim de construir um modelo para a compreensão do comportamento da característica $i - V$ de tais dispositivos.

No modelo proposto por Tsu e Esaki, as regiões altamente dopadas são consideradas reservatórios de elétrons distribuídos em energia de acordo com a estatística de Fermi-Dirac e admite-se a formação de camadas de acumulação, sendo assim, o tunelamento é da forma 2D-2D. A corrente do emissor para o coletor é dada pela soma de todos os estados ocupados na camada de acumulação multiplicada pela probabilidade de transmissão $T(E)$ através da heteroestrutura, uma representação esquemática desse sistema é mostrada na Figura 4.2. Desta forma, a probabilidade dos elétrons com energia E ocuparem determinados estados na banda de condução em ambos os eletrodos, segundo a distribuição de Fermi-Dirac:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (4.1)$$

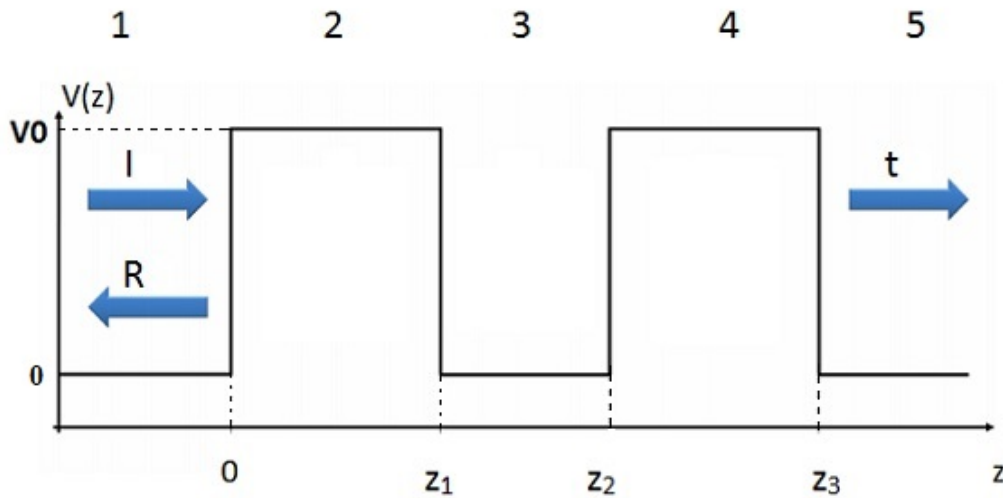


Figura 4.2 - Perfil do potencial de uma heteroestrutura contendo um poço quântico sem a aplicação de tensão externa.

A probabilidade de tunelamento da região 1 para a região 5 (P_{1-5}) é obtida pela multiplicação da probabilidade de encontrarmos um estado inicial ocupado do lado 1 $f_1(E)$ pela probabilidade de encontrarmos um estado final à direita desocupado (Região 5), acrescido da tensão externa aplicada $[1 - f_5(E + eV)]$ e também pela probabilidade da partícula incidente tunelar a barreira de potencial $t^*(E)t(E)$:

$$P_{1-5} = f_1(E) [1 - f_5(E + eV)] [t^*(E)t(E)] \quad (4.2)$$

Assim, a densidade de corrente total J da heteroestrutura mostrada na Figura 4.2, pode ser obtida através da diferença entre densidades de corrente dos elétrons vindo da região 1 para a região 5, J_{1-5} , e o fluxo dos elétrons vindo da região 5 para a região 1, J_{5-1} , no equilíbrio térmico temos que:

$$J = J_{1-5} - J_{5-1} \quad (4.3)$$

Com isso a densidade de corrente de transporte da região 1 para a região 5, J_{1-5} , será dada pela multiplicação da corrente dos elétrons como uma velocidade v_z incidente pelo número de vetores de onda $\rho(\mathbf{k})d\mathbf{k} = V/(2\pi)^3 d\mathbf{k}$ e, também por P_{1-5} , todos integrados nos \mathbf{k} possíveis.

$$\mathbf{J}_{1-5} = \frac{2e}{8\pi^3} \int d\vec{k} v_z P_{1-5} [t^*(E)t(E)] \quad (4.4)$$

onde o fator 2 é devido ao spin do elétron.

Assim como J_{1-5} , a densidade de corrente devido ao fluxo de elétrons da região 5 para a região 1, J_{5-1} , é definida como:

$$\mathbf{J}_{5-1} = -\frac{2e}{8\pi^3} \int d\vec{k} v_z P_{5-1} [t^*(E)t(E)] \quad (4.5)$$

com

$$P_{5-1} = f_5(E + eV) [1 - f_1(E)] [t^*(E)t(E)] \quad (4.6)$$

A densidade de corrente de tunelamento é obtida das expressões 4.2, 4.4, 4.5, 4.6 substituindo na equação 4.3, portanto,

$$\mathbf{J} = -\frac{2e}{8\pi^3} \int d\vec{k}_{\parallel} dk_z v_z \{f_5(E + eV) [1 - f_1(E)] - f_1(E) [1 - f_5(E + eV)]\} [t^*(E)t(E)] \quad (4.7)$$

simplificando essa equação, obtemos

$$\mathbf{J} = -\frac{2e}{8\pi^3} \int d\vec{k}_{\parallel} dk_z v_z [f_5(E + eV) - f_1(E)] [t^*(E)t(E)] \quad (4.8)$$

usando a relação $v_z = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_z}{dk_z}$ na equação acima, chegamos a seguinte expressão para a densidade de corrente

$$\mathbf{J} = \frac{2e}{8\pi^3} \int d\vec{k}_{\parallel} dE_z [f_1(E) - f_5(E + eV)] [t^*(E)t(E)] \quad (4.9)$$

Lembrando que a direção de confinamento é na direção z , logo o coeficiente de transmissão é uma função somente da energia E_z . A energia que aparece na equação da densidade de corrente é a total do elétron incidente, ou seja

$$E = E_z + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \quad (4.10)$$

Assim, substituindo as distribuições de Fermi-Dirac, o coeficiente de transmissão como uma função de E_z , resolvendo a integral na direção k_{\parallel} , que se encontram no apêndice A, obtemos para uma determinada temperatura T a expressão para a densidade de corrente de tunelamento total J , obtida por Esaki e Tsu [1]:

$$J = \frac{m^* e}{2\pi^2 \hbar^3} K_B T \int_0^{\infty} [T(E_z)^* T(E_z)] \ln \left[\frac{1 + \exp\left(\frac{(E_F - E_z)}{K_B T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{(E_F - E_z - eV)}{K_B T}\right)} \right] dE_z \quad (4.11)$$

Tendo em vista que a densidade de corrente de tunelamento depende basicamente da probabilidade de transmissão do sistema, faz necessário o cálculo do mesmo. Desta fora, o tópico seguinte mostra o procedimento para a obtenção do cálculo do coeficiente de transmissão de forma analítica para uma heteroestrutura semicondutora com uma tensão externa V aplicada.

4.3 Cálculo do Coeficiente de Transmissão

Antes de adentrarmos no cálculo exato da probabilidade de transmissão de uma partícula incidente com energia E para um dispositivo composto de duas barreiras com um poço quântico entre elas, convém efetuar o cálculo exato das soluções das funções de onda em cada região do dispositivo com a presença de um campo elétrico externo. Devido ao efeito perturbativo do campo elétrico, as barreiras e poço de potencial deixaram de ter um perfil retangular e irão sofrer uma deformação. Com isso, no Hamiltoniano da equação de Schrodinger deverá conter essa tensão externa, cujas soluções dependerão das funções especiais de Airy. Tal resultado difere dos outros resultados para transmissão em uma barreira retangular que são bastantes conhecido na literatura [20]. Posteriormente será mostrado o Método de Matriz de Transferência, onde o mesmo calcula o coeficiente de transmissão do dispositivo.

4.3.1 Probabilidade de Transmissão para duas Barreiras de Potencial com Tensão Externa V .

Nesta seção é abordado o caso de uma heteroestrutura semicondutora do tipo de diodo de tunelamento ressonante com a presença de uma tensão externa. Devido a

voltagem aplicada no dispositivo o perfil do potencial, que antes era da forma retangular, sofre uma deformação (Efeito *Stark*). Tratando o caso como uma perturbação de primeira ordem, pois a tensão externa é ordem de alguns Volts. Neste caso, a deformação desse potencial tem uma dependência linear com a tensão externa, como mostrado na Figura 4.3. Devido a essa perturbação do potencial elétrico a equação de Schrodinger é modificada, pois é incluído no Hamiltoniano o termo da tensão externa.

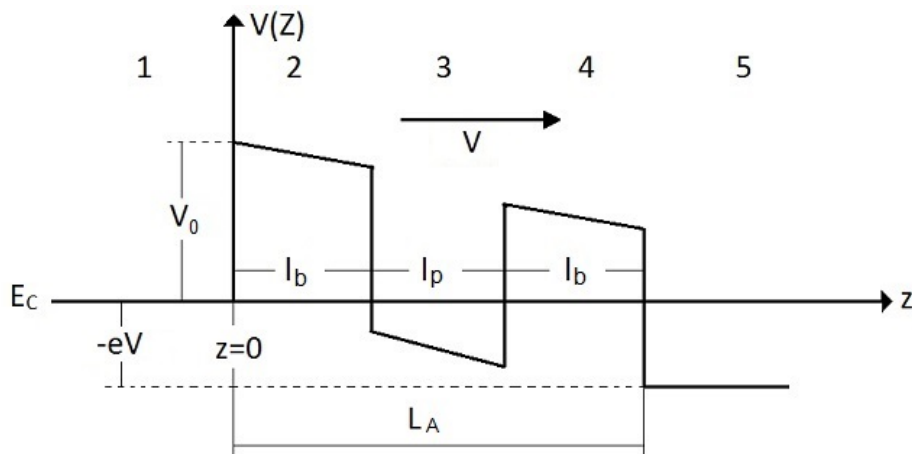


Figura 4.3 - Forma da banda de condução de um sistema dupla barreira de potencial submetida a um campo elétrico externo.

Para o cálculo da transmissão em um sistema com duas barreiras trapezoidais e poço triangular, dividiremos a heteroestrutura em cinco regiões. Nas regiões 1 e 5, teremos o caso de uma partícula livre e nas demais regiões as soluções devem levar em consideração o termo da tensão no Hamiltoniano.

Para um sistema unidimensional mostrado na Figura 4.3, vamos considerar que a direção da tensão externa aplicada V seja da esquerda para a direita, conseqüentemente a direção do campo elétrico é da direita para a esquerda, foi adotado que V_0 é a altura das barreiras com larguras l_b , a largura do poço quântico é dado por l_p . Como nesses tipos de dispositivos devem levar em consideração as anisotropias dos cristais, então o modelo para o cálculo da transmissividade foi desenvolvido usando as massas efetivas das partículas e não a massa de repouso do elétron m_0 , onde as massas efetivas dos elétrons nas barreiras (m_b^*) e no poço (m_p^*) são dadas, respectivamente por:

$$m_b^* = \alpha_b * m_0 \quad (4.12)$$

e

$$m_p^* = \alpha_p * m_0 \quad (4.13)$$

onde α_b e α_p são constantes e dependem do material usado nas barreiras e no poço quântico, respectivamente e m_0 é a massa de repouso do elétron.

Tomando a equação de Schrodinger independente do tempo para o caso unidimensional, com a partícula confinada na direção z , temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (4.14)$$

Na região 1, a partícula não está sob ação de nenhum potencial, ou seja, ela está livre no cristal. Pois o potencial é nulo $V(z) = 0$ nesta região. Em nosso modelo, adotaremos que o material usado nesta região seja o mesmo do poço quântico assim como na região 5, como isso a massa efetiva é a mesma do poço $m^* = m_p^*$, logo a equação de Shrodinger fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_p^*} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} = E\psi(z) \quad (4.15)$$

ou

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + \frac{2m_p^*E}{\hbar^2}\psi(z) = 0 \quad (4.16)$$

As soluções são da forma de ondas planas, assim a função de onda na região 1 é dada por:

$$\psi_1(z) = Ae^{ik_1z} + Be^{-ik_1z} \quad (4.17)$$

sendo

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_p^*E}{\hbar^2}} \quad (4.18)$$

o vetor de onda na região 1 e, A e B são os coeficientes da função de onda incidente e refletida, respectivamente.

Na região 2, o potencial da barreira devido à presença de uma tensão externa aplicada é descrito como:

$$V(z) = V_0 + bz \quad (4.19)$$

pela geometria b é o coeficiente angular da reta, por isso ele tem sinal negativo, sendo dado por:

$$b = -\frac{eV}{L_A} \quad (4.20)$$

Sendo e a carga do elétron, V a tensão externa aplicada e L_A a largura da amostra. Substituindo $V(z)$ na equação de Schrodinger independente do tempo, têm-se:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_b^*} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + (V_0 - bz)\psi(z) = E\psi(z) \quad (4.21)$$

ou

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - \frac{2m_b^*}{\hbar^2} [(V_0 - bz) - E]\psi(z) = 0 \quad (4.22)$$

Manipulando a equação acima, obtemos:

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - \frac{2m_b^*b}{\hbar^2} \left[z + \left(\frac{V_0 - E}{b} \right) \right] \psi(z) = 0 \quad (4.23)$$

Podemos ainda reescrever a equação (4.23) na forma

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - \left(\frac{2m_b^*b}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{2m_b^*b}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left[z + \left(\frac{V_0 - E}{b} \right) \right] \psi(z) = 0 \quad (4.24)$$

Fazendo a seguinte mudança de variável

$$\xi_2(z) = \left(\frac{2m_b^*b}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left[z + \left(\frac{V_0 - E}{b} \right) \right] \quad (4.25)$$

A equação (4.24) ficará reescrita por

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} - \left(\frac{2m_b^*b}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \xi_2(z)\psi(z) = 0 \quad (4.26)$$

Escrevendo a derivada em relação a nova variável $\xi_2(z)$.

$$\frac{d}{dz} \rightarrow \frac{d\xi_2}{dz} \frac{d}{d\xi_2} \quad (4.27)$$

Obtemos

$$\frac{d}{dz} \rightarrow \frac{d}{dz} \left(\left(\frac{2m_b^*b}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left[z + \left(\frac{V_0 - E}{b} \right) \right] \right) \frac{d}{d\xi_2} \quad (4.28)$$

ou

$$\frac{d}{dz} \rightarrow \left(\frac{2m_b^* b}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{d}{d\xi_2} \quad (4.29)$$

e a segunda derivada temos

$$\frac{d^2}{dz^2} \rightarrow \left(\frac{d\xi_2}{dz} \right) \frac{d^2}{d\xi_2^2} \quad (4.30)$$

logo

$$\frac{d^2}{dz^2} \rightarrow \left(\frac{2m_b^* b}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{d^2}{d\xi_2^2} \quad (4.31)$$

Substituindo a derivada segunda, a equação (4.24)

$$\left(\frac{2m_b^* b}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{d^2 \psi(z)}{d\xi_2^2} - \left(\frac{2m_b^* b}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \xi(z) \psi(z) = 0 \quad (4.32)$$

ou

$$\frac{d^2 \psi(z)}{d\xi_2^2} - \xi(z) \psi(z) = 0 \quad (4.33)$$

A expressão acima é a equação de Airy, cuja a solução é a combinação das funções de Airy (Ai e Bi). Assim, a solução da função de onda na barreira com presença de um potencial externo é dado por:

$$\psi_2(z) = CAi[\xi_2(z)] + DBi[\xi_2(z)] \quad (4.34)$$

Podemos redefinir a variável ξ de uma outra forma mais simplificada, ou seja

$$\xi_2(z) = \left(\frac{2m_b^* b}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\hbar^2}{2m_b^* b} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\hbar^2}{2m_b^* b} \right)^{-\frac{1}{3}} \left[z + \left(\frac{V_0 - E}{b} \right) \right] \quad (4.35)$$

$$\xi_2(z) = \left(\frac{\hbar^2}{2m_b^* b} \right)^{-\frac{1}{3}} \left[z + \left(\frac{V_0 - E}{b} \right) \right] \quad (4.36)$$

Desta maneira a variável $\xi_2(z)$ é redefinida na forma:

$$\xi_2(z) = \frac{z}{\lambda_2} + \beta_2 \quad (4.37)$$

sendo

$$\lambda_2 = \left(\frac{\hbar^2}{2m_b^* b} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (4.38)$$

e

$$\beta_2 = \frac{V_0 - E}{\lambda_2 b} \quad (4.39)$$

Na região 3, o poço quântico também sofre influência do potencial externo, mas nessa o potencial é dado por:

$$V(z) = -\frac{eV}{l} z \quad (4.40)$$

A massa efetiva nessa região é a do poço quântico $m^* = m_p^*$, substituindo a massa efetiva e o potencial acima na equação de Schrodinger independente do tempo, obtemos:

$$\frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} - \frac{2m_p^* b}{\hbar^2} \left[z + \left(\frac{-E}{b} \right) \right] \psi(z) = 0 \quad (4.41)$$

De forma similar à região 2 e com algumas manipulações matemáticas, também obtém-se que a solução para a função de onda nessa região também é dada pela equação de Airy. Assim:

$$\psi_3(z) = F Ai [\xi_3(z)] + G Bi [\xi_3(z)] \quad (4.42)$$

sendo

$$\xi_3(z) = \frac{z}{\lambda_3} + \beta_3 \quad (4.43)$$

$$\lambda_3 = \left(\frac{\hbar^2}{2m_p^* b} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (4.44)$$

e

$$\beta_3 = -\frac{E}{\lambda_3 b} \quad (4.45)$$

Seguindo a mesma metodologia é possível encontrar as funções de onda em cada região. Entretanto, na região 5 o potencial sofre um deslocamento, conforme mostrado na

Figura 4.2, e a altura desse potencial é diretamente proporcional a tensão externa aplicada e esse deslocamento é incluso no vetor de onda dessa região. Observa-se que a banda de condução não possui inclinação, logo o coeficiente angular é nulo, portanto, o potencial nessa região é dado por

$$V(z) = -eV \quad (4.46)$$

Substituindo na equação de Schrodinger, chega-se a seguinte equação diferencial

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + \frac{2m_p^*(eV + E)}{\hbar^2}\psi(z) = 0 \quad (4.47)$$

com isso o vetor de onda nessa região é dado por

$$k_5 = \sqrt{\frac{2m_p^*(eV + E)}{\hbar^2}} \quad (4.48)$$

onde a solução é encontrada da mesma forma da região 1. Sendo assim, as funções de onda e o vetor de onda k_5 são dadas por

$$\psi_1(z) = Ae^{ik_1z} + Be^{-ik_1z}, \quad (4.49)$$

$$\psi_2(z) = CAi[\xi_2(z)] + DBi[\xi_2(z)], \quad (4.50)$$

$$\psi_3(z) = FAi[\xi_3(z)] + GBi[\xi_3(z)], \quad (4.51)$$

$$\psi_4(z) = H Ai[\xi_4(z)] + J Bi[\xi_5(z)], \quad (4.52)$$

$$\psi_5(z) = Le^{ik_5z} + Me^{-ik_5z}$$

Devido aos materiais serem diferentes, precisamos aplicar as condições de contorno, ou seja, as funções de ondas e suas derivadas devem ser contínuas em cada interface do dispositivo, tem-se que:

$$\psi_j(z) = \psi_{j+1}(z) \quad (4.53)$$

$$\frac{1}{m_j^*} \frac{d\psi_j(z)}{dz} = \frac{1}{m_{j+1}^*} \frac{d\psi_{j+1}(z)}{dz} \quad (4.54)$$

4.3.2 Método de Matriz Transferência

O método de matriz de transferência consiste em relacionar os coeficientes da onda incidente com a onda transmitida através de multiplicações de matrizes que são geradas a partir das condições de contorno em cada interface. Nesta parte do trabalho será descrito o processo de geração de tais matrizes, detalhando algumas técnicas matemáticas para simplificar algumas matrizes inversas.

Condição de contorno: 1ª Interface ($z = 0$)

$$A + B = CAi[\xi_2(0)] + DBi[\xi_2(0)] \quad (4.55)$$

e

$$\frac{ik_1}{m_p} - \frac{ik_1}{m_p} = \frac{\xi_2'(0)}{m_b} CAi'[\xi_2(0)] + \frac{\xi_2'(0)}{m_b} DBi'[\xi_2(0)] \quad (4.56)$$

Aplicando na equação 3.35 as condições de contorno em $z = 0$ obtemos:

$$\begin{aligned} \xi_2(0) &= \beta_2 \\ \xi_2'(0) &= \frac{1}{\lambda_2} \end{aligned} \quad (4.57)$$

onde Ai' e Bi' são as derivadas da função de onda ξ , e ξ_2' é a derivada de ξ em relação a z aplicado no ponto em que $z = 0$.

Escrevendo as equações 4.55 e 4.56 na notação matricial, tem-se que:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_1}{m_p} & -\frac{ik_1}{m_p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Ai(\beta_2) & Bi(\beta_2) \\ \frac{1}{\lambda_2 m_b} Ai'(\beta_2) & \frac{1}{\lambda_2 m_b} Bi'(\beta_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} \quad (4.58)$$

invertendo obtemos,

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{im_p}{2k_1} \\ \frac{1}{2} & \frac{im_p}{2k_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Ai[\xi_2(\beta_2)] & Bi[\xi_2(\beta_2)] \\ \frac{1}{\lambda_2 m_b} Ai'[\xi_2(\beta_2)] & \frac{1}{\lambda_2 m_b} Bi'[\xi_2(\beta_2)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} \quad (4.59)$$

Condição de contorno: 2ª Interface ($z = lb$)

$$CAi[\xi_2(l_b)] + DBi[\xi_2(l_b)] = E Ai[\xi_3(l_b)] + F Bi[\xi_3(l_b)]$$

$$\frac{\xi_2'(l_b)}{m_b} CAi'[\xi_2(l_b)] + \frac{\xi_2'(l_b)}{m_b} DBi'[\xi_2(l_b)] = \frac{\xi_3'(l_b)}{mp} CAi'[\xi_3(l_b)] + \frac{\xi_3'(l_b)}{mp} DBi'[\xi_3(l_b)] \quad (4.60)$$

E, assim, podemos escrever

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} Ai[\xi_2(l_b)] & Bi[\xi_2(l_b)] \\ \frac{1}{\lambda_2 m_b} Ai'[\xi_2(l_b)] & \frac{1}{\lambda_2 m_b} Bi'[\xi_2(l_b)] \end{bmatrix}^{-1} \times \\ &\begin{bmatrix} Ai[\xi_3(l_b)] & Bi[\xi_3(l_b)] \\ \frac{1}{\lambda_3 m_p} Ai'[\xi_3(l_b)] & \frac{1}{\lambda_3 m_p} Bi'[\xi_3(l_b)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.61)$$

Para simplificar os cálculos computacionais, pode-se usar algumas propriedades que envolvem matriz inversa de funções de Airy, ou seja

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} Ai[\xi_2(l_b)] & Bi[\xi_2(l_b)] \\ \frac{1}{\lambda_2 m_b} Ai'[\xi_2(l_b)] & \frac{1}{\lambda_2 m_b} Bi'[\xi_2(l_b)] \end{bmatrix}^{-1} &= \\ \begin{bmatrix} \frac{Bi'[\xi_2(l_b)]}{Ai[\xi_2(l_b)]Bi'[\xi_2(l_b)] - Ai'[\xi_2(l_b)]Bi[\xi_2(l_b)]} & -\frac{\lambda_2 m_b Bi[\xi_2(l_b)]}{Ai[\xi_2(l_b)]Bi'[\xi_2(l_b)] - Ai'[\xi_2(l_b)]Bi[\xi_2(l_b)]} \\ -\frac{Ai'[\xi_2(l_b)]}{Ai[\xi_2(l_b)]Bi'[\xi_2(l_b)] - Ai'[\xi_2(l_b)]Bi[\xi_2(l_b)]} & \frac{\lambda_2 m_b Ai[\xi_2(l_b)]}{Ai[\xi_2(l_b)]Bi'[\xi_2(l_b)] - Ai'[\xi_2(l_b)]Bi[\xi_2(l_b)]} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.62)$$

onde $Ai[\xi_2(l_b)]Bi'[\xi_2(l_b)] - Ai'[\xi_2(l_b)]Bi[\xi_2(l_b)]$ é o Wronskiano das funções de Airy e seu valor tabeledo vale π^{-1} [35], portanto,

$$\begin{bmatrix} Ai[\xi_2(l_b)] & Bi[\xi_2(l_b)] \\ \frac{1}{\lambda_2 m_b} Ai'[\xi_2(l_b)] & \frac{1}{\lambda_2 m_b} Bi'[\xi_2(l_b)] \end{bmatrix}^{-1} = \pi \begin{bmatrix} Bi'[\xi_2(l_b)] & -\lambda_2 m_b Bi[\xi_2(l_b)] \\ -Ai'[\xi_2(l_b)] & \lambda_2 m_b Ai[\xi_2(l_b)] \end{bmatrix} \quad (4.63)$$

Desta forma a equação 4.61 pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} &= \pi \begin{bmatrix} Bi'[\xi_2(l_b)] & -\lambda_2 m_b Bi[\xi_2(l_b)] \\ -Ai'[\xi_2(l_b)] & \lambda_2 m_b Ai[\xi_2(l_b)] \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} Ai[\xi_3(l_b)] & Bi[\xi_3(l_b)] \\ \frac{1}{\lambda_3 m_p} Ai'[\xi_3(l_b)] & \frac{1}{\lambda_3 m_p} Bi'[\xi_3(l_b)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.64)$$

sendo

$$\begin{aligned} \xi_2(l_b) &= \frac{l_b}{\lambda_2} + \beta_2, \\ \xi_2'(l_b) &= \frac{1}{\lambda_2} \end{aligned} \quad (4.65)$$

e

$$\begin{aligned}\xi_3(l_b) &= \frac{l_b}{\lambda_3} + \beta_3, \\ \xi_3'(l_b) &= \frac{1}{\lambda_3}\end{aligned}\quad (4.66)$$

Usando a metodologia descrita na segunda interface pode-se definir as condições de contorno nas outras interfaces.

Condição de contorno: 3ª interface ($z = l_b + l_p$)

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} &= \pi \begin{bmatrix} Bi' [\xi_3(l_b + l_p)] & -\lambda_3 m_p Bi [\xi_3(l_b + l_p)] \\ -Ai' [\xi_3(l_b + l_p)] & \lambda_3 m_p Ai [\xi_3(l_b + l_p)] \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} Ai [\xi_4(l_b + l_p)] & Bi [\xi_4(l_b + l_p)] \\ \frac{1}{\lambda_4 m_b} Ai' [\xi_4(l_b + l_p)] & \frac{1}{\lambda_4 m_b} Bi' [\xi_4(l_b + l_p)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H \\ J \end{bmatrix}\end{aligned}\quad (4.67)$$

sendo

$$\begin{aligned}\xi_3(l_b + l_p) &= \frac{l_b + l_p}{\lambda_3} + \beta_3, \\ \xi_3'(l_b + l_p) &= \frac{1}{\lambda_3}\end{aligned}\quad (4.68)$$

e

$$\begin{aligned}\xi_4(l_b + l_p) &= \frac{l_b + l_p}{\lambda_4} + \beta_4, \\ \xi_4'(l_b + l_p) &= \frac{1}{\lambda_4}\end{aligned}\quad (4.69)$$

Condição de contorno: 4ª interface ($z = 2l_b + l_p$)

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} H \\ J \end{bmatrix} &= \pi \begin{bmatrix} Bi' [\xi_4(2l_b + l_p)] & -\lambda_4 m_b Bi [\xi_4(2l_b + l_p)] \\ -Ai' [\xi_4(2l_b + l_p)] & \lambda_4 m_b Ai [\xi_4(2l_b + l_p)] \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} e^{ik_5 l} & e^{-ik_5 l} \\ \frac{ik_5}{m_p} e^{ik_5 l} & -\frac{ik_5}{m_p} e^{-ik_5 l} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L \\ M \end{bmatrix}\end{aligned}\quad (4.70)$$

Sendo $l = 2l_b + l_p$

$$\xi_3(2l_b + l_p) = \frac{2l_b + l_p}{\lambda_4} + \beta_4, \quad (4.71)$$

$$\xi_2'(2l_b + l_p) = \frac{1}{\lambda_4}$$

Relacionando os índices da primeira região com a da quinta região e fazendo a multiplicação das matrizes, tem-se uma matriz resultante t , chamada de matriz de transmissão, dada por

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = t \begin{bmatrix} L \\ M \end{bmatrix} \quad (4.72)$$

$$t = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{bmatrix}$$

Onde t é dada por:

$$\begin{aligned} t &= (\pi)^3 \cdot \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{Imp}{2k1} \\ \frac{1}{2} & \frac{Imp}{2k1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Ai[\xi_2(0)] & Bi[\xi_2(0)] \\ \frac{1}{\lambda_2 m_b} Ai'[\xi_2(0)] & \frac{1}{\lambda_2 m_b} Bi'[\xi_2(0)] \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} Bi'[\xi_2(lb)] & -\lambda_2 m_b Bi[\xi_2(lb)] \\ -Ai'[\xi_2(lb)] & \lambda_2 m_b Ai[\xi_2(lb)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Ai[\xi_3(lb)] & Bi[\xi_3(lb)] \\ \frac{1}{\lambda_3 m_p} Ai'[\xi_3(lb)] & \frac{1}{\lambda_3 m_p} Bi'[\xi_3(lb)] \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} Bi'[\xi_3(lb + lp)] & -\lambda_3 m_p Bi[\xi_3(lb + lp)] \\ -Ai'[\xi_3(lb + lp)] & \lambda_3 m_p Ai[\xi_3(lb + lp)] \end{bmatrix} \quad (4.73) \\ &\times \begin{bmatrix} Ai[\xi_4(lb + lp)] & Bi[\xi_4(lb + lp)] \\ \frac{1}{\lambda_4 m_b} Ai'[\xi_4(lb + lp)] & \frac{1}{\lambda_4 m_b} Bi'[\xi_4(lb + lp)] \end{bmatrix} \\ &\times \begin{bmatrix} Bi'[\xi_4(2lb + lp)] & -\lambda_4 m_b Bi[\xi_4(2lb + lp)] \\ -Ai'[\xi_4(2lb + lp)] & \lambda_4 m_b Ai[\xi_4(2lb + lp)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{ik5l} & e^{-ik5l} \\ \frac{ik5}{m_p} e^{ik5l} & -\frac{ik5}{m_p} e^{-ik5l} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Através das identidades matriciais, constrói-se uma expressão geral que se relaciona a reflexão(r) e a transmissão(t), da qual obtém-se o coeficiente de transmissão, que, como se sabe, é função da energia e dos parâmetros do sistema. Assim, fazendo $A = 1$ (onda incidente 100%), $L = t$, $B = r$, onde são os índices da onda transmitida e refletida, respectivamente, com essa relação verifica-se que:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.74)$$

Então, pode-se relacionar as amplitudes, com isso é possível obter o coeficiente de transmissão t que é dado por:

$$t^*(E)t(E) = \left(\frac{k_5 m_p}{k_1 m_p} \right) \frac{|L|^2}{|M|^2} = \left(\frac{k_5}{k_1} \right) \frac{1}{|t_{11}|^2} \quad (4.75)$$

Finalmente, obtém-se a transmissividade para um dispositivo composto de dupla barreira de potencial com tensão externa aplicada, de forma analítica. Na próxima seção iremos apresentar os resultados do coeficiente de transmissão para o caso de um dispositivo contendo um único poço quântico, assim como para sistemas com múltiplos poços com e sem tensão aplicada. Para validar o método foram feitas comparações com resultados já conhecidos na literatura. O Software utilizado para obter tais resultados foi o *Maple15*[®], onde o algoritmo desenvolvido encontra-se no apêndice B.

Resultados

Os resultados experimentais foram obtidos a partir de uma amostra P-i-N contendo 1 poço quântico de *GaAs* interposto entre duas barreiras de *AlAs*, crescida por MBE no laboratório de Física da USP coordenado pelo professor Alain Quivy . Com a finalidade de fazer medidas de transporte eletrônico na amostra, foram executados dois processamentos no dispositivo no Centro de Componentes Semicondutores (CCS) da UNICAMP.

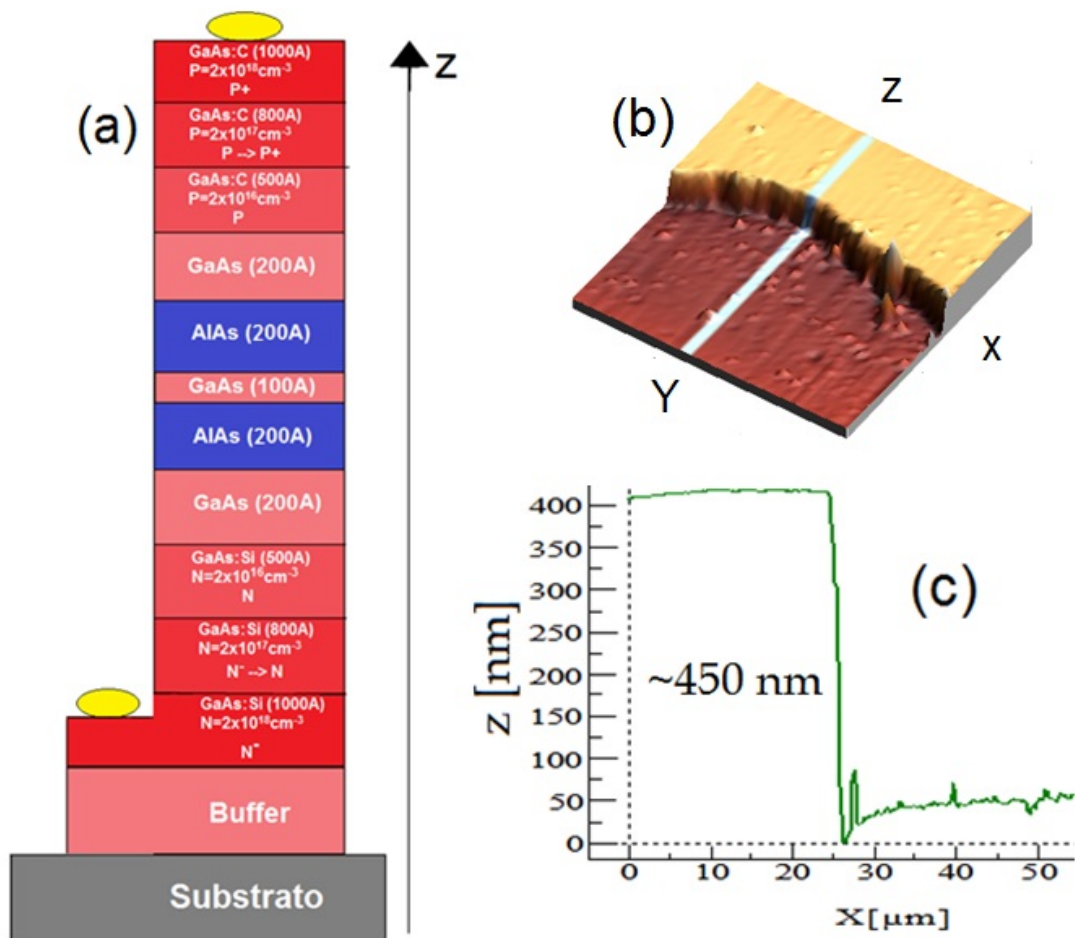


Figura 5.1 - (a) Representação da heteroestrutura P-i-N após a corrosão; (b) Imagem da amostra obtida por AFM no Laboratório de Óptica de Materiais-OptiMa após a corrosão química, a parte superior do platô é referente a camada P e a inferior N. .

No primeiro parte do processamento foi feito a corrosão química da amostra com o intuito de acessar a camada n+ para poder depositar os contatos e com isso realizar as

elétricas pelo dispositivo, ilustrado na Figura 5.1-a. Na Figura 5.1-b tem-se a imagem da amostra obtida por AFM no Laboratório de Óptica de Materiais-OptiMa da UFAM mostrando a topografia da amostra, para saber se a corrosão atingiu exatamente a camada n+ foi gerado um gráfico (veja a Figura 5.1-c), mostrando que a corrosão alcançou o valor esperado $450nm$. A segunda parte foi a metalização nas duas camadas da P-i-N, os metais usados na região P: Ti, Pt e Au; na região N: Ni, Ge e Au. Foram depositados metais para dois tipos de medidas: um para transporte eletrônico pela amostra e outro para medidas de contato, para isso foram feitos “mesas” na configuração TLM.

Posteriormente, realizou-se a caracterização da amostra, primeiramente foi determinado o tipo de contato gerado (contatos Ôhmico), a resistência e a resistividade dos contatos. Para o transporte pela amostra, foi gerado a curva i-V, mostrando o comportamento típico de um diodo.

A partir de modelos teóricos, foram feitas comparações aos resultados nesse trabalho com os encontrados nas literaturas para a transmissividade e a densidade de corrente de tunelamento [38, 39]. O resultado experimental da curva i-V da amostra P-i-N foi comparado com o resultado do algoritmo desenvolvido nessa dissertação. Por fim, foi proposto uma nova morfologia para uma amostra P-i-N.

5.1 Resistividade e resistência dos Contatos

Para fazer as medidas de TLM e curva i-V da amostra P-i-N, foi desenvolvida uma placa de circuito impresso, onde um *Tripot* e a amostra foram conectados em série. Para as medidas elétricas da amostra foram utilizados um gerador de função arbitrário e para a obtenção da queda de tensão na amostra e no *Tripot* foi usado um osciloscópio, segue na Figura 5.2-a um esquema dessa montagem experimental.

Na determinação da resistividade e resistência de contato foi usado uma estrutura TLM Retangular, possuindo uma largura $w = 90\mu m$ e comprimento $l = 80\mu m$. A estrutura apresenta cinco contatos espaçados por $4\mu m$, $8\mu m$, $16\mu m$ e $32\mu m$. Essa variação de distância entre os contatos, tem o intuito de obter diferentes valores de resistências.

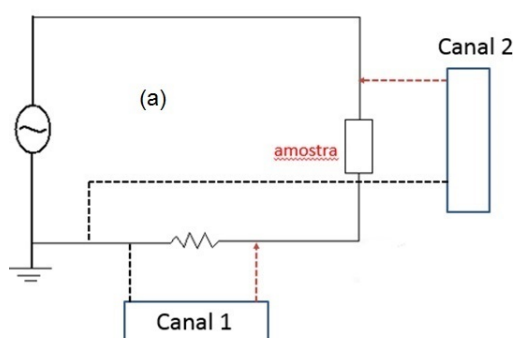


Figura 5.2 - (a) Representação esquemática para medidas elétricas na amostra.

Foram obtidos 4 valores de resistência e com isso foi montado um gráfico de cada contato em função das distâncias. Com o uso do software *Origin8*[®] para a obtenção do gráfico (veja a Figura 5.3) da Resistência total R_t em função das distâncias dos conta-

tos. Através da regressão linear foi possível obter a equação da resistência total R_t .

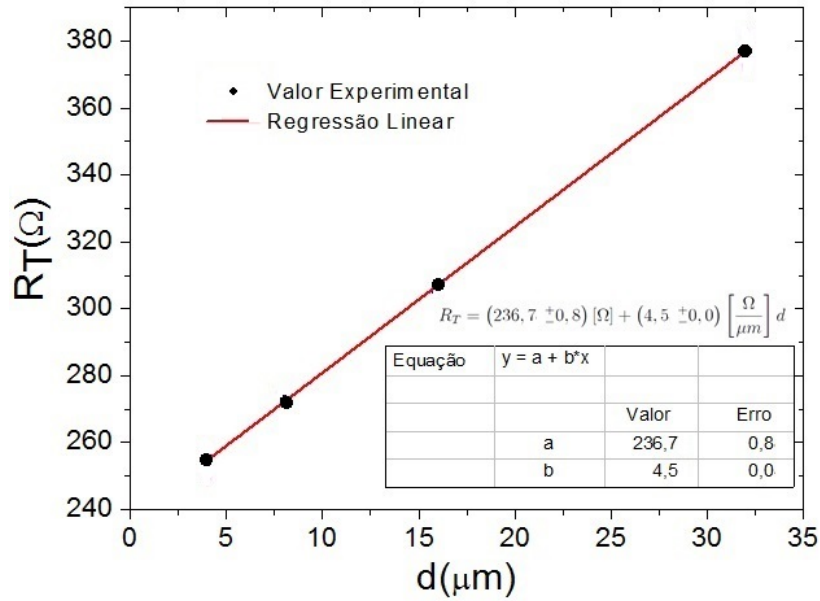


Figura 5.3 - Resistência de contato em função da distância, como o erro das medidas foram de aproximadamente $R = 0,5\Omega$, então o valor dos erros são o tamanho dos pontos .

Como podemos observar na Figura 5.3, a resistência total R_t dada por :

$$R_t = (236,7\Omega) + \left(4,5 \frac{\Omega}{\mu m}\right) d \quad (5.1)$$

Lembrando que:

$$R_T = 2R_C + \frac{R_{SH}}{W} d \quad (5.2)$$

Comparando as duas equações podemos obter a resistência de contato R_C e a resistência de folha R_{SH} , dadas por:

$$R_C = 121,3\Omega \quad (5.3)$$

e

$$R_{SH} = \left(4,5 \frac{\Omega}{\mu m}\right) (90\mu m) \Rightarrow R_{SH} = 413,1\Omega \quad (5.4)$$

Analisando a Figura 3.10 – b quando $R_T = 0$, obtemos

$$d = -2L_T \quad (5.5)$$

Substituindo esse resultado na equação 5.1, tem-se

$$0 = (236,7\Omega) + \left(4,5\frac{\Omega}{\mu m}\right)(-2L_T) \Rightarrow L_T = 25,7\mu m \quad (5.6)$$

Lembrando que a resistividade é dada por:

$$\rho_c = R_c L_T W \quad (5.7)$$

Assim, substituindo R_C , L_T e R_{SH} na equação 5.7, obtemos

$$\rho_c = (121,3\Omega)(25,7 \times 10^{-4}cm)(90 \times 10^{-4}cm) \quad (5.8)$$

Ou seja:

$$\rho_c = (2,8 \times 10^{-3}\Omega \cdot cm^2) \quad (5.9)$$

Esse valor da resistividade está próximo dos limites aceitáveis encontrado na literatura [46] que varia de $(10^{-3} \text{ a } 10^{-8}\Omega \cdot cm^2)$ mostrando assim que o contato possui baixa resistência e resistividade e, que apresenta um comportamento ôhmico, com isso os efeitos de retificação na interface são desprezíveis e com isso os efeitos que possam vir a aparecer na curva i-V da amostra P-i-N são decorrentes da heteroestrutura e não dos efeitos de contato.

Mostra-se a seguir resultados para a probabilidade de transmissão e a densidade de corrente de tunelamento para diversos casos. Alguns parâmetros variaram como a largura e a altura das barreiras e do poço, as massas efetivas das barreiras e do poço, a tensão externa e constantes dielétricas. Para a obtenção de tais resultados foram fundamentais a utilização da realização de cálculos numéricos, a partir de um programa computacional desenvolvido no software *Maple15*[®].

5.2 Coeficiente de Transmissão para DTR

Utilizando o Método de Matriz de Transferência, foi possível obter o coeficiente de transmissão $t^*(E)t(E)$ para heteroestruturas semicondutoras contendo de 1 até 4 poços quânticos usando o método apresentado na Seção 4.3.

5.2.1 Dupla barreira de potencial sem tensão externa

Primeiramente foram obtidos resultados sem a aplicação de tensão externa ($V = 0$). Na Figura 5.4, é mostrado o diagrama da banda de condução para uma heteroestrutura contendo duas barreiras de potencial de *GaAs* com altura V_0 com poço quântico de *GaAs*, no qual as barreiras possuem um comprimento de lb e o poço de potencial com comprimento de lp com a altura das barreiras de V_0 . Como as regiões 1, 3 e 5 são do mesmo material, logo $k_1 = k_3 = k_5$ e $m_1^* = m_3^* = m_5^*$, para as regiões 2 e 4 temos $k_2 = k_4$ e $m_2^* =$

m_4^* .

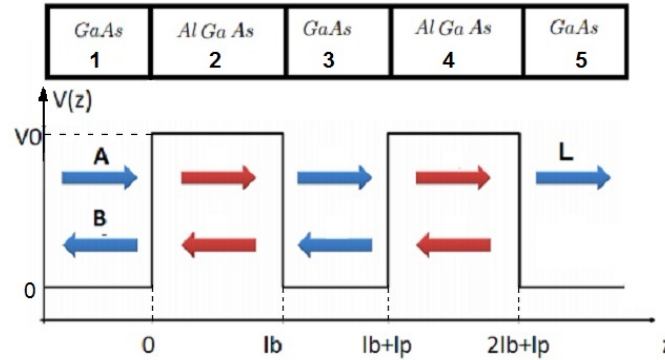


Figura 5.4 - Representação de uma dupla barreira de potencial finita de altura V_0 .

Primeiramente, foi modelado no programa QWs uma arquitetura de uma amostra contendo duas barreiras de potencial com largura $l_b = 20\text{\AA}$ e o poço quântico com largura $l_p = 50\text{\AA}$ com a altura das barreiras $V_0 = 0,5\text{eV}$. Tomou-se para as massas efetivas nas barreiras $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$ e nas demais regiões $m_{AlGaAs}^* = 0,1087m_0$. O programa QWs usa o método numérico de elementos finitos para determinar os valores dos níveis de energia dentro do poço quântico, a partir dessa modelagem, foi gerado um gráfico mostrando esses valores e encontra-se como inserção na Figura 5.5, mostrando que essa heteroestrutura possui dois estados ligados dentro do poço quântico com energias $E_0 = 94,7\text{meV}$ e $E_1 = 398,9\text{meV}$.

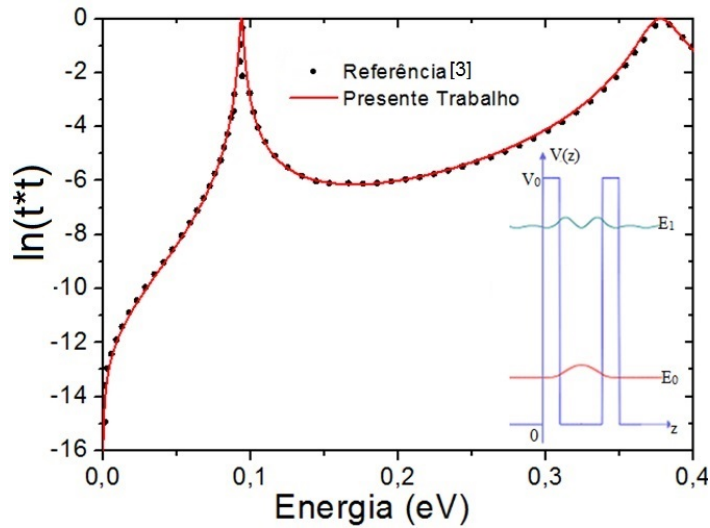


Figura 5.5 - Coeficiente de Transmissão para uma heteroestrutura sem tensão externa, contendo duas barreiras de potencial em função da energia do elétron incidente. As barreiras possuem comprimento $l_b = 20\text{\AA}$ e o poço $l_p = 50\text{\AA}$ a altura das barreiras $V_0 = 0,5\text{eV}$, as massas efetivas das barreiras são $m_{AlGaAs}^* = 0,1087m_0$ e do poço quântico $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [3] e a Figura inserida no gráfico é o resultado obtido no programa QWs sendo $E_0 = 94,7\text{meV}$ e $E_1 = 398,9\text{meV}$.

Em seguida, foi calculado no programa desenvolvido nessa dissertação o coeficiente $t^*(E)t(E)$ de transmissão em função da energia E do elétron incidente e gerado o gráfico mostrado na Figura 5.5 (linha sólida).

Como pode-se observar o gráfico apresenta dois picos de máxima transmissividade, que correspondem aos dois estados ligados dentro do poço quântico, com energias $E_0 = 93,8meV$ e $E_1 = 377,6meV$. Em contra partida com o auxílio de um software de extração de dados, foi gerado um gráfico (pontos na Figura 5.3) da transmissividade em função da energia com o resultado encontrado na Ref.[3], mostrando a validade do formalismo desenvolvido na Seção 3.5.

5.2.2 Dupla barreira de potencial com tensão externa

Nessa parte do trabalho foi adotada a mesma heteroestrutura de dupla barreira da subsecção 5.2.1, só que agora a heteroestrutura sobre a ação da tensão externa, as tensões usadas foram de $V = 0,16V$ e de $V = 0,4V$. Pode-se observar que com o aumento do potencial externo aplicado os picos de ressonâncias são deslocados para a região de baixas energia (Figura 5.6 – a), pois a heteroestrutura é distorcida cada vez mais á medida que a tensão aumenta (Efeito Stark), fazendo com os estados ligados dentro do poço quântico abaixem para próximo da altura da banda de condução. Quando o nível de energia dentro do poço referente ao nível fundamental fica abaixo do zero da banda de condução, ele desaparece do gráfico da transmissividade em função da energia do elétron incidente, como mostrado na figura Figura 5.6 – b.

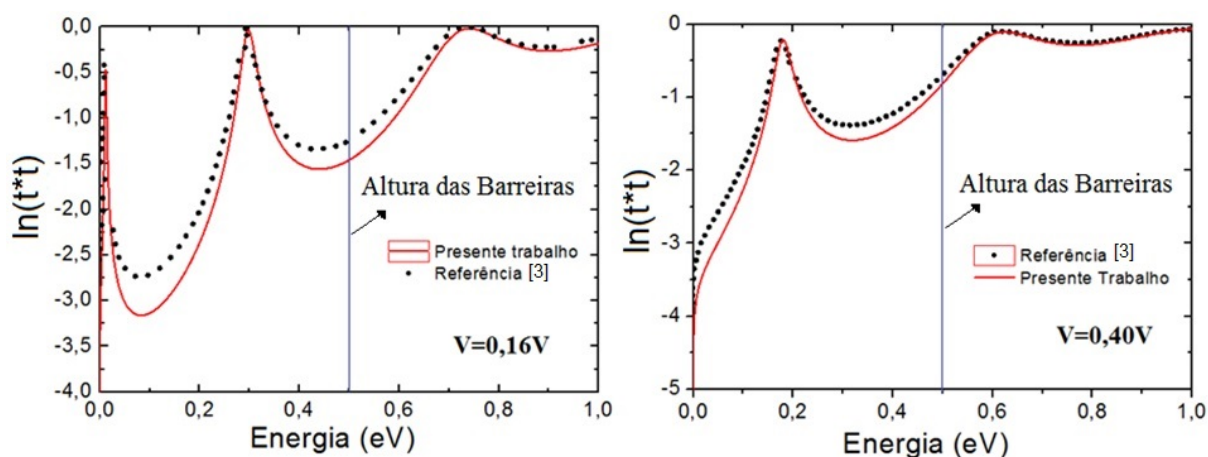


Figura 5.6 - Coeficiente de Transmissão para uma heteroestrutura com tensão externa, contendo duas barreiras de potencial em função da energia do elétron incidente. As barreiras possuem comprimento $lb = 20\text{\AA}$ e o poço $lp = 50\text{\AA}$ com altura das barreiras $V_0 = 0,5eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_{AlGaAs}^* = 0,1087m_0$ e do poço quântico $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$. Na Figura (a) Tensão $V = 0,16V$ e na (b) $V = 0,4V$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [3].

Com posse desses resultados foi montado a tabela 5.1 com e sem tensão externa os valores de energia da referência[29] e do programa QWs são provenientes de resultados usando o método numérico “Step Approximation” [47], que consiste em dividir as barreiras de potencial em vários retângulos Δz . A diferença relativa entre esses valores e o da dissertação sem tensão externa, para: [29] $E_0 = 0,2\%$ e $E_1 = 0,2\%$; e para o software QWs que usa diferenças finitas os erros foram $E_0 = 0,9\%$ e $E_1 = 5,3\%$. Os resultados da referência [25] também usam as funções de Airy. O erro relativo para os valores de energia foram $E_0 = 0,0\%$ e $E_1 = 0,1\%$. Então, podemos verificar que o algoritmo mostrou uma boa confiabilidade.

Tabela 5.1 - Energia dos estados ressonantes com diferentes métodos para um sistema com dupla barreira de potencial.

Tensão(V)	Nível de Energia	[25] (meV)	[29] (meV)	<i>Qw's</i> (meV)	<i>PresenteTrabalho</i> (meV)
0,0	E_0	93,8	94,0	94,7	93,8
	E_1	378,0	380,0	398,9	377,6
0,16	E_0	12,0	11,6	*	11,8
	E_1	298	297,2	*	298,3
0,40	E_0	*	*	*	*
	E_1	180,0	180	*	180,3

Com o intuito de testar mais o algoritmo foram feitos cálculos envolvendo mais de duas barreiras de potencial, segue o caso para tripla e quádrupla barreira de potencial.

5.2.3 Tripla barreira de potencial sem tensão externa

Vamos considerar o caso de uma heteroestrutura com uma sequência de três barreiras de potencial simétricas de altura V_0 , como mostrado na Figura 5.7. Tomou-se que as larguras das barreiras de $lb = 20\text{\AA}$ e os poços com larguras $lp = 50\text{\AA}$. As massas efetivas das barreiras são $m^* = 0,1087m_0$ e nas demais regiões $m^* = 0,067m_0$.

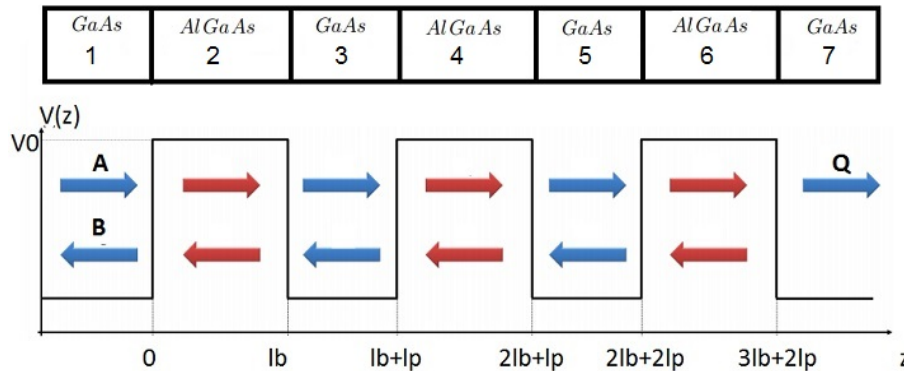


Figura 5.7 - Representação de uma tripla barreira de potencial finita, de altura V_0 .

Foi calculado no software QWs essa heteroestrutura, o cálculo mostrou que o sistema possui 4 níveis de energia no sistema, o gráfico mostrando o níveis de energias está inserido na Figura 5.8.

O coeficiente de transmissão, t , foi obtido para esse sistema, e como se pode observar no gráfico da Figura 5.8 encontra-se de pleno acordo com a literatura [3] e com o programa QWs, pois o mesmo mostra os 4 picos de ressonância referente aos níveis de energias dentro dos poços quânticos. Os valores de energia encontrados pelo software QWs foram $E_0 = 88,4meV$, $E_1 = 100,8meV$, $E_2 = 366,3meV$ e $E_3 = 417,3meV$.

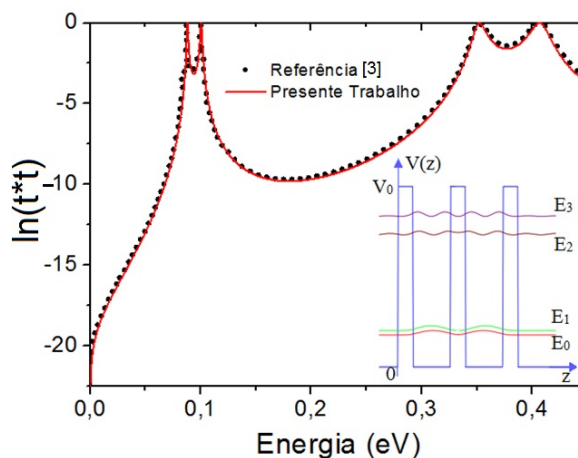


Figura 5.8 - Coeficiente de Transmissão sem tensão externa aplicada para uma heteroestrutura contendo três barreiras de potencial em função da energia do elétron incidente. As barreiras possuem comprimento $lb = 20\text{\AA}$ e o poços $lp = 50\text{\AA}$ com altura de barreiras $V_0 = 0,5\text{eV}$, as massas efetivas das barreiras são $m_{AlGaAs}^* = 0,1087m_0$ e do poço quântico $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [3] e a figura inserida no gráfico é o resultado obtido no *Software QWs* sendo $E_0 = 88,4\text{meV}$, $E_1 = 100,8\text{meV}$, $E_2 = 366,3\text{meV}$ e $E_3 = 417,3\text{meV}$.

Tabela 5.2 - Energia dos estados ressonantes com diferentes métodos para um sistema com tripla barreira de potencial.

Tensão(V)	Nível de Energia	[25] (meV)	[29] (meV)	<i>Qw's</i> (meV)	<i>PresenteTrabalho</i> (meV)
0	E_0	88,0	89,0	88,4	88,0
	E_1	100,0	100,0	100,8	100,3
	E_2	352,0	353,0	366,3	352,2
	E_3	406,0	404,0	417,3	406,5
0,16	E_0	*	*	*	*
	E_1	48,5	46,0	*	49,1
	E_2	256,0	257,0	*	256,3
	E_3	343,0	342,0	*	343,0
0,40	E_0	*	*	*	*
	E_1	*	*	*	*
	E_2	91,5	90,0	*	91,9
	E_3	267,5	260,0	*	267,8

Acima temos a tabela com os valores de energias obtidos pelas referências, o software QWs e essa dissertação foram calculadas nas diferenças entre as referências e em a essa dissertação e o maior valor encontrado foi com uma diferença de 3,8%.

Em resumo, os testes para o cálculo do coeficiente de transmissão, foi estudado uma heteroestrutura com mais barreiras de potencial, e será abordado a seguir.

5.2.4 Quíntupla barreira de potencial sem tensão externa

Nessa parte foi analisado uma heteroestrutura similar as anteriores, mas agora contendo 5 barreiras de potencial, de altura $V_0 = 0,5eV$ sem tensão externa aplicada com as larguras das barreiras de $lb = 20\text{\AA}$ e os poços com larguras $lp = 50\text{\AA}$. As massas efetivas das barreiras são $m^* = 0,1087m_0$ e nas demais regiões $m^* = 0,067m_0$. Podemos observar na Figura 5.9 que agora os estados ressonantes são 8 e que estão de acordo com o software QWs. No cálculo do Qws foram encontrados 8 níveis de energia com valores: $E_0 = 84,7meV$, $E_1 = 90,5meV$, $E_2 = 98,16meV$ e $E_3 = 104,9meV$, $E_4 = 342,4meV$, $E_5 = 3700,7meV$, $E_6 = 403,2meV$ e $E_7 = 431,1meV$.

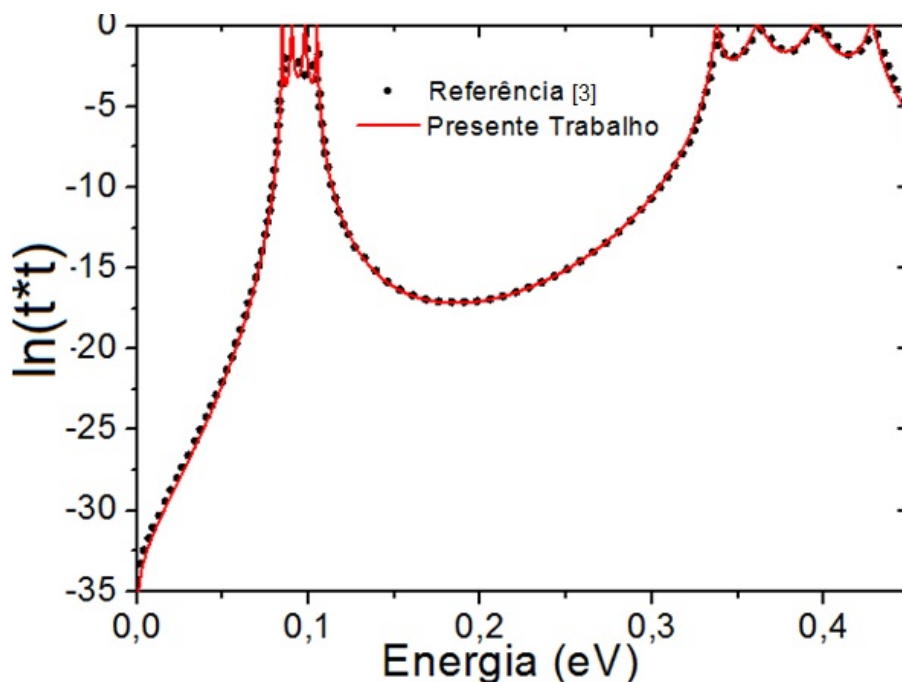


Figura 5.9 - Coeficiente de Transmissão sem tensão externa aplicada para uma heteroestrutura contendo cinco barreiras de potencial em função da anergia do elétron incidente.As barreiras possuem comprimento $lb = 20\text{\AA}$ e o poços $lp = 50\text{\AA}$ a altura das barreiras é $V_0 = 0,5eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_{AlGaAs}^* = 0,1087m_0$ e do poço quântico $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [39] e a Figura inserida no gráfico é o resultado obtido no programa QWs com níveis de energia $E_3 = 104,9meV$, $E_4 = 342,4meV$, $E_5 = 3700,7meV$, $E_6 = 403,2meV$ e $E_7 = 431,1meV$.

Na tabela 5.3 é possível verificar os valores da energia obtidos pelo software QWs e nesse trabalho, a maior diferença relativa encontrada foi de 2,4%.

Após estudado e validado algoritmo para se obter o coeficiente de transmissão, levando em consideração tanto a energia do elétron incidente quanto a tensão externa

Tabela 5.3 - Energia dos estados ressonantes com diferentes métodos para um sistema com quádrupla barreira de potencial.

Tensão(V)	Nível de Energia	<i>Qw's</i> (<i>meV</i>)	<i>PresenteTrabalho</i> (<i>meV</i>)
0	E_0	84,7	84,5
	E_1	90,5	90,1
	E_2	98,16	97,8
	E_3	104,9	104,8
	E_4	342,4	337,4
	E_5	370,7	361,5
	E_6	403,2	394,9
	E_7	431,1	427,5
0,16	E_0	*	*
	E_1	*	*
	E_2	*	33,01
	E_3	*	70,94
	E_4	*	229,0
	E_5	*	279,0
	E_6	*	321,5
	E_7	*	372,4
0,40	E_0	*	*
	E_1	*	*
	E_2	*	*
	E_3	*	*
	E_4	*	33,0
	E_5	*	134,1
	E_6	*	227,6
	E_7	*	325,8

aplicada, ou seja, $t(E, V)$ usando o Método de Matriz de Transferência, agora podemos calcular a densidade de corrente de tunelamento.

5.3 Densidade de Corrente

Para essa parte do trabalho foram estudadas heteroestrutura contendo duas e três barreiras de potencial usando a equação 4.15 e o formalismo de Matriz de Transferência abordado nas seções anteriores. Foram feitas primeiramente cálculos e posteriormente comparadas com resultados numéricos obtidos por Forrest e Meijer [39] e, por Vatanian [38] que usou como solução para as funções de onda as equações de Airy.

5.3.1 Dupla barreira

Para o primeiro sistema contendo duas barreiras de potencial, foram usados os parâmetros da Ref. [39], onde a altura da barreira é de $V_0 = 0,5eV$ e possuem comprimento $lb = 20\text{Å}$ e o poço $lp = 50\text{Å}$, as massas efetivas das barreiras são $m_b^* = 0,094m_0$ e do poço quântico $m_p^* = 0,0636m_0$, com temperatura $T = 0,001K$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,005eV$, que corresponde ao valor do nível de Fermi do GaAs dopado com Si e concentração $N = 10^{17}cm^{-3}$.

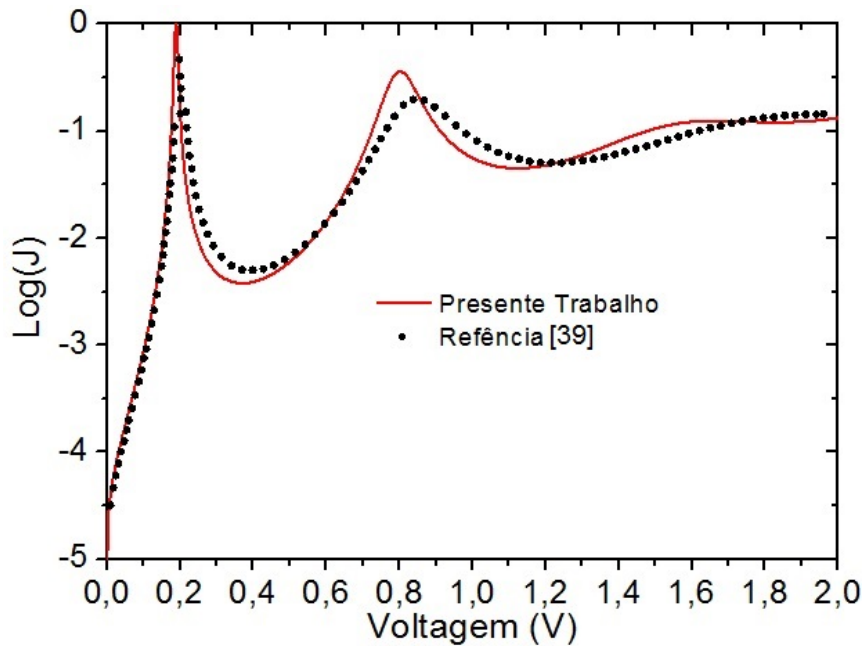


Figura 5.10 - Logaritmo da densidade de corrente de tunelamento em função da tensão aplicada para uma heteroestrutura contendo duas barreiras. As barreiras possuem comprimento $lb = 20\text{Å}$ e o poço $lp = 50\text{Å}$ a altura das barreiras é $V_0 = 0,5eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_b^* = 0,094m_0$ e do poço quântico $m_p^* = 0,0636m_0$, com temperatura $T = 0,001K$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,005eV$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [39].

No cálculo da curva $\text{Log}(J) - V$ os valores de tensões variaram de zero a $2V$, pois é um intervalo relativamente grande, sendo possível evidenciar como os níveis de energia dentro do poço quântico influencia no comportamento da densidade de corrente de tunelamento em função da tensão externa.

Encontram-se na Figura 5.10 o resultado obtido nessa dissertação e o de Forrest e Meijer [39], onde são observados a presença de dois picos de ressonância. Tomando o caso para o primeiro pico de ressonância é possível verificar que a densidade de corrente aumenta até a tensão de $0,18V$, que é o valor correspondente quando o estado fundamental dentro do poço quântico coincide com o fundo da banda de condução.

Após a tensão de $0,18V$, a corrente começa a diminuir, gerando o fenômeno da resistência diferencial negativa. A corrente diminui até um valor em torno de $0,3V$ e volta a aumentar até $0,80V$, que é o valor de energia do primeiro estado excitado e volta a diminuir quando esse estado fica abaixo do fundo da banda de condução. Por fim, a corrente volta a aumentar e dispositivo passa a ter um comportamento de um diodo convencional.

Na segunda heteroestrutura de dupla barreira de potencial, os parâmetros usados foram da Ref.[38], onde a altura da barreira é de $V_0 = 0,25eV$ e possuem comprimento $lb = 50\text{\AA}$ e o poço $lp = 90\text{\AA}$, as massas efetivas das barreiras são $m_b^* = 0,078m_0$ e do poço quântico $m_p^* = 0,0416m_0$, com temperatura $T = 5,00K$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,040eV$. que corresponde ao valor do nível de Fermi do GaAs dopado com concentração $N = 10^{19}cm^{-3}$.

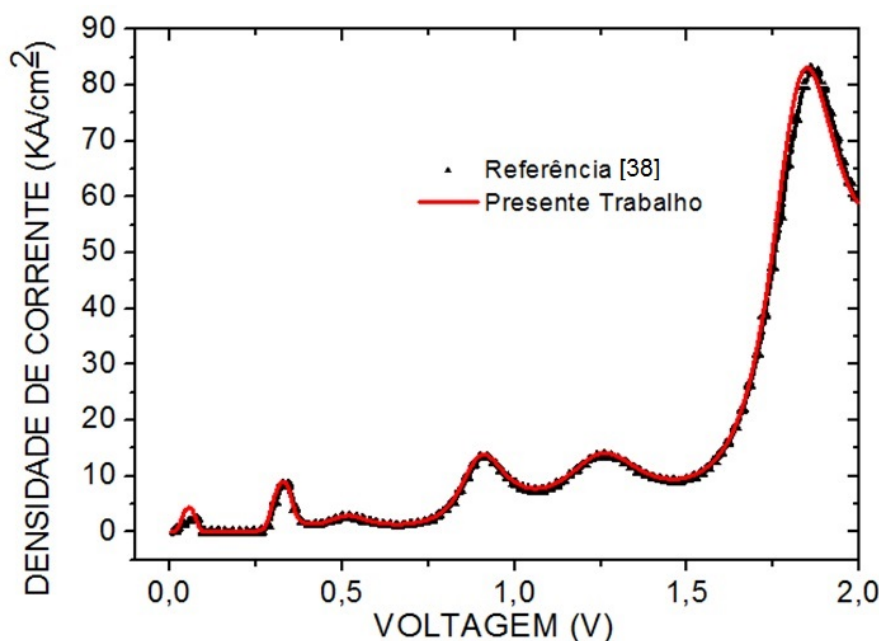


Figura 5.11 - Densidade de corrente de tunelamento em função da tensão aplicada para uma heteroestrutura contendo duas barreiras. As barreiras possuem comprimento $lb = 50\text{\AA}$ e o poço $lp = 90\text{\AA}$ a altura das barreiras é $V_0 = 0,25eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_b^* = 0,078m_0$ e do poço quântico $m_p^* = 0,041m_0$, com temperatura $T = 5K$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,04eV$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [38].

A Figura 5.11 mostra a curva $J - V$. É observado a presença de vários picos nesse gráfico, sendo que os dois picos mais estreitos são referentes aos estados ligados do poço quântico e o outros são referentes as interferências construtivas do elétron passando por cima da segunda barreira de potencial.

O primeiro pico de ressonância acontece na tensão de $0,07V$, que é o valor corres-

pondente quando o estado fundamental dentro do poço quântico coincide com o fundo da Banda de Condução.

Após tensão de $0,07V$ a densidade de corrente começa a diminuir (resistência diferencial negativa). A corrente diminui até $0,1V$ permanecendo constante até $0,26V$ e aumenta até $0,35V$, que é o valor quando o segundo estado excitado coincide com o zero da banda de condução e volta a diminuir quando esse estado fica abaixo da banda de condução. Por fim, a corrente volta a aumentar e o dispositivo passa a ter um comportamento de um diodo convencional modulado pelas interferências construtivas da segunda barreira de potencial.

Serão mostrados dois resultados para o caso de uma heteroestrutura contendo dois poços quânticos. O primeiro é referente a comparação entre o modelo “Step Aproximation” e o segundo usando funções de Airy.

As barreiras são simétricas com larguras $lb = 20\text{\AA}$ com altura de $V_0 = 0,5eV$ os poços possuem larguras de $lp = 50\text{\AA}$. A energia do elétron incidente é o mesmo para o sistema contendo duas barreiras de potencial que é de $0,005eV$ a uma temperatura de $T = 0,0001K$. Para as massas efetivas temos que nas barreiras usou-se $m_b^* = 0,094m_0$ e no poços $m_p^* = 0,0636m_0$.

5.3.2 Tripla barreira

Para comparar o resultado que usa métodos numéricos [39] foi calculado para a densidade de corrente uma heteroestrutura contendo três barreiras de potencial de $Al_{0,4}Ga_{0,6}As$ e dois poços quânticos de $GaAs$.

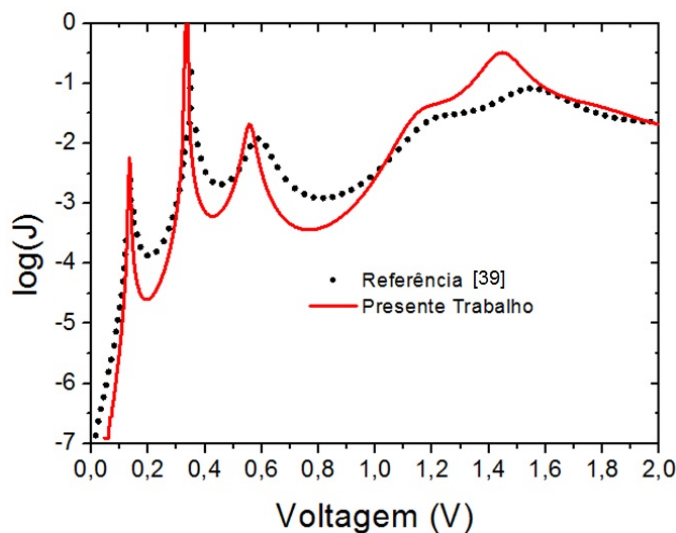


Figura 5.12 - Logarítmo da densidade de corrente de tunelamento em função da tensão aplicada para uma heteroestrutura contendo três barreiras. As barreiras possuem comprimento $lb = 50\text{\AA}$ e os poços $lp = 90\text{\AA}$ a altura das barreiras é $V_0 = 0,5eV$, as massas efetivas das barreiras são $m_b^* = 0,094m_0$ e dos poços quântico $m_p^* = 0,0636m_0$, com temperatura $T = 0,001K$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,005eV$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [39].

Como podemos observar no gráfico da Figura 5.12, os resultados são satisfatórios,

mas divergem quando são analisadas as posições dos picos da ressonância. Um dos fatores dessas diferenças é que no método “Step Approximation” apresenta menor precisão, já que a menor largura das barreiras retangulares são de 1\AA .

Sendo assim, foi realizado um segundo cálculo, agora comparando com resultados usando como solução das funções de onda a equação de Airy. A segunda heteroestrutura com três barreiras de potencial foi baseada nos dados da Ref.[38], onde a altura da barreira é de $V_0 = 0,25\text{eV}$ e possuem comprimento $lb = 50\text{\AA}$ e os poços quânticos $lp = 90\text{\AA}$, as massas efetivas das barreiras são $m_b^* = 0,078m_0$ e dos poços $m_p^* = 0,0416m_0$, com temperatura $T = 5,00\text{K}$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,040\text{eV}$, que corresponde ao valor do nível de Fermi do GaAs dopado com concentração $N = 10^{19}\text{cm}^{-3}$.

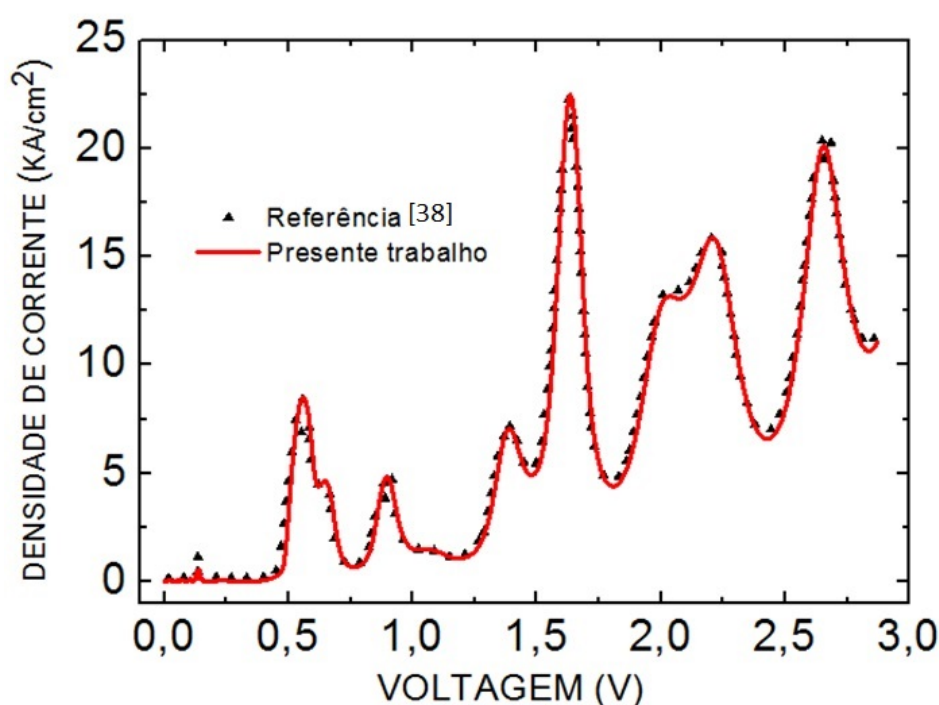


Figura 5.13 - Densidade de corrente de tunelamento em função da tensão aplicada para uma heteroestrutura contendo três barreiras. As barreiras possuem comprimento $lb = 50\text{\AA}$ e os poços $lp = 90\text{\AA}$ com a altura das barreiras $V_0 = 0,25\text{eV}$, as massas efetivas das barreiras são $m_b^* = 0,078m_0$ e dos poços quântico $m_p^* = 0,041m_0$, com temperatura $T = 5\text{K}$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,04\text{eV}$. A linha sólida representa o resultado obtido no presente trabalho, os pontos representam o trabalho obtido na referência [38].

No gráfico da Figura 5.13 é possível comparar os dois resultados e com isso mostrar que o algoritmo apresenta boa confiabilidade.

O desenvolvimento nessa Seção permitiu a validação do método proposto nessa dissertação, com isso é possível estender os trabalhos a amostra P-i-N desenvolvida. A seguir, serão mostrados os resultados dos cálculos da transmissividade e da corrente da amostra em estudo.

5.4 A amostra

Tomando a morfologia da amostra mostrada na Figura 5.1-a, temos que a amostra P-i-N possui barreiras de AlAs com um poço quântico de GaAs. As barreiras possuem comprimentos $lb = 200\text{Å}$ e os poços quânticos $lp = 100\text{Å}$. Após definir os materiais usados precisamos definir os valores correspondente as massas efetivas e altura das barreiras. Um dos efeitos da adição de Al na liga $Al_xGa_{1-x}As$ é a mudança do valor da massa efetiva. Segundo a Ref. [48] a massa efetiva da liga é aproximadamente linear dependente da concentração de alumínio e é dada pela seguinte expressão.

$$m_*(x) = (0,067 + 1,455x)m_0, \quad (5.10)$$

Onde m_0 é a massa de repouso do elétron. Assim as massas efetivas das barreiras $m_b^* = 0,067m_0$ e dos poços quântico $m_p^* = 0,15m_0$.

Outros dos efeitos causados pela dopagem com Al é o aumento da energia de *Gap*. Os valores para a energia de *Gap* sugeridos por Casey e Panish Ref. [18] a $300K$ para uma concentração de Al variando de $0 < x < 0,45$, são dados por

$$E_g^{Al_xGa_{1-x}As} = 1,424 + 1,247x \quad (5.11)$$

Com isso a energia de de *Gap* do *GaAs* é $E_g^{GaAs} = 1,424eV$

Para uma concentração de Al variando de $0,45 < x < 1,0$, são dados por:

$$E_g^{Al_xGa_{1-x}As} = 1,900 + 1,125x + 0,143x^2 \quad (5.12)$$

A energia de *Gap* do *AlAs* é dada por $E_g^{AlAs} = 2,168eV$

De acordo com a seção 2.2 os valores das altura das barreiras de potencial é 60% da diferença das energias de *Gap* de cada material ΔE_g [11], ou seja:

$$V_0 = 0,60\Delta E_g \quad (5.13)$$

A difereça das energias de *Gap* é:

$$\Delta E_g = E_g^{AlAs} - E_g^{GaAs} = 0,744eV \quad (5.14)$$

Assim as alturas das barreiras de potencial serão:

$$V_0 = 0,60\Delta E_g = 0,446eV \quad (5.15)$$

Com base nesses valores, primeiramente foi calculado o coeficiente de transmissão para amostra P-i-N

5.4.1 Transmissividade

O primeiro cálculo da amostra foi a obtenção do coeficiente de transmissão em função da energia do elétron incidente.

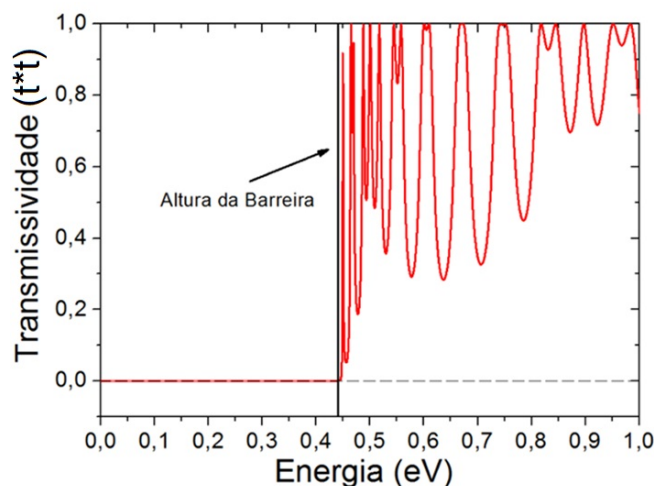


Figura 5.14 - Coeficiente de Transmissão sem tensão externa aplicada para a amostra P-i-N em função da energia do elétron incidente. As barreiras possuem comprimento $lb = 200\text{\AA}$ e o poço $lp = 100\text{\AA}$ a altura das barreiras é $V_0 = 0,446\text{eV}$, as massas efetivas das barreiras são $m_{AlAs}^* = 0,15m_0$ e do poço quântico $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$.

Antes da obtenção do coeficiente de transmissão, foi calculado no software QWs a amostra P-i-N. O gráfico gerado pelo QWs mostrou que essa heteroestrutura possui três estados ligados dentro do poço quântico com energias $E_0 = 31,8\text{meV}$, $E_1 = 128,8\text{meV}$ e $E_2 = 293,4\text{meV}$.

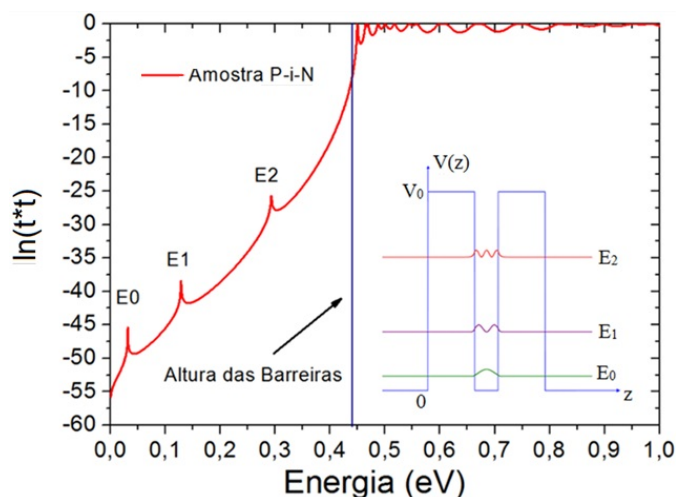


Figura 5.15 - Logarítmo do coeficiente de Transmissão sem tensão externa aplicada para a amostra P-i-N em função da energia do elétron incidente. As barreiras possuem comprimento $lb = 200\text{\AA}$ e o poço $lp = 100\text{\AA}$ a altura das barreiras é $V_0 = 0,446\text{eV}$, as massas efetivas das barreiras são $m_{AlAs}^* = 0,15m_0$ e do poço quântico $m_{GaAs}^* = 0,067m_0$. A Figura inserida no gráfico é o resultado obtido no programa QWs .

Em seguida foi calculado no programa desenvolvido nessa dissertação o coeficiente

t de transmissão em função da energia E do elétron incidente e gerado o gráfico, mostrado na Figura 5.14. Podemos observar que não existem os picos referentes as probabilidades de transmissão para essa heteroestrutura.

Como o intuito de evidenciar se existe ou não picos referentes, a probabilidade de transmissão foi gerado um gráfico $\ln(t)$ em função da energia do elétron incidente como mostrado na Figura 5.15.

O gráfico gerado pelo QWs encontra-se como inserção na Figura 5.15, mostrando os três estados ligados dentro do poço. No gráfico é possível verificar que existem os três estados ressonantes dentro do poço, mas sua probabilidade de tunelamento é quase nula. Esse resultado implica diretamente na curva $i - V$ da amostra.

A próxima seção mostra o resultado referente a comparação dos resultados obtidos pela simulação computacional e os obtidos de forma experimental, para a curva ixV da amostra P-i-N.

5.4.2 Medidas da curva ixV da P-i-N

Na curva $i - V$ os valores de tensões variaram de zero a $2V$, com isso é possível evidenciar como os níveis de energia dentro do poço quântico influenciam no comportamento da densidade de corrente de tunelamento em função da tensão externa. O nível de Fermi foi calculado a partir de um algoritmo proposto por Bolognesi [48] e seu foi de $E_F = 0,00922eV$ para o $GaAs$ com concentração de dopagem $N = 2 \times 10^{18}cm^{-3}$.

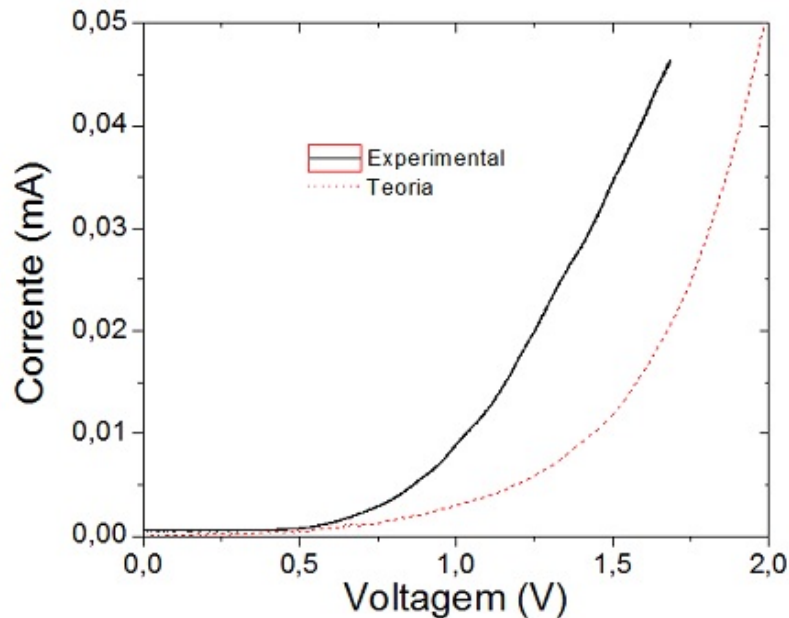


Figura 5.16 - Curva $i-V$ da amostra P-i-N, com temperatura de $T = 300K$ e a energia do elétron incidente com o valor de $0,0092eV$. A linha sólida representa a curva ixV obtida experimentalmente e os pontos representam o resultado obtido pelo algoritmo desenvolvido.

As medidas da curva $i-V$ foram feitas a temperatura ambiente, por isso no algoritmo usamos $T = 300K$. Nessa temperatura é possível ter elétrons excitados acima do nível de Fermi, por isso no intervalo de integração usou-se a energia do elétron incidente como

sendo o da altura da barreira de potencial $0,446\text{eV}$. Segue na Figura 5.16 o gráfico das curvas $i \times V$ da amostra P-i-N tanto experimental (sólida) quanto teórica (pontilhada).

E observado que não existem picos de ressonância. Como foi mostrado nas curvas da transmissividade em função da energia do elétron incidente, a probabilidade de existir picos de tunelamento eram basicamente nulas, e isso foi evidenciado nas das curvas da Figura 5.16, mostrando a priori que o modelo proposto na dissertação esta correto. Como pode-se observar as curvas i - V apresentam uma diferença na tensão de corte, essa discrepância é dada pelo fato de que o algoritmo desenvolvido não levou em consideração as resistências dos contatos, o transporte devido a buracos da junção P-i-N, e o tipo de transporte na interface metal-semicondutor.

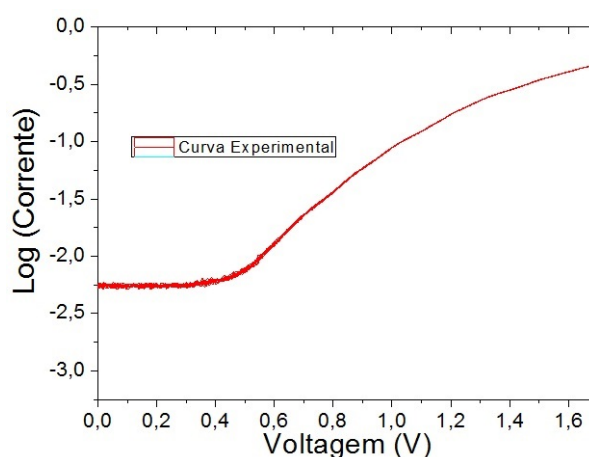


Figura 5.17 - Logarítimo curva experimental i - V da amostra P-i-N.

Outros resultados adicionais, são mostrados a seguir, primeiramente foi tirado o Logarítimo (veja Figura 5.17) da curva i - V do resultado experimental, evidenciando que não existem os picos referentes aos estados ligados do poço quântico.

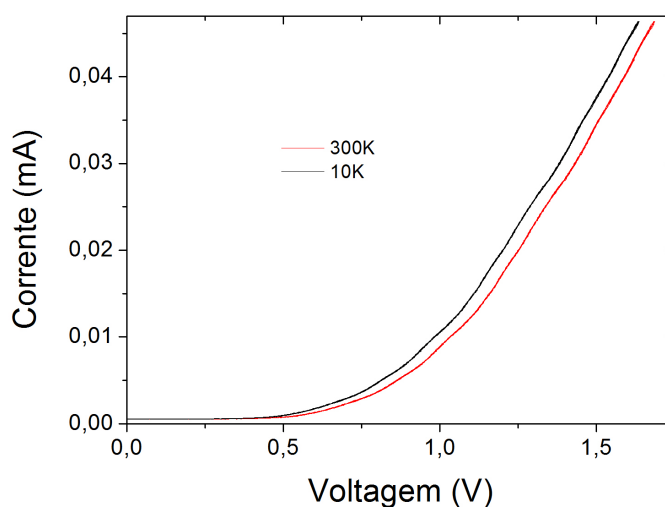


Figura 5.18 - Curva experimental i - V da amostra P-i-N, com temperatura de $T = 10\text{K}$ $T = 300\text{K}$.

Por fim, foi feita a medida da amostra a baixa temperatura ($10K$) por um dedo frio conectado a um criostato de ciclo fechado, utilizando gases de He comprimido como agente criogênico, mais uma vez a amostra não apresentou o fenômeno de tunelamento ressonante.

Com isso, podemos inferir que o programa desenvolvido estão de acordo com os resultados das literaturas, mas divergem para sistemas reais. Também foi evidenciado que o estudo de tais heteroestruturas usando o Método de Matriz de Transferência foi bem sucedido e que o modelo usando as funções de Airy mostrou-se mais preciso que os modelos numéricos propostos nas literaturas

Conclusão

Neste trabalho foi apresentado um estudo sobre heteroestruturas semicondutoras contendo poços quânticos, que teve como objetivo caracterizar o transporte de corrente de tunelamento ressonante em uma junção P-i-N com barreiras de potencial de AlAs e poço quântico de GaAs.

Inicialmente abordou-se conceitos físicos gerais sobre dispositivos semicondutores, assim como, heteroestruturas semicondutoras. Também foi apresentado o Diodo de Tunelamento Ressonante detalhando o comportamento do nível de Fermi ao dopar o semicondutor. Esse tipo de dispositivo possui em suas extremidades regiões altamente dopadas e a probabilidade de transmissão atinge valores elevados quando os níveis de energia dos estados ligados dentro do poço quântico coincide com a energia do elétron incidente foi também explicado a condição necessária para a máxima probabilidade do elétron tunelar pelas barreiras de potencial.

Posteriormente, analisamos o comportamento na interface de materiais semicondutores ao se inserir uma camada metálica. Abordando os tipos de contatos formados (*Schottky* ou Ôhmico), explicando a formação da barreira Schottky e descrevendo de forma matemática o comportamento retificador desse tipo de contato. Para finalizar, fiz o tratamento teórico do contato Ôhmico, mostrando a técnica TLM para determinar a resistência e a resistividade dos contatos depositados na amostra. Esse tipo de análise foi necessária para saber se os efeitos na curva i-V do diodo P-i-N eram devidos a amostra ou consequência dos fenômenos de interface.

A fim de completar o estudo, foi apresentado a parte teórica das propriedades do tunelamento ressonante, descrevendo que a corrente de tunelamento tem início quando o nível de energia dentro do poço começa a coincidir com o nível de Fermi do emissor na banda de condução e cai rapidamente quando fica abaixo do fundo da banda de condução (Resistência Diferencial Negativa). Juntamente com modelos teóricos, calculou-se a transmitividade em função da energia do elétron incidente e a densidade de corrente de tunelamento para heteroestruturas semicondutoras contendo um e dois poços quânticos usando o Método de Matriz de Transferência.

Como trabalho experimental, ao relizar as medidas de resistência e resistividade de contato, verifiquei que o contato é do tipo Ôhmico e apresenta uma resistividade de contato nos limites aceitáveis apresentados na literatura. Além disso, obtivemos a curva i-V da amostra e foi verificado que o dispositivo não apresentava os fenômenos de tunelamento ressonante e a resistência diferencial negativa.

O modelo teórico para a curva da densidade de corrente de tunelamento da amostra utilizando o Método de Matriz de Transferência foram satisfatórios quando comparados

com resultados encontrados na literatura. Apesar das diferenças nas curvas i - V (teórica e experimental) foi possível ratificar que a amostra não apresenta o efeito de tunelamento ressonante, mostrando que o algoritmo tem boa confiabilidade, porém, precisa de algumas melhorias. Por isso, como perspectivas, será estudado o aprimoramento do algoritmo para incluir os efeitos de transporte de buracos (amostras P-i-N) e a resistência de contato da amostra na equação da densidade de corrente de tunelamento, com isso será possível modelar amostras com mais precisão e com as propriedades desejadas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] L. Esaki, “New phenomenon in narrow germanium p-n junctions”, Phys. Rev. **109**, 2, pp. 603-604, (1958).
- [2] Carvalho, Hugo Bornette de, “Filtros de SPIN Não-Magnéticos Controlados por Voltagem”, Universidade Estadual de Campinas, Tese de Doutorado, (2006).
- [3] R. Tsu e L. Esaki, “Tunneling in a finite superlattice”, Apply. Phys. Lett., **22**, 11, pp. 562-564, (1973).
- [4] L. L. Chang, L. Esaki e R. Tsu, Appl. Phys. Lett. **24**, 593 (1974).
- [5] K. Brennan, “The Physics of semiconductors - with applications to optoelectronics devices”, Cambridge University Press, Camb
- [6] SWART, JACOBUS W. “SEMICONDUCTORES - FUNDAMENTOS, TECNICAS E APLICAÇÕES 1ª ed., São Paulo: Editora Livraria da Física, (2008). ”
- [7] Sergio M. Rezende, “Materiais e Dispositivos Eletrônicos, 2.ed., São Paulo : Editora Livraria da Física, (2004).
- [8] H. Iwamoto, “Tempo de tunelamento semiclássico em barreira triangular”, Dissertação Mestrado, Universidade Estadual de Londrina, (2006).
- [9] S. Adashi, “*GaAs*, *AlAs* and *Al_xGa_{1-x}As*: Material parametrs for use in research and device applications”, J. Appl., **58**, R1-R29, (1985).
- [10] L. E. Tomás, “Éptaxia por feixe molecular de camadas dopadas do tipo para a construção de dispositivos optoeletrônicos!, Tese de doutorado, Instituto de Física da Universidade de São Paulo, (2004).”
- [11] M. Hiroshi, T. Tomonori e T. Susumu, “A new triple-well resonant tunneling diodo whith controllable double-negative resistance”, IEEE, vol. **35**, n0. 11, (1998).
- [12] F. Braun, “Über die Stromleitung durch Schwefelmatalle ”, Ann. Phy. Ehem. **153**, 556 (1874).
- [13] A. H. Wilson “The Theory of Electronic Smiconductors”, Proc. R. Soc. Londe. Ser. **A133**, 458 (1931).
- [14] N. E. G. Bernhard. “Efeito de campo elétrico, dopagens não-abruptas e interface graduais na estrutura eletrônica de poços quânticos de *GaAs/ AlGaAs* e *GaN/ AGaN*”, Tese de Doutorado, Instituto de Física da Universidade de Brasília, (2007).

- [15] L. Edson, D. L. F. Ivan, D. L. José, F. T. O. de Dari, A. L. Sidneylves e M. A. Eliermes, “A técnica de fotoluminescência aplicada à investigação de imperfeições estruturais em poços quânticos de materiais semicondutores”, *Semina: Ciências Exatas e Tecnológica*, Londrina, Vol. 26, n. 1, p. 23-38, jan./ jun., (2005).
- [16] G. F. Paulo, “Influência de uma Pressão Biaxial Externa nas Propriedades Ópticas de Poços Quânticos de GaAs / AlGaAs”, *Dissertação de Mestrado*, Instituto de Física Gleb Wataghin Campinas (2004).
- [17] J. P. Sun, G. I. Haddad, P. Mazumber e J. N. Schulman, “Resonant Tunneling Diodes: Models and Properties”, *Proceedings of the IEEE*, 86, 4, pp. 641-661, (1998).
- [18] J. -S. Wu, C. -Y. Chang, C.-P. Lee, K.-H. Chang e D.-G. Liu, D.-C. Liou, “Characterization of improved AlGaAs/GaAs resonant tunneling heterostructure bipolar transistors”, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 30, 2A, pp. L160-L162, (1991).
- [19] L. Esaki, “Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors”, *IBM Journal of Research and Development*, 14, 1, pp. 61-65, (1970).
- [20] J. Sone, “Electron transport in quantum wires and its devices applications”, *Semicond. Sci. Technol.*, 7, 3B, pp. B210-214, (1992).
- [21] ridge, UK, (1999).
- [22] A. F. J. Levi, “Applied Quantum Mechanics”, Second Edition. New York. Cambridge University Press, (2006).
- [23] R. Ragi, J. Manzoli e M. A. Romero, “Modeling the C-V Characteristics of Heterodimensional Schottky Contacts”, 32o. European Solid-States Device Research Conference, pag. 623.
- [24] R. Ragim, M. A. Romero e B. Nabet, “On the Modelling of the Electronic Characteristics of Heterodimensional Schottky Contacts”, *IEEE Transactions on Electron Devices*, 52, 2, pp. 170-175, (2005).
- [25] Nobrega, Rafael Vinicius Tayette da. “Aspectos de Modelagem de Transistores de Fios Quânticos”. São Carlos, . *Dissertação não publicada*, (2010) .
- [26] Caruso R. Francisco e Oguri V., “Física Moderna Origens Clássicas & Fundamnetos Quânticos”, 1. ed., Editora Elsevier, (2006).
- [27] S. M. Sze, Kwok Kwok Ng, “Physics of Semiconductor Devices”, Willey Intercience, 3rd Edition (2007).
- [28] Bethe, H. ;LABORATORY, M. I. of T. R. “Theory Bondary Layer of Cristal Rectifiers”. [S.1.: s. n.]. (Report Massachusetts Institute of Thecnology. Radiation Laboratory).
- [29] Mahon, José Roberto Pinheiro, *Mecânica Quântica: desenvolvimento contemporâneo com aplicações*, Editora LTC .
- [30] Eisberg, R; Resnick, R., *Física Quântica*. 24 reimpressão. Rio de Janeiro. Elsevier, (1979).

- [31] Paul Allen Tipler, Física Moderna . (1933)
- [32] A. C. R. Bittencourt, A. M. Cohen e G. E. Marques, Phys. Rev. B **57**, 4525 (1998).
- [33] Wolney Filho, Waldemar- Mecânica Quântica/ Waldemar Wolney Filho- Goiânia: Ed: da UFG, (2002)
- [34] C. B. Duke, "Tunneling in solids", Academic, New Yourk, USA, p.32, (1969).
- [35] David Yuk Kei Ko e J.C. Inson, "Matrix method for tunneling in heterostructures. Ressonant tunneling in multilayer systems.", Phys.Rev.B **38**, pg (1988)
- [36] Schroder, Dieter K., "Semiconductor and devices characterization", A Willey- Interscience Publcatons, (2006).
- [37] Leão, Aroldo Ferreira, "ABORDAGEM TEÓRICO-EXPERIMENTAL DO EFEITO DO TUNELAMENTO QUÂNTICO EM DISPOSITIVOS ", Juazeiro/BA, Universidade Federal do Vale do São Franciscom, Dissertação de Mestrado, (2006).
- [38] Abromowitz, M. e Stegum, I.A., "Handbook of Mathematical Functions", 9th Edition, Dover (1970).
- [39] M. S. Dresselhaus, "Solid State Physics. Part 1. Transport Properties os Solids", 6.732 Fall, (2001).
- [40] S. Vatania e G. Gildenblat, "Airy's Functions Implementarion of the Transfer-Matrix Method for Resonant Tunneling in Variably Spaced Finite Superlattice", IEEE Journal of Quantum Electronics, 32, 6, pp. 1093-1105, (1996).
- [41] K. A. Forrest e P. H. E. Meijer, "Tunneling calculations for $GaAs - Al(x)Ga(1 - x)$ as graded band-gap sawtooth superlattices ", NASA Center: Goddard Space Flight Center, (1991).
- [42] K. F. Brennan and C. J. Summers, "Theory of resonant tunneling in a variably spaced multiquantum well structure: An Airy sunction approach", Jornal of Applied Physics, 61, 614, (1987).
- [43] S. S. Allen and S. L. Richardson, "Improved Airy formalism for study of resonant tunneling in multibarrier semiconductor heterostructures", Jornal of Applied Physics, 79, 886, (1996).
- [44] M. O. Vassel, J. Lee, e H. F Lockwood, "Multibarrier tunneling in $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ heteroestructure,"J. Appl., 54, no 9, pp 5206-5213, (1983).
- [45] B. Ricco e M. Ya. Azbel, "Physics of resonant tunneling. The one-dimensional double barrier case", Phys. Rev. B, 29, 1970, (1984).
- [46] O. Pinaud, "Transient Simulations of a resonant tunneling diode", J. Apply. Phys. 92, 4, 1987, (2002).
- [47] B. G. Streetman, "Solid State Electronic Devices", Pretice Hall, (1995).
- [48] D. K. Schroder, "Semiconductor Material and Device Characterization", Third Edition. New Jersey. Wiley & Sons, p. (135-139) (2005).

- [49] M. Abe, H. Hamaguchi, H. Yamamoto, N. Yamada, "Dwell Time in Asymmetrical Double-Barrier Structure under DC Bias Voltage", *Electronics and Communication in Japan, Parte 2*, 88, pp. 1-10, (2005).
- [50] C. R. Bolognesi "Investigation of Two-Terminal Resonant Tunneling Devices", B. Eng. (Electrical), McGill University, Montreal (1989).

CÁLCULO DA DENSIDADE DE CORRENTE DE TUNELAMENTO

Sabe-se que a a densidade de corrente total J_t que flui pelo dispositivo:

$$J_t = \left(\frac{m^* e}{2\pi^3 \hbar^3} \right) \int_0^\infty \int_0^\infty [f_1(E) - f_5(E + eV)] [T^*(E)T(E)] dE_t dE_l \quad (\text{A-1})$$

Separando as integrais, ficaremos

$$J_t = \left(\frac{m^* e}{2\pi^3 \hbar^3} \right) \int_0^\infty dE_l [T^*(E)T(E)] \int_0^\infty [f_1(E) - f_5(E + eV)] dE_t \quad (\text{A-2})$$

Para calcular a segunda integral que é em relação a energia transversal, devemos calcular o valor da integral $\int f(E) dE$ e, depois substituir os intervalos de integração, fazendo

$$G = \int_{\frac{p_x^2}{2m^*}}^\infty f(E) dE \quad (\text{A-3})$$

substituindo a distribuição de Fermi-Dirac, tem-se

$$G = \int_{\frac{p_x^2}{2m^*}}^\infty \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} dE \quad (\text{A-4})$$

Multiplicando tanto o numerador como o denominador dessa equação pelo termo $-\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)$, temos que:

$$G = \int_{\frac{p_x^2}{2m^*}}^\infty \frac{\exp\left[-\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)\right]}{1 + \exp\left[-\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)\right]} dE \quad (\text{A-5})$$

fazendo a seguinte mudança de variável: $u = \frac{E - E_F}{kT}$, teremos:

$$du = (k_B T)^{-1} \quad (\text{A-6})$$

Substituindo na equação (A-5) a integral pode ser reescrita na forma:

$$G = \int_{u^*}^{\infty} \frac{\exp(-u)}{1 + \exp(-u)} (k_B T) \cdot (k_B T)^{-1} dE \quad (\text{A-7})$$

Substituindo (A-6) em (A-7), ficaremos:

$$G = \int_{u^*}^{\infty} \frac{\exp(-u)}{1 + \exp(-u)} (k_B T) du \quad (\text{A-8})$$

Lembrando que $u^* = [(p_x^2/2m^*) - E_F]/k_B T$ e, resolvendo a integral, obtemos

$$G = k_B T \ln(1 + \exp(-u)) \quad (\text{A-9})$$

Lembrando que o valor da energia varia $E_i = \frac{E_z - E_F}{k_B T}$ até $E_f = \frac{E_z + eV - E_F}{k_B T}$. Substituindo esses valores em G, vem que:

$$G = k_B T \ln \left[\frac{1 + \exp\left(\frac{(E_F - E_z)}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{(E_F - E_z - eV)}{k_B T}\right)} \right] \quad (\text{A-10})$$

Assim, finalmente, tem-se que a densidade de tunelamento total J, obtida por Esaki e Tsu [1], é dada por

$$J = \frac{m^* e}{2\pi^2 \hbar^3} K_B T \int_0^{\infty} [T(E_z)^* T(E_z)] \ln \left[\frac{1 + \exp\left(\frac{(E_F - E_z)}{K_B T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{(E_F - E_z - eV)}{K_B T}\right)} \right] dE_z \quad (\text{A-11})$$

A EQUAÇÃO DE AIRY

Tomando a equação diferencial linear homogênea de segunda ordem

$$\frac{d^2y(z)}{dz^2} + a(z)\frac{dy(z)}{dz} - b(z)y(z) = 0 \quad (\text{B-1})$$

Iremos resolver essa equação usando o método de Frobenius, onde os coeficientes $a(z)$ e $b(z)$ são funções analíticas de z em um ponto z_0 , sendo assim, suas soluções também serão analíticas em torno desse ponto, então podemos resolver em termos de série de potências centradas em z_0 , ou seja,

$$y(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (z - z_0)^n \quad (\text{B-2})$$

Fazendo os coeficientes da equação (B-1) $a(z) = 0$ e $b(z) = -z$, chegamos a seguinte equação:

$$\frac{d^2y(z)}{dz^2} - zy(z) = 0 \quad (\text{B-3})$$

É conhecida como equação de Airy. Essa equação é encontrada em vários contextos, como no caso dessa dissertação que surge na equação de Schrödinger de uma partícula que se move em uma dimensão sob a ação de um potencial externo V que cresce linearmente, essa equação também é encontrada no estudo da propagação de ondas eletromagnéticas em meios com índice de refração variável, no estudo de difração de luz Ref.[37].

Fazendo a expansão em série de potências em torno de $z_0 = 0$, obtemos

$$y(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n \quad (\text{B-4})$$

Tomando a primeira derivada,

$$\frac{dy(z)}{dz} = \sum_{n=0}^{\infty} n c_n z^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} n c_n z^{n-1} \quad (\text{B-5})$$

Fazendo a seguinte mudança de variável $n \rightarrow n + 1$ obtemos

$$\frac{dy(z)}{dz} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) c_{n+1} z^n \quad (\text{B-6})$$

Para a segunda derivada, teremos

$$\frac{d^2y(z)}{dz^2} = \sum_{n=0}^{\infty} n(n+1) c_{n+1} z^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} n(n+1) c_{n+1} z^{n-1} \quad (\text{B-7})$$

Fazendo a seguinte mudança de variável $n \rightarrow n + 1$ obtemos

$$\frac{d^2y(z)}{dz^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) c_{n+2} z^n \quad (\text{B-8})$$

Substituindo as equações (B-4) e (B-8) na equação B-3, obtemos:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) c_{n+2} z^n - z \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n = 0 \quad (\text{B-9})$$

ou

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) c_{n+2} z^n - \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{n+1} = 0 \quad (\text{B-10})$$

O segundo termo da equação pode ser escrita como

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{n+1} = \sum_{n=1}^{\infty} c_{n-1} z^n \quad (\text{B-11})$$

assim, pela mudança de variável $n \rightarrow n - 1$, a equação de Airy ficará

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) c_{n+2} z^n - \sum_{n=1}^{\infty} c_{n-1} z^n = 0 \quad (\text{B-12})$$

ou seja,

$$2c_2 + \sum_{n=1}^{\infty} [(n+1)(n+2)c_{n+2} - c_{n-1}] z^n = 0 \quad (\text{B-13})$$

com isso, devemos ter

$$c_2 = 0, \quad (n+1)(n+2)c_{n+2} - c_{n-1} = 0, \quad \forall n \geq 1.$$

ou

$$c_2 = 0, \quad c_{n+3} = \frac{c_n}{(n+1)(n+2)}, \quad \forall n \geq 0. \quad (\text{B-14})$$

O conjunto de coeficientes $\{c_n, n = 0, 1, 2, \dots\}$ é a união dos seguintes três conjuntos:

$$\{c_{3k}, k = 0, 1, 2, \dots\} = \{c_0, c_3, c_6, c_9, \dots\}$$

$$\{c_{3k+1}, k = 0, 1, 2, \dots\} = \{c_1, c_4, c_7, c_{10}, \dots\}$$

$$\{c_{3k+2}, k = 0, 1, 2, \dots\} = \{c_2, c_5, c_8, c_{11}, \dots\}$$

Essas relações de recorrência implicam que os coeficientes do primeiro conjunto acima são proporcionais a c_0 , que os coeficientes do segundo conjunto são proporcionais a c_1 e que os coeficientes do terceiro conjunto são proporcionais a c_2 . Porém, como $c_2 = 0$, concluímos que os coeficientes do terceiro conjunto são todos nulos. Logo,

$$y(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{3k} z^{3k} + \sum_{n=1}^{\infty} c_{3k+1} z^{3k+1} \quad (\text{B-15})$$

Pela relação de recorrência (B-14), temos que

$$c_{3k} = \frac{1}{3^k k! (3k-1)!!!} c_0, \quad c_{3k+1} = \frac{1}{3^k k! (3k+1)!!!} c_1, \quad c_{3k+2} = 0.$$

Assim, a solução da equação de Airy é

$$y(z) = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{z^3}{3^k k! (3k-1)!!!} \right] + c_1 \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{z^{3k+1}}{3^k k! (3k+1)!!!} \right] \quad (\text{B-16})$$

Em termos gerais, temos, como classicamente se apresenta como combinação linear de funções de Airy $Ai(z)$ e $Bi(z)$.

$$y(z) = c_0 Ai(z) + c_1 Bi(z) \quad (\text{B-17})$$

ALGORÍTIMO PARA O CÁLCULO DA TRANSMISSIVIDADE EM *Maple15*[®]

```
> with(LinearAlgebra): with(linalg):with(student): > Digits:=16:
> restart:
dados de entrada
> fe2 := 3.81: > V0 := 0.25: > lb := 50.00: > lp := 90.00: > LA := 2*lb+lp:
> mb := 0.078: > mp := 0.041:
> temp := 5.0:
> K:=8.61738*10(-5):
> CTE:=6.9727*106:
> #CTE:=1.61836*(10**10):
> EF:=0.04:
> #EF:=-31.469*(10**(-3));
SUBROTINA CÁLCULO DA TRANSMISSIVIDADE
> COEFT:=proc(VEXT,E)
> local b,L2,L3,L4,k1,k5,c,BETA2,BETA3,BETA4,P2,P3,P4,P5,P6,P7,
> m1,m2,m3,m4,m5,m6,m7,m80,m81,W,MT,W11:
> global T:
> b := -(VEXT)/LA:
> L2 := -(-fe2/(mb*b))(1/3):
> L3 := -(-fe2/(mp*b))(1/3):
> L4 := -(-fe2/(mb*b))(1/3):
> k1 := sqrt(mp*E/fe2):
> k5 := sqrt(mp*(VEXT+E)/fe2):
```

```

> BETA2 := (V0-E)/(L2*b):
> BETA3 := -E/(L3*b):
> BETA4 := (V0-E)/(L4*b):
> P2 := BETA2:
> P3 := lb/L2+BETA2:
> P4 := lb/L3+BETA3:
> P5 := (lb+lp)/L3+BETA3:
> P6 := (lb+lp)/L4+BETA4:
> P7 := (2*lb+lp)/L4+BETA4:
> m1 := ((evalf(Pi))^3)*(k5/k1)*(Matrix(2, 2, {(1, 1) = I*k1, (1, 2) = mp/(L2*mb),
(2, 1) = I*k1, (2, 2) = -mp/(L2*mb)})):
> m2 := Matrix(2, 2, {(1, 1) = AiryAi(P2), (1, 2) = AiryBi(P2), (2, 1) = AiryAi(1,
P2), (2, 2) = AiryBi(1, P2)}):
> m3 := (Matrix(2, 2, {(1, 1) = AiryBi(1, P3), (1, 2) = -L2*mb*AiryBi(P3), (2,
1) = -AiryAi(1, P3), (2, 2) = L2*mb*AiryAi(P3)})):
> m4 := Matrix(2, 2, {(1, 1) = AiryAi(P4), (1, 2) = AiryBi(P4), (2, 1) = AiryAi(1,
P4)/(L3*mp), (2, 2) = AiryBi(1, P4)/(L3*mp)}):
> m5 := (Matrix(2, 2, {(1, 1) = AiryBi(1, P5), (1, 2) = -L3*mp*AiryBi(P5), (2,
1) = -AiryAi(1, P5), (2, 2) = L3*mp*AiryAi(P5)})):
> m6 := Matrix(2, 2, {(1, 1) = AiryAi(P6), (1, 2) = AiryBi(P6), (2, 1) = AiryAi(1,
P6)/(L4*mb), (2, 2) = AiryBi(1, P6)/(L4*mb)}):
> m7 := (Matrix(2, 2, {(1, 1) = AiryBi(1, P7), (1, 2) = -AiryBi(P7), (2, 1) =
-AiryAi(1, P7), (2, 2) = AiryAi(P7)})):
> m80 := Matrix(2, 2, {(1, 1) = -((I/2)/k5), (1, 2) = -((I/2)/k5), (2, 1) =
(1/2)*L4*mb/mp, (2, 2) = -(1/2)*L4*mb/mp}):
> m81 := Matrix(2, 2, {(1, 1) = exp(1/(-I*k5*LA)), (1, 2) = 0, (2, 1) = 0, (2, 2)
= exp(1/(I*k5*LA))}):
> ###Matriz Transferencia###
> MT := evalm('&*(m1,m2,m3,m4,m5,m6,m7,m80,m81)):
> W := Matrix(MT):
> ###elemento de matriz gerada###
> W11 := MT[1,1]:
> ###Coeficiente de Transmissao###
> T := (k5/k1)*(1/(abs(W11))^2):

```



```
> return T:
> end proc:
>
>Subrotina da densidade de corrente, usando o método de integração por trapézio
> FUNCAOJ:=proc(VEXT)
> local a,b,h,n,i,f,E,II,g;
> global FJ;
> (COEFT(VEXT,E));
> g:=T*ln((1.0+exp((EF-E)/(K*temp)))/(1.0+exp((EF-E-VEXT)/(K*temp)))):
> a:=5*(10**(-4)):
> E[0]:=a:
> b:=EF;
>
> E[n]:=b:
>
> f:=unapply(g,E);
> h:=(b-a)/n;
> for i from 1 to n-1 do
> E[i]:=E[i-1]+h
> end do;
> for i from 1 to n do
> II[i]:=evalf(h*(f(E[i-1])+f(E[i]))/2);
> od:
> FJ:=mp*CTE*(sum(II[j],j=1..n));
>
> end:
>return FJ:
```

PROGRAMA PRINCIPAL

```
> arquivo1:=fopen("D:
Dados
corrente 1 poco.dat",WRITE):
```

```
>  
> for VEXT from 0.005 by 0.01 to 2 do:  
> FUNCAOJ(VEXT):  
> print(VEXT,FJ):  
> fprintf(arquivo1,"%f, %f, n", VEXT,FJ):  
> od:  
> fclose(arquivo1):  
> enddocument
```