

Cálculo da Distribuição de Cargas na Banda de Condução em Junções Semicondutoras: um Exercício de Física (Computacional)

(Calculation of the charge distribution in the conduction band in a semiconductor junctions: a (computational) physics exercise)

Adenilson J. Chiquito*

Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos

Rodovia Washington Luiz, Km 235, CP 676, CEP 13565-905 São Carlos - São Paulo

Recebido em 25 de Janeiro, 1999

Neste trabalho, é descrito um modelo eletrostático para o cálculo do perfil da banda de condução em heteroestruturas semicondutoras. Procedimentos numéricos simples abordados em cursos de Física Computacional são utilizados para descrever algumas características de estruturas semicondutoras como a forma da banda de condução quando dois materiais diferentes são unidos.

In this work, we describe the use of physical concepts in the development of a electrical model for explain the behavior of semiconductor junctions. General numerical procedures used in Computational Physics courses are applied to semiconductor structures in order to describe some aspects of charge distribution in the conduction band of an heterostructure.

I Introdução

Após a invenção do transistor em 1948 [1], a pesquisa em semicondutores foi uma das áreas da Física que mais se desenvolveram. Na década de 70 o conceito de heteroestrutura, ou seja, a união de materiais diferentes deu outro grande impulso à Física mas de um modo geral, influenciando não somente a área de semicondutores. O grande desenvolvimento das heteroestruturas se deve à facilidade de controle das propriedades elétricas e ópticas em consequência da flexibilidade da estrutura das bandas [2, 3].

O desenvolvimento dos dispositivos eletrônicos baseados em heteroestruturas alcançou seu atual estágio de sofisticação, em grande parte, graças à união entre experimentos reais e experimentos computacionais (simulações). Simulações numéricas dos comportamentos elétrico e óptico de dispositivos semicondutores constituem-se em uma ferramenta muito útil para o estudo dos fenômenos físicos que se relacionam com as propriedades destes dispositivos, uma vez que a determinação da resposta de um sistema semiconductor à aplicação de uma excitação externa (por exemplo, campo elétrico) pode ser comparada com resultados experimentais. A descrição de uma situação experimental específica através de métodos numéricos pode ser algo complicado, dependendo basicamente da complexidade

do sistema estudado e da exatidão do modelo teórico usado. Por outro lado, o processo de implementação do modelo teórico na descrição de um dado sistema é um exercício rico em conceitos físicos e principalmente, permite a aplicação deles em situações práticas.

Para falarmos de junções semicondutoras ou de um modo geral, de semicondutores, necessitamos de um passo anterior que é o conhecimento do conceito de bandas de energia dos materiais: consideremos um sistema de dois átomos, os quais estão separados por uma distância muito maior que o raio de cada um deles. Todos os níveis eletrônicos deste sistema são duplamente degenerados com relação à troca de partículas. Por exemplo, um elétron que está no nível 1s de um destes átomos também pode ocupar o nível 1s do outro átomo: há duas funções de ondas distintas com a mesma energia, ou degenerescência dupla. Em seguida, aproximando os átomos progressivamente não é mais possível desprezar a interação entre eles: a degenerescência é quebrada e assim aparecem dois níveis com autofunções e energias distintas.

A extensão deste raciocínio é imediata: num sistema de três átomos todos os níveis são triplamente degenerados, com quatro átomos os níveis apresentam degenerescência de ordem quatro, e assim por diante. Se considerarmos n átomos próximos, cada nível atômico será

* e-mail: pajc@power.ufscar.br

expandido em n níveis distintos. Como conseqüência do grande número de átomos presentes em um cristal ($n \approx 10^{23}$) e do arranjo periódico destes átomos formando a rede cristalina, os estados energéticos que descrevem o cristal se organizam de forma peculiar através do surgimento de faixas contínuas destes estados, porém limitadas e separadas uma das outras por faixas de energias proibidas. As faixas de energias permitidas são as chamadas *bandas de energia*.

Na figura 1 temos a representação esquemática da discussão acima. Note que entre as faixas de estados permitidos existe um intervalo sem estados eletrônicos, chamado de “gap” (intervalo proibido) de energia. Dessa forma podemos caracterizar, a grosso modo, os diferentes materiais em condutores (se não há gap ou se é muito pequeno) e isolantes (se o gap é grande). Os semicondutores apresentam gaps com energias da ordem de alguns eV, apresentando tanto características de condutores como de isolantes, em função de parâmetros externos (temperatura, campo elétrico, etc).

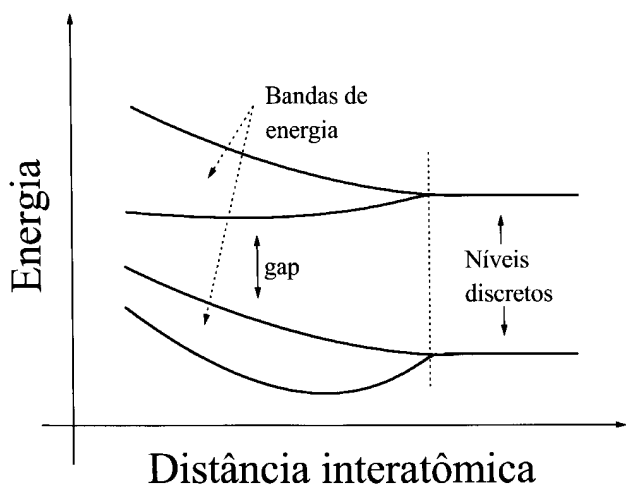


Figura 1. Conforme os átomos se aproximam, a degenerescência dos níveis atômicos é quebrada e as energias são distribuídas em um número de níveis igual ao número de átomos do sistema. Note que as bandas de energia assim formadas podem se cruzar, e se estes níveis estiverem ocupados, teremos um sólido com comportamento metálico.

Neste trabalho, usaremos simulações numéricas para a determinação do perfil da banda de condução característico de duas estruturas semicondutoras: a primeira é formada por um semiconductor uniforme ($GaAs$) e a outra, uma heteroestrutura ($GaAs/AlGaAs$). Nas seções 2 e 3, discutiremos como resolver o problema do cálculo do perfil da banda de condução utilizando conceitos fundamentais como a equação de Poisson. Na seção 4, serão discutidos os métodos numéricos empregados e a implementação dos cálculos. Finalmente, serão apresentados os resultados e discussões juntamente com a conclusão.

II Modelo eletrostático para a distribuição de cargas

Para desenvolver nosso modelo, temos que escolher as quantidades físicas que são importantes para a descrição do potencial elétrico numa estrutura semicondutora. Neste trabalho trataremos apenas a banda de condução, uma vez que considerações e idéias análogas podem ser igualmente aplicadas à banda de valência. Quando falamos em um dispositivo eletrônico, necessariamente temos que considerar a existência de contatos elétricos que permitam a ligação do material semicondutor que constitui o dispositivo com o mundo externo, como por exemplo um circuito experimental para a determinação das propriedades eletrônicas do semicondutor. Estes contatos são geralmente construídos com filmes metálicos depositados sobre o semicondutor[5]. Dois tipos básicos de contatos podem ser utilizados [1]: os contatos ôhmicos ou lineares e os contatos retificadores (contatos Schottky). Vamos considerar o caso simples de um contato metal-semicondutor (MS) do tipo retificador, no qual o semiconductor é uniforme (figura 2). Para a descrição de um sistema no qual existem cargas, um caminho possível é a utilização da equação de Poisson:

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = \frac{\rho}{\epsilon_s} \quad (1)$$

onde Φ é o potencial eletrostático, e ρ a densidade de cargas distribuídas no sistema e ϵ_s é a constante dielétrica. É razoável tratar apenas uma direção porque o campo elétrico sob o metal do contato elétrico é uniforme e perpendicular à superfície [4]. Neste trabalho assumiremos que os semicondutores são do tipo n, ou seja, os portadores de carga são os elétrons.

Na figura 2 está o diagrama da evolução das bandas de energia no espaço real (energia \times distância) para uma junção MS no caso de um contato retificador. Quando não estão em contato (figura 2a), as bandas são planas e cada material possui um potencial químico bem definido; colocados em contato, tem início um processo de busca de equilíbrio (situação na qual o nível de Fermi é contínuo através de toda a estrutura) através da troca de partículas entre os dois materiais. Se as partículas trocadas não tivessem cargas, nada ocorreria com as bandas de condução dos dois materiais. Como os elétrons possuem carga, a separação espacial entre eles produz um campo elétrico que curva as bandas (figura 2b) criando uma região desprovida de elétrons, conhecida como região de depleção.

Para que a equação de Poisson descreva o perfil (em energia) da banda de condução, precisamos estabelecer uma relação entre a energia dos elétrons na banda de

condução (E_c) e o potencial $\Phi(x)$. Note que o potencial varia com a posição, o que implica numa correspondente variação da energia eletrônica na banda de condução (figura 2b):

$$E_c(x) = E_F - q\Phi(x) \quad (2)$$

com q sendo a carga elementar e E_F o nível de Fermi. Continuando, devemos agora determinar qual é a densidade de carga ρ ($= \rho(x)$, por unidade de volume), a qual é composta por elétrons na banda de condução e pela carga dos doadores ionizados. As concentrações de portadores são determinadas normalmente através da estatística de Fermi-Dirac (ou Boltzmann); no nosso caso porém, a análise é mais complicada porque a energia eletrônica depende da posição, como mencionado acima. Assumimos que o semiconductor é do tipo n e assim, a distribuição de elétrons livres na banda de condução é dada por [6]:

$$n(x) = \int_{E_C}^{\infty} g(E, x) f(E, x) dE \quad (3)$$

onde $g(E, x)$ é a densidade de estados e $f(E, x)$ é a bem conhecida função de ocupação de Fermi-Dirac (na referência [7] é dada uma derivação completa da distribuição de Fermi-Dirac e são analisados vários casos limites interessantes para ambas $g(E)$ e $f(E)$).

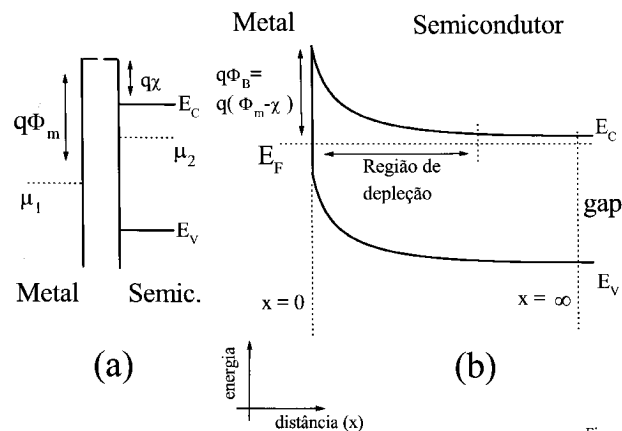


Figura 2

Figura 2. (a) metal e semiconductor como sistemas separados; (b) quando estes dois sistemas são unidos, a troca de cargas entre os dois curva as bandas de energia próximo à interface. Somente as bandas do semiconductor se curvam, a princípio, porque o campo elétrico gerado pela troca de cargas não consegue penetrar no metal, sendo blindado pela grande número de elétrons no metal. Note que estamos trabalhando com um diagrama de energia em função da distância. Neste esquema, Φ_B é a altura da barreira Schottky, Φ_m é a função trabalho do metal e χ é a eletroafinidade do semiconductor.

¹ Doadores são átomos de impurezas colocados intencionalmente em um cristal semiconductor com o objetivo de trazer o nível de Fermi próximo à banda de condução, fornecendo elétrons extras ao semiconductor. Veja por exemplo, as referências [2], [4] ou [6].

² Isto é válido desde que não existam descontinuidades nas bandas de condução e valência. Estas descontinuidades causam o aparecimento de poços de potencial que confinam portadores e a grosso modo, mudam localmente a dimensionalidade do gás eletrônico confinado.

Computando a carga líquida, devemos considerar também os átomos doadores¹ que estão ionizados apresentando, portanto, carga diferente de zero. Assumiremos ainda, que os doadores estão distribuídos uniformemente através de toda a estrutura. Na seção 3 será discutida a utilização de dopagem não uniforme em heteroestruturas, um procedimento usual na construção de dispositivos semicondutores o qual busca otimizar algumas das propriedades destes.

Com esta contribuição, consideramos todas as fontes de carga no nosso sistema [8] e finalmente podemos escrever a equação de Poisson, completa:

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = \frac{\rho(x)}{\epsilon_s} = \frac{q}{\epsilon_s} [n(x) - N_d^+] \quad (4)$$

N_d^+ representando o número de doadores ionizados.

Esta é a forma geral para a equação de Poisson numa estrutura semicondutora, seja formada por camadas de semicondutores diferentes ou não². Temos ainda um ponto a considerar: matematicamente, para a solução de uma equação diferencial de segunda ordem necessitamos de duas condições iniciais para iniciar os cálculos, como o potencial e sua derivada (campo elétrico num dado ponto); por outro lado, como a equação (4) está acoplada a uma situação física real, existem condições de contorno que devem ser satisfeitas. Na interface MS ($x = 0$), o potencial $\Phi(x)$ tem um valor bem determinado, dado pela altura da barreira Schottky Φ_B (figura 2). No interior do semiconductor ($x = \infty$), a neutralidade de carga deve existir e assim o campo elétrico deve ser nulo. Portanto, as duas condições de contorno para nosso problema são:

$$\Phi(x = 0) = \Phi_B \quad (5)$$

$$\left[\frac{d\Phi(x)}{dx} \right]_{x \rightarrow \infty} = 0 \quad (6)$$

Note que (5) e (6) não coexistem no mesmo ponto do eixo x (veja figura 2) o que não nos impede de utilizá-las como “condições iniciais”. Isto ficará mais claro quando desenvolvermos o método numérico para a solução da equação de Poisson.

III Junção metal-semicondutor com uma heteroestrutura

Inicialmente precisamos definir uma heteroestrutura semicondutora: é a união entre dois semicondutores diferentes, basicamente. Na figura 3 temos um esquema do diagrama de bandas de energia para dois semicondutores (de gaps diferentes) isolados (a) e para uma junção em equilíbrio (b). Dois efeitos devem ser considerados quando os semicondutores são colocados em contato: como têm gaps diferentes, a junção originará uma descontinuidade (ΔE_c) nos perfis das bandas de condução e de valência ao longo da direção x ; partículas (portadores) migram de um para outro material até que a condição de equilíbrio seja alcançada com o curvamento das bandas na região da interface (note aqui a semelhança com a junção MS). Assim, na interface, temos:

$$E_{C1} = E_{C2} - \Delta E_C, \quad (7)$$

com E_{C1} e E_{C2} representando o perfil da banda de condução para os materiais de cada lado da interface ($x = x_{inter}$). Considerando contatos elétricos nesta estrutura, o perfil do potencial desde a interface com o metal até o interior do semicondutor é semelhante ao apresentado na figura 3c. Toda a discussão sobre a equação de Poisson continua válida para cada parte da heteroestrutura: nossa tarefa agora é acoplar as soluções da equação de Poisson na interface ($x = x_{inter}$) através das condições de contorno para o potencial e para o campo elétrico. Os potenciais e suas derivadas, para cada lado da junção, estão relacionados de acordo com:

$$\Phi_+ = \Phi_- + \Delta\Phi \quad (8)$$

$$\varepsilon_+ \frac{d\Phi_+}{dx} = \varepsilon_- \frac{d\Phi_-}{dx} + \sigma_{inter} \quad (9)$$

com

$$\Delta\Phi = \frac{\Delta E_c}{q}$$

Os subscritos $+, -$ indicam os lados esquerdo e direito da interface e σ_{inter} é a densidade de carga superficial acumulada na interface. A primeira condição (equação (8)) diz respeito à continuidade do potencial, enquanto que a segunda (equação (9)) estabelece que o campo elétrico na interface é descontínuo se houver acumulação de carga na região da interface. Nós consideraremos o caso em que σ_{inter} é nulo, para simplificar a utilização da condição de contorno (9). De maneira geral, σ_{inter} não é nulo (ver seção 4) e nesta região

ocorre quantização do movimento eletrônico na direção de crescimento da estrutura (direção x , na figura 3). Esse assunto, muito rico em conceitos físicos, será discutido futuramente.

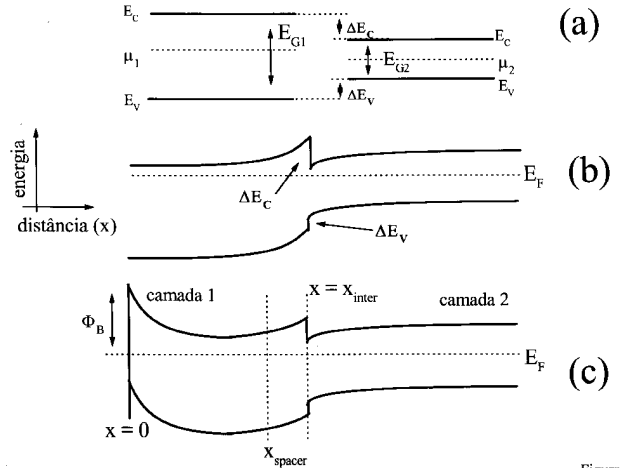


Figura 3

Figura 3. (a) dois semicondutores separados, caracterizados pelo seus respectivos potenciais químicos e energia dos gaps; (b) quando unidos, ocorre troca de cargas e o sistema caminha para a situação onde há um potencial químico médio; (c) junção metal-heteroestrutura.

Como já citado, nossos cálculos consideram que a dopagem das estruturas é uniforme. Entretanto, é interessante notar que em dispositivos como o apresentado esquematicamente na figura 3c, faz-se uso de dopagem não uniforme para incrementar algumas propriedades destas estruturas. O movimento de cargas paralelo à interface entre os dois semicondutores (figura 3c) é quase livre, sendo limitado em parte pelo espalhamento coulombiano (interação entre os átomos doadores ionizados e os elétrons) e pelo espalhamento por fônons [6]. Para diminuir o espalhamento coulombiano, temos que separar as cargas positivas (doadores ionizados) das negativas (elétrons), colocando os doadores a uma distância apropriada da interface: para isto, é incluída no semicondutor de maior gap uma camada espaçadora não dopada (região delimitada por x_{spacer} na figura 3c): os elétrons da região $x < x_{spacer}$ dopada, são transferidos para a interface e ficam separados espacialmente dos doadores ionizados por um distância igual a $x_{inter} - x_{spacer}$ (alternativamente, pode-se incluir uma camada dopada no semicondutor de gap maior não dopado). Com a inclusão desta barreira espacial, o espalhamento coulombiano pode ser praticamente eliminado e a mobilidade eletrônica aumenta significativamente [10]. A largura da camada espaçadora deve ser cuidadosamente determinada, pois se for muito grande torna-se difícil a passagem de elétrons da região doadora para a interface. Para os nossos cálculos a inclusão da camada não dopada pode ser facilmente realizada

se dividirmos o semiconductor de gap maior em duas regiões que são idênticas, diferindo apenas pela dopagem. Assim para levar em conta a camada não dopada, a equação de Poisson deve considerar a dopagem nula se $x_{spacer} < x < x_{inter}$.

IV Solução da equação de Poisson

Construído o modelo, temos que implementá-lo computacionalmente visto que a solução analítica para a equação de Poisson neste sistema somente pode ser realizada em alguns casos limites (por exemplo, quando usamos a distribuição de Boltzmann). Uma prática comum quando da solução de equações que descrevem sistemas físicos é tornar adimensionais todas as quantidades envolvidas nos cálculos evitando assim, erros numéricos quando são tratadas constantes infinitesimais como a constante de Planck [9]. Vamos reescrever a equação (4) numa forma mais conveniente (ver equação (2)), definindo:

$$u(x) = \frac{E_F - E_c(x)}{kT} = \frac{q\Phi(x)}{kT} \quad (10)$$

A substituição da equação (10) na equação de Poisson (equação 4) fornece:

$$\frac{kT}{q} \left(\frac{d^2u}{dx^2} \right) = \frac{q}{\epsilon_s} [n(x, u) - N_d^+(u)] \quad (11)$$

Da mesma forma, as condições de contorno nas interfaces (eqs. (5), (6), (8) e (9)) devem ser reescritas aplicando-se as mesmas transformações:

$$u(x=0) = \frac{q\Phi_B}{kT} \quad (12)$$

$$u(\infty) = \frac{q(cte)}{kT}, \left[\frac{du(x)}{dx} \right]_{x \rightarrow \infty} = 0 \quad (13)$$

$$u_+ = u_- + \frac{q\Delta\Phi}{kT} \quad (14)$$

$$\frac{du_+}{dx} = \frac{du_-}{dx} \quad (15)$$

considerando, por simplicidade que

$$\epsilon_s^+ \approx \epsilon_s^- \quad (16)$$

(a igualdade entre as constantes dielétricas é razoável para sistemas *GaAs/AlGaAs*, como o que será tratado aqui [10]).

Nosso problema reduziu-se a resolver a equação (11) por um método numérico qualquer. Entretanto, para otimizar os procedimentos numéricos ao máximo podemos escolher mais cuidadosamente aquele a ser usado. Novamente será tratado o caso de um contato MS no início e depois a discussão será estendida a uma heteroestrutura.

Um método interessante é o das diferenças finitas: vamos discretizar o problema, ou seja, montar uma grade de valores para a função $u(x)$, desde a interface MS até um ponto no interior do semiconductor, e com espaçamento dado por Δx . Não conhecemos os valores intermediários de $u(x)$ e por isso temos que usar um procedimento pelo qual, partindo de uma das condições de contorno, o ponto imediatamente seguinte seja calculado, e assim por diante. Usando uma expansão em série de Taylor, a derivada de segunda ordem presente na equação (11) pode ser colocada em termos das diferenças entre os valores da função $u(x)$, espaçados por Δx :

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{u(x + \Delta x) - 2u(x) + u(x - \Delta x)}{\Delta x^2} \quad (17)$$

e assim, a equação (11) fica:

$$\frac{u(x + \Delta x) - 2u(x) + u(x - \Delta x)}{\Delta x^2} = \frac{q}{\epsilon_s} [n(x, u) - N_d^+(u)] \quad (18)$$

A discretização da equação diferencial (11) deu origem a um sistema de N equações acopladas, que podem ser representadas como uma matriz. Para ilustração, vamos considerar $N = 5$:

$$\begin{aligned} u(1) &= u_{metal/semic} \\ u(1) - 2u(2) + u(3) &= \frac{\rho(2)}{\epsilon_s} \Delta x^2 \\ u(2) - 2u(3) + u(4) &= \frac{\rho(3)}{\epsilon_s} \Delta x^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 u(3) - 2u(4) + u(5) &= \frac{\rho(4)}{\varepsilon_s} \Delta x^2 \\
 u(5) &= u_\infty
 \end{aligned}$$

ou

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u(1) \\ u(2) \\ u(3) \\ u(4) \\ u(5) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{metal/semic} \\ \frac{\rho(2)}{\varepsilon_s} \Delta x^2 \\ \frac{\rho(3)}{\varepsilon_s} \Delta x^2 \\ \frac{\rho(4)}{\varepsilon_s} \Delta x^2 \\ u_\infty \end{bmatrix} \quad (19)$$

onde $u_{metal/semic}$ e u_∞ representam os potenciais na interface MS e no infinito, respectivamente.

Note que a matriz está colocada numa forma tri-diagonal, na qual somente três diagonais não são nulas. Matrizes deste tipo podem ser resolvidas eficientemente, usando-se métodos compactos como o da eliminação de Gauss (no caso de equações lineares) ou, por exemplo, o método Newton para sistemas não lineares. Em nosso caso, as equações são todas não lineares, uma vez que a densidade de carga depende do potencial (veja equação (11)) e somente um método iterativo, que a cada iteração atualiza todas as quantidades envolvidas no problema em função do resultado final do passo anterior, pode fornecer resultados corretos. No apêndice A está resumida a idéia do método de Newton quando aplicado na resolução de sistemas de equações.

Novamente, todo o desenvolvimento acima permanece válido no caso de uma heteroestrutura. A única diferença é a inclusão de uma interface na região do semicondutor. Isto pode ser feito de vários modos, como por exemplo, incluir a descontinuidade das bandas diretamente na discretização da equação de Poisson, tornando o modelo mais compacto, e ligeiramente mais difícil para a implementação. No nosso caso, foi adotada uma forma mais direta para resolver o problema da interface, mas que consome mais tempo: o sistema foi separado em dois outros, cada um abrangendo um semicondutor diferente (veja a figura 3). Dessa forma, podemos igualmente aplicar o método de discretização para as duas camadas e impor que o potencial em $x = x_{inter}$ para ambas seja coerente com as condições (14) e (15).

O procedimento geral para o cálculo pode ser assim resumido:

- 1 fixamos a temperatura do sistema e o valor da altura da barreira Schottky, a largura das camadas e a dopagem da estrutura (N_D^+); em seguida calculamos através da equação (12), o valor do potencial reduzido $u_{metal/semic}$ na interface MS;
- 2 calculamos o valor do potencial reduzido no in-

finito, considerando o nível de Fermi como referência. Para isso, pode-se supor que os elétrons da banda de condução no interior do semicondutor estejam sujeitos à distribuição de Boltzmann e assim, $u_\infty = -\ln(\frac{N_C}{N_D^+})$, sendo N_C é o número de estados na banda de condução (isso é válido se $N_C > N_D^+$ [5]);

- 3 escolhemos um valor para o potencial, digamos $u = u_-^{teste}$ (um valor apropriado seria $\Delta\Phi$, por exemplo) em $x = x_{inter}$, já que *a priori*, não o conhecemos;
- 4 integramos a equação de Poisson desde $x = 0$, com $u = u_{metal/semic}$ até $x = x_{inter}$ com $u = u_-^{teste}$; em seguida, partimos para o outro lado e integramos desde $x = \infty$ até $x = x_{inter}$ onde colocamos $u_+ = u_-^{teste} - \frac{q\Delta\Phi}{kT}$;
- 5 testamos a condição (15) dentro de uma precisão previamente estipulada. Se não for verificada (o que normalmente acontece), escolhemos um novo valor para u_-^{teste} , voltamos ao passo 3 e repetimos o procedimento subsequente até que a condição acima seja verificada.

Este procedimento necessita de várias iterações até que a desejada precisão seja alcançada. O resultado do cálculo é a forma do potencial reduzido $u(x)$ ao longo da estrutura, que pode ser transformado no potencial real ($\Phi(x)$) mediante o uso da equação (10). Usando agora a equação (2) conseguimos, finalmente, determinar a forma do perfil da banda de condução.

Finalmente, vamos aplicar os cálculos descritos acima em estruturas reais, como as representadas na figura 4a: a primeira é uma estrutura simples com apenas um tipo semicondutor (*GaAs*); a outra é uma heteroestrutura formada por duas camadas de semicondutores diferentes (*AlGaAs* e *GaAs*). O perfil da banda de condução calculada como função da coordenada x podem ser vista, para as duas estruturas, na figura 4b.

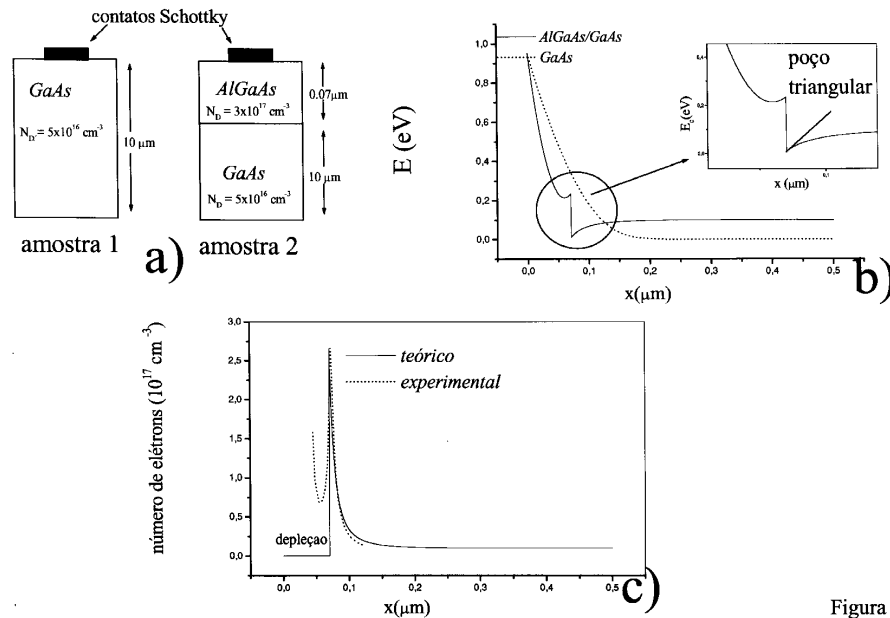


Figura 4

Figura 4. (a) Amostras usadas para os cálculos; (b) Perfil da banda de condução para a amostra de *GaAs* (linha pontilhada) e para a heteroestrutura de *AlGaAs/GaAs* (linha sólida), ambas definidas na figura 4a. Note a descontinuidade na banda de condução da heteroestrutura, representando a diferença das energias do gap dos dois materiais. A descontinuidade na banda de condução da junção *AlGaAs/GaAs* está ampliada no esquema em destaque; (c) Perfis de distribuição eletrônica calculada usando o potencial eletrônico para a amostra de *AlGaAs/GaAs* e experimental, usando medidas de capacitância.

A forma do fundo da banda de condução para a heteroestrutura (linha sólida na figura 4b) mostra um comportamento interessante na região da interface entre as camadas de *GaAs* e *AlGaAs*: nesta posição, as cargas estão sujeitas a um potencial aproximadamente triangular (veja o esquema em destaque na figura 4b). Quando o tamanho desta região é comparável ao comprimento de de Broglie para os portadores ($\sim 100\text{\AA}$), este potencial triangular se comporta como um poço de potencial quântico. Dessa forma, nossa suposição de que a carga acumulada na região da interface não necessitava ser levada em conta para o cálculo do perfil da banda de condução é válida apenas numa primeira aproximação quando efeitos quânticos podem ser desprezados. Por outro lado, quando não é possível desprezá-los, devemos considerar que as cargas estão localizadas em níveis de energia discretos, originados pelo confinamento quântico. Para o correto tratamento deste problema temos que resolver de forma auto-consistente as equações de Schroedinger e Poisson: a carga da região do confinamento, que deve ser computada pela equação de Poisson, depende da presença de elétrons na região do poço determinada pela equação de Schroedinger; por sua vez, a equação de Schroedinger depende da forma do potencial confinante, calculado pela equação de Poisson. Este problema é relativamente complicado fugindo do objetivo deste trabalho; podemos considerar o modelo usado como semi-clássico por não levar em conta as contribuições quânticas na

interface entre os dois semicondutores.

Na figura 4c temos a distribuição dos elétrons por unidade de volume ao longo da coordenada x para a heteroestrutura. É interessante notar que a concentração de cargas na região da interface entre as camadas de *AlGaAs* e *GaAs* é pronunciada, fato esperado se olharmos para a forma peculiar do potencial nesta região. Note ainda, que na figura 4c, a distribuição apresenta próximo à interface MS uma região onde o número de elétrons por unidade de volume é muito pequeno: esta é a região de depleção citada na seção 2, fruto da redistribuição de cargas nas proximidades desta interface. A título de comparação, a distribuição eletrônica pode ser determinada experimentalmente através de algumas técnicas como medidas de capacitância ou suas derivadas e espectroscopia de massa de íons secundários (SIMS) [12, 13, 14]. Na figura 4c (linha pontilhada), vemos a distribuição eletrônica para uma heteroestrutura semelhante à usada nos cálculos. Resumidamente, a distribuição experimental pode ser assim determinada: a capacitância diferencial da junção MS é medida para diferentes voltagens aplicadas ao sistema e então, podemos encontrar o perfil de distribuição de elétrons com ajuda das seguintes equações [15]:

$$n(w) = \frac{C^3}{qS\varepsilon_s} \left(\frac{dC}{dV} \right)^{-1} \quad (20)$$

$$w = \frac{\varepsilon_s S}{C} \quad (21)$$

onde $n(w)$ é a concentração eletrônica na posição w medida a partir da interface MS, C é a capacitância, S a área do contato Schottky. Com estas duas equações podemos determinar qual é a concentração de elétrons num determinado ponto da estrutura (w) e qual é a distância deste ponto em relação à interface MS.

É interessante notar que todos os cálculos anteriores foram realizados para um sistema isolado, sem a influência de campos elétricos externos. Considere agora que aplicamos um potencial externo na junção metal-heteroestrutura: haverá uma variação adicional na forma da banda de condução, dependendo essencialmente da intensidade e direção do campo elétrico aplicado, como mostrado na figura 5a. Na figura 5b, aparece a distribuição eletrônica na heteroestrutura para três voltagens aplicadas (V_B), mostrando claramente uma variação sensível no número de elétrons localizados na interface $AlGaAs/GaAs$. Portanto, uma variação no potencial aplicado à junção metal-heteroestrutura pode determinar a acumulação ou o esvaziamento do poço triangular com elétrons. Esta é

a base de operação de um transistor conhecido como *HEMT* (*High Electron Mobility Transistor*). Para compreender melhor esta situação, vamos considerar a junção metal-heteroestrutura como uma estrutura tridimensional (figura 5c). Analisando a estrutura deste ponto de vista, o poço de potencial é na realidade um canal condutor que se estende nas direções z, y . Vamos inserir, como mostrado na figura 5c, dois contatos elétricos E e C nas bordas deste canal; o contato Schottky será chamado de B. Aplicando um potencial entre os terminais E e C (V_{EC}), teremos uma corrente circulando pelo canal eletrônico dependente do número de elétrons presentes (lembre que $j = nev$ [16]). Por outro lado, sabemos que a variação do potencial aplicado no contato Schottky (B) controla a quantidade de elétrons no canal (figura 5c), e portanto, poderemos controlar a corrente entre C e E, pela variação do potencial no terminal B: isto é o efeito transistor [1]. A alta mobilidade a que se refere a sigla *HEMT*, vem do fato dos elétrons moverem-se quase livremente no canal eletrônico [17].

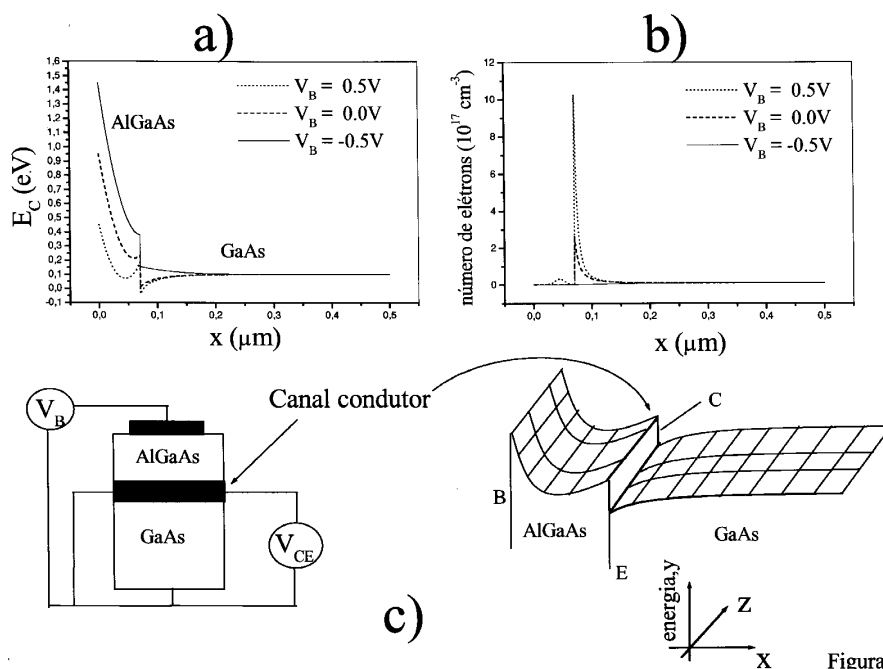


Figura 5. (a) Perfil do banda de condução para a junção $AlGaAs/GaAs$ em três polarizações diferentes. Note que para $V_B = -0.5V$ não temos mais um poço de potencial; (b) Distribuição eletrônica correspondente. Como o número de elétrons na interface entre $AlGaAs$ e $GaAs$ depende do perfil da banda de condução, para $V_B = 0.5V$, aparece um aumento da quantidade de elétrons na região da $AlGaAs$, próxima à interface. Para $V_B = -0.5V$ como era esperado, a concentração eletrônica no poço é muito pequena; (c) esquemas simplificados de um transistor *HEMT*, mostrando a configuração dos terminais (B,C e E) e o diagrama de energia.

V Conclusão

Neste trabalho fizemos um estudo dirigido do processo de modelamento de uma situação física real como a dis-

tribuição de cargas em um material semiconductor, partindo de conceitos baseados na formação das bandas de energia e usando ferramentas simples (equação de Poisson). Para aplicar o modelo, foi introduzido o con-

ceito de discretização de um sistema qualquer para que se possa utilizar métodos mais complexos de solução de equações diferenciais, como o método de Newton. Apesar de um modelo simples, nossos resultados são consistentes com os obtidos com modelos mais gerais e complexos.

Apêndice: Método de Newton

A equação de Poisson pode ser escrita numa forma mais geral, como mostrado pela seguinte equação:

$$\frac{y(x_i + \Delta x) - 2y(x_i) + y(x_i - \Delta x)}{\Delta x^2} = f\left(x_i, y(x_i), \frac{y(x_i + \Delta x) - y(x_i - \Delta x)}{2\Delta x}\right) \quad (24)$$

com $i = 1, 2, 3, \dots, N$. Dessa forma, temos um sistema de $N \times N$ equações para ser resolvido, idêntico ao tratado na seção 4. Para esta tarefa, podemos usar o método de Newton, que pode ser “facilmente” derivado. Quando queremos encontrar a raiz de uma equação transcendental, por exemplo, podemos usar o bem conhecido método de Newton, no qual as raízes são obtidas por sucessivas iterações da equação abaixo:

$$x_i = x_0 - \frac{f(x)}{f'(x)} \quad (25)$$

Analogamente, para achar as soluções de um sistema de equações podemos generalizar (25) escrevendo:

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \Phi(\mathbf{x})\mathbf{F}(\mathbf{x}) \quad (26)$$

escolhendo $\Phi(x) = J(x)$. Aqui, $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ representa o conjunto de soluções de $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, assumindo $\Phi(\mathbf{x})$ não singular. A matriz $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ é conhecida como matriz Jacobiana, muito usada em transformações de coordenadas e cálculos de integrais multidimensionais e pode ser escrita como:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (27)$$

Evidentemente, a derivação feita aqui não é de maneira alguma formal, mas a analogia direta entre o processo de encontrar uma raiz ou um conjunto de raízes permanece válida. A implementação numérica é similar àquela usada no caso do método de Newton “escalar”.

$$y'' = f(x, y, y') \quad (22)$$

definida dentro do intervalo $a \leq x \leq b$ e com $y(a) = \alpha$ e $y(b) = \beta$. Vamos supor que $f(x, y, y')$ é bem comportada e que portanto, possamos definir:

$$f_y = \frac{\partial f}{\partial y} \quad \text{e} \quad f_{y'} = \frac{\partial f}{\partial y'} \quad (23)$$

Usando a expressão (17), podemos reescrever a equação (22) como:

References

- [1] “O transistor, 50 anos”, Adenilson J. Chiquito e Francesco Lanciotti Jr., Rev. Bras. de Ensino de Física, 20(4), dezembro de 1998.
- [2] “*Physics of Semiconductors and their Heterostructures*”, Jasprit Singh, McGraw-Hill series in electrical and computer engineering, New York (1993).
- [3] “Superredes: Harmonia das bandas cristalinas”, E. C. Valadares, M. V. B. Moreira, J. C. Bezerra Filho e I. F. L. Dias, Ciência Hoje 6(35), setembro de 1987 e “Dispositivos em escala atômica”, E. C. Valadares, L. A. Cury e M. Henini, Ciência Hoje 18(106) (1995).
- [4] Na realidade, deveríamos considerar a forma do campo elétrico nas bordas do contato, mas na prática o diâmetro do contato é sempre escolhido para ser pequeno se comparado com a dimensão da amostra na qual foi depositado, ou seja, desprezamos completamente os efeitos de borda no contato.
- [5] “*Physics of Semiconductors Devices*”, S.M. Sze, John Wiley and Sons, New York (1981).
- [6] “*Solid State Physics*” N.W. Ashcroft and N. D. Mermin, Saunders College Publishing, Fort Worth, (1976).
- [7] “*Semiconductor Statistics*”, J. S. Blakmore, Dover Publications, New York (1987).
- [8] Como estamos tratando de uma estrutura com dopagem tipo n, desprezamos completamente o efeito dos buracos, que têm uma densidade muito pequena para estas estruturas.
- [9] “O potencial de Lennard-Jones: aplicação à moléculas diatômicas”, A. J. Chiquito e N. G. de Almeida, aceito para publicação na Revista Brasileira de Ensino de Física.
- [10] “*Doping in III-V Semiconductors*”, E. F. Schubert, Cambridge University Press, Cambridge (1993).

- [11] “*Numerical Analysis*”, R. L. Burden and J. D. Faires, PWS-Kent, Boston (1989), capítulo 11.
- [12] “*Metal Semiconductors Contacts*”, E. H. Rhoderick and R. H. Williams, Clarendon Press, Oxford (1988).
- [13] P. Blood, *Semiconductors Science and Technology* **1**, 1 (1986).
- [14] “Caracterização Elétrica de Estruturas Semicondutoras - CV Profiling” Adenilson J. Chiquito, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de São Carlos, março 1997.
- [15] W. C. Johnson and P.T. Panousis, *IEEE Trans. Elect. Devices* **ED-18**(10), 965 (1971).
- [16] “*Física*”, D. Halliday and R. Resnick, Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro (1991).
- [17] “*Quantum Semiconductor Structures*”, C. Weisbuch and Borge Vinter, Academic Press, Boston (1991).