**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
INSTITUTO DE QUÍMICA DE SÃO CARLOS**

**EFEITO DE CAMPO EM HETEROESTRUTURAS
SEMICONDUCTORAS DE DISPOSITIVOS
ELETRÔNICOS QUÂNTICOS**

José Eduardo Manzoli

Tese apresentada à área Interunidades –
Escola de Engenharia de São Carlos
(EESC), Instituto de Física de São Carlos
(IFSC), Instituto de Química de São Carlos
(IQSC) – **Universidade de São Paulo
(USP)**, como parte dos requisitos para
obtenção do título de *Doutor em Ciência e
Engenharia de Materiais*.

ORIENTADOR: Prof. Dr. Oscar Hipólito

**São Carlos
1998**

Manzoli, José Eduardo

Efeito de Campo em Heteroestruturas Semicondutoras de Dispositivos Eletrônicos Quânticos / Manzoli José Eduardo. -- São Carlos, 1998.

77p.

Tese (Doutorado) -- Ciência e Engenharia de Materiais, 1998

Orientador: Prof. Dr. Oscar Hipólito

1. Física da Matéria Condensada (Semicondutores). 2. Engenharia de Materiais.

I. Título.

Ciência e Engenharia de Materiais

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Escola de Engenharia de São Carlos

Instituto de Física de São Carlos

Instituto de Química de São Carlos

CAIXA POSTAL - 369

CEP 13560-970 - São Carlos/SP - Brasil

Tel/Fax: (016) 273-9777

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE JOSÉ EDUARDO MANZOLI APRESENTADA A ÁREA INTERUNIDADES EM CIÊNCIA E ENGENHARIA DE MATERIAIS, DA EESC-IFSC-IQSC, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 06/03/1998.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Oscar Hipólito (UMC)

Prof. Dr. Francisco Eduardo Gontijo Guimarães (IFSC/USP)

Prof. Dr. Valmir Antonio Chitta (USF)

Prof. Dr. Murilo Araújo Romero (EESC/USP)

Prof. Dr. Fernando Cerdeira (UNICAMP)

**Ao Enzo,
à Tata,
ao pai e à mãe**

Agradecimentos

À **FAPESP**, *Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo*, que me deu a tranquilidade para a pesquisa durante todos estes anos, principalmente nos momentos difíceis.

Ao **CESUP-UFRGS**, *Centro Nacional de Supercomputação da Universidade Federal do Rio Grande do Sul*, onde o cálculo "pesado" foi feito via INTERNET no super-computador CRAY-YMP2E.

Ao professor Oscar, que me fez sentir seguro o suficiente à respeito de minhas idéias para suportar as várias "pressões" do doutorado.

Apenas aos professores com quem pude ter contato aberto nas situações de dúvida, principalmente ao Murilo, ao Chico, ao Márcio e ao Salviano.

Aos amigos, que são tantos, pela troca de conhecimentos, exemplos de conduta e/ou postura diante dos problemas e convívio relaxante.

Se algo colaborou para prejudicar o andamento deste trabalho, vale o pensamento:

"... aquilo que não nos destrói, nos torna mais fortes."

F. Nietzsche

SUMÁRIO

RESUMO	i
ABSTRACT	ii
1. INTRODUÇÃO	01
2. CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS	05
2.1 Hamiltoniano	06
2.2 Equações que Descrevem o Sistema	08
2.3 Densidade de Doadores Ionizados	09
2.4 Densidade Eletrônica	11
2.5 Nível de Fermi (Potencial Químico)	12
2.6 Transcondutância x Capacitância	15
2.7 Frequência de Corte	16
3. MÉTODO NUMÉRICO	18
3.1 Diferenças Finitas	18
3.2 “Split-Operator” em Tempo Real (Evolução Temporal)	20
3.3 Tempo Imaginário (Auto-Estados)	21
4. HEMT OU MODFET	25
4.1 O Efeito do Campo	28
5. DELTA-FET DE SILÍCIO	34
6. PHEMT (HEMT PSEUDOMORFO)	44
6.1 PHEMT Baseado em GaAs	47
6.2 PHEMT Baseado em InP	49
7. SUPER-REDE FINITA	56
8. CONCLUSÕES	64
APÊNDICE	69
REFERÊNCIAS	71

RESUMO

Os efeitos do campo elétrico, que surgem pela aplicação de uma voltagem no contato Schottky, na estrutura eletrônica de heteroestruturas semicondutoras utilizadas nos recentes transistores de efeito de campo (FET) e numa super-rede finita são simulados numericamente. Estas heteroestruturas apresentam poços quânticos bidimensionais e camadas que podem estar tensionadas pela diferença entre os parâmetros de rede cristalinos. Através de um procedimento numérico auto-consistente várias grandezas físicas são estudadas, os auto-estados e as densidades eletrônicas nas sub-bandas são calculadas. A variação destas grandezas é associada à capacitância e à transcondutância intrínseca, em função da voltagem no gate. Os resultados da simulação são comparados aos dados experimentais. Este procedimento possibilita a compreensão dos fenômenos quânticos envolvidos com a previsão de certas características de dispositivos sem a necessidade prévia de sua produção e testes.

Palavras-chave: simulação, HEMT, FET, estrutura eletrônica, capacitância

ABSTRACT

Electric field effects on the electronic characteristics of semiconductor heterostructures used in recent field effect transistors (FETs) and in a finite superlattice are numerically simulated. This field is due to a voltage bias applied on a Schottky contact. These heterostructures have two-dimensional quantum wells and layers which can be stressed due to different lattice parameters of the materials involved. Through a numerical self-consistent procedure, many physical quantities are studied, such as the eigen-states and the electronic densities at the sub-bands. The changes in such quantities are associated to the capacitance and to the intrinsic transconductance, as a function of the gate voltage. The results are compared to experimental data. This procedure allows the comprehension of the quantum phenomena involved and the prediction of device characteristics, without the need to fabricate and test it.

Key-words: simulation, HEMT, FET, electronic structure, capacitance

1. Introdução

Na segunda metade deste século os materiais com aplicações em eletrônica tornaram-se fundamentais para o domínio tecnológico e consequentemente econômico e político. Ocupando a posição mais importante na eletrônica atual estão os materiais semicondutores. Dentre estes, Germânio e Silício têm sido os principais materiais de toda a indústria de dispositivos. Recentemente novos materiais semicondutores, como o Arseneto de Gálio (GaAs), o Fosfeto de Índio (InP), as ligas ternárias $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ e quaternárias $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ [01], entre outros, vêm apresentando crescente aplicação tecnológica e comercial.

Devido às suas características de transporte eletrônico, onde se destaca a alta mobilidade, e à possibilidade de integração óptica, os materiais semicondutores na forma cristalina têm sido os mais estudados nas últimas décadas. Estes, bem como suas estruturas híbridas (heteroestruturas), vêm sendo produzidos cada vez mais puros e controlados pelas modernas técnicas epitaxiais (MBE, MOCVD, VPE, etc). Neste trabalho procuramos abordar dispositivos que possam ser produzidos por diferentes tipos de materiais, devido à versatilidade do procedimento de simulação.

De notável interesse são os dispositivos que utilizam heteroestruturas de baixa dimensionalidade, principalmente com poços quânticos, pois têm um desempenho muito elevado, com menores perdas de energia no transporte eletrônico e maior velocidade de resposta a sinais elétricos devido ao menor espalhamento e às pequenas extensões envolvidas. Os monocristais destes dispositivos apresentam perfis de potencial que confinam os portadores em dimensões comparáveis ao

comprimento de onda de *de Broglie*, e muitos deles têm suas propriedades não explicáveis numa abordagem semiclássica, necessitando um tratamento puramente quântico. Todas as heteroestruturas que estudamos aqui possuem poços quânticos.

Neste trabalho simulamos o comportamento de várias heteroestruturas semicondutoras quânticas quando submetidas a um campo elétrico gerado por uma voltagem aplicada por meio de contato Schottky. Deve-se notar que, quando em operação, estes dispositivos têm o efeito do campo elétrico sobre a heteroestrutura como o principal agente atuante em sua performance.

Tratamos o elétron como uma onda (função envelope) e calculamos suas características quânticas em função da voltagem de gate. Implicações tecnológicas são discutidas, tais como a maneira como a curva de transcondutância intrínseca pode ser alterada, devido às modificações na dopagem ou no "stress" cristalino; ou alterações na voltagem que causam a ausência de portadores no canal de condução em δ -FETs, aumentando-se o número de deltas.

No capítulo 2 revemos alguns conceitos teóricos importantes para facilitar a leitura deste trabalho, como as equações diferenciais envolvidas, a expressão do Hamiltoniano na base espacial, a maneira como calculamos o nível de Fermi e a razão da possibilidade de se relacionar a transcondutância com a capacitância.

Descrevemos o *simulador* utilizado no capítulo 3. Este consiste no procedimento numérico auto-consistente que fornece as características dos dispositivos sob diversas condições de voltagem, temperatura, dopagem, etc. Como inovação na forma de simulação de dispositivos, utilizamos o algoritmo conhecido como "Split-Operator" [02-04] para a resolução da equação de Schrödinger, por ser de fácil implementação e

utilizável tanto na evolução de uma função de onda em tempo real como para cálculos de auto-funções. Também é inédita a utilização do Hamiltoniano que propomos para dispositivos onde a heteroestrutura cristalina está tensionada.

Simulamos a curva de *capacitância-voltagem de gate* de um HEMT (*High Electron Mobility Transistor*) no capítulo 4. Note que utilizaremos os termos *voltagem de gate*, *tensão no gate*, *tensão gate-source* ou *voltagem gate-source* indistintamente, pois certas terminologias são mais apropriadas a físicos do que a engenheiros. Este transistor de efeito de campo, FET (*Field Effect Transistor*), utiliza uma única heterojunção GaAs/AlGaAs. Muito mais rápido e apresentando menor figura de ruído que os MOSFET e MESFET anteriores, este dispositivo é amplamente utilizado em circuitos que operam em micro-ondas, principalmente em telecomunicações [05]. Proposto e construído pela primeira vez na década passada, as simulações computacionais auxiliaram muito a evolução dessa heterojunção [06]. Nosso cálculo numérico reproduziu muito bem os resultados experimentais.

No capítulo 5 estudamos δ -FETs [07-10] de Silício cristalino crescidos por MBE, o que faz deste um novo material [09-11]. O termo delta refere-se à tradicional forma de dopagem planar (tipo- δ). Neste caso, é comum utilizar-se Antimônio como dopante doador no Silício. Analisamos, apenas por simulação, de uma a três deltas acopladas no cristal, tanto à 77K quanto à 300K, e comparamos os resultados.

No capítulo 6 simulamos a transcondutância intrínseca através da capacitância-voltagem de gate de PHEMTs (HEMTs *Pseudomorfos*). Todos estes HEMTs são os mais modernos FETs atualmente pesquisados, de menor ruído e que detêm os recordes de frequência de utilização de um transistor, 600GHz, enquanto ainda há ganho de amplificação [12]. Nós analisamos uma heteroestrutura cristalina crescida sobre substrato de GaAs

e outra sobre InP, ambas sob "stress". Na última também fizemos medidas experimentais da transcondutância extrínseca, comparando os resultados com a simulação numérica.

O capítulo 7 é dedicado a uma heteroestrutura que propusemos como um possível emissor infra-vermelho por oscilação de carga sem bombeamento ótico, que chamamos de super-rede finita. Para análise desta heteroestrutura tanto os algoritmos em tempo real (evolução) como em tempo imaginário (auto-funções) foram utilizados.

As conclusões deste trabalho são apresentadas no capítulo 8. Lá concluímos que o procedimento de simulação numérica é versátil e eficiente para o estudo de diversas heteroestruturas semicondutoras que compõe modernos dispositivos quânticos. Tais heteroestruturas podem ou não conter camadas cristalinas tensionadas. O efeito do campo elétrico externo sobre os sistemas é simulado numericamente com concordância muito boa com os experimentos. Estas simulações permitem prever propriedades de dispositivos com interesse tecnológico quando são alteradas características como, por exemplo, dopagem e espessura das camadas dos cristais.

2. CONSIDERAÇÕES TEÓRICAS

Aqui descrevemos o formalismo matemático utilizado nos cálculos da estrutura eletrônica destas modernas heteroestruturas semicondutoras. Apresentamos apenas os tópicos essenciais na descrição do procedimento numérico para o cálculo preciso do potencial efetivo, das auto-funções, suas sub-bandas e populações eletrônicas.

Todos os dispositivos descritos neste trabalho apresentam confinamento dos elétrons em uma das direções espaciais, no caso, assumiu-se a direção x . Nas outras direções o elétron é considerado livre (onda plana). Dessa forma analisamos apenas as propriedades que não necessitem de considerações mais rigorosas sobre transporte paralelo [13].

Esse confinamento bidimensional (2D) é devido às camadas de materiais diferentes que se sobrepõe num mesmo cristal semicondutor e também devido à dopagem modulada.

Dadas as pequenas dimensões de confinamento (dezenas de Angstroms), a descrição matemática do elétron é puramente quântica, ou seja, sua função de onda é obtida pela solução da equação de Schrödinger.

Os vários materiais envolvidos são caracterizados nas equações por:

- massas efetivas eletrônicas (aproximação de massa efetiva),

- potenciais energéticos confinantes ao qual o elétron está sujeito (“offset” da banda de condução),
- constantes dielétricas,
- parâmetros de rede cristalina,
- densidades de dopantes,
- potenciais de deformação.

Os efeitos eletrostáticos dos dopantes e dos outros elétrons são incluídos na chamada aproximação de Hartree, resolvendo-se a equação de Poisson simultaneamente (em Cálculo Numérico, diz-se auto-consistentemente) com a equação de Schrödinger.

Os efeitos de correlação e troca são incluídos via parametrização [14,15]. Sua inclusão visa apenas tornar o cálculo mais completo, não sendo feito um estudo mais elaborado a respeito de sua exclusão ou não. Apenas um teste mostrou-nos que é pequena a sua influência para as características dos HEMTs aqui estudados.

Obtemos as auto-funções e sub-bandas em relação ao nível de Fermi e portanto temos todas as informações necessárias aos cálculos posteriores.

2.1 Hamiltoniano

Propomos o Hamiltoniano (H) para os elétrons na banda de condução fazendo um “híbrido” dos dois Hamiltonianos presentes nas Refs. [16] e [17]. O primeiro foi utilizado devido ao operador energia cinética (K) ser mais completo pois é simétrico e leva em conta a diferença na massa efetiva e no parâmetro de rede dos materiais [18,19]. O segundo

é um exemplo de Hamiltoniano que contém o tradicional potencial efetivo (V_{ef}) utilizado em camadas tensionadas.

Dessa maneira o Hamiltoniano é descrito por:

$$H = K(x) + V_{ef}(x) \quad (2.1-1)$$

$$K = \frac{-\hbar^2}{2a(x)} \frac{d}{dx} \frac{a^2(x)}{m^*(x)} \frac{d}{dx} \frac{1}{a(x)} \quad (2.1-2)$$

$$V_{ef} = V_e(x) + C_1(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + V_h(x) + V_{xc}(x) \quad (2.1-3)$$

K é o operador energia cinética.

V_{ef} é o potencial efetivo.

x é a direção perpendicular às camadas epitaxiais.

a é o parâmetro de rede dos materiais cristalinos [01].

m^* é a massa efetiva eletrônica [01].

V_e é o offset da banda de condução.

ϵ é o tensor "strain" do cristal com:

$$\epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = \frac{a_o - a(x)}{a_o} ; \epsilon_{xx} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{yy} ; \epsilon_{ij, i \neq j} = 0$$

a_o é o parâmetro de rede do cristal não tensionado.

C_1 é o potencial de deformação da banda de condução [01].

$C_{12,11}$ são as constantes elásticas do material tensionado [01].

V_h é o potencial de Hartree, vide seção 2.2.

V_{xc} é o potencial de Correlação e Troca, requisito de anti-simetrização da função de onda [14,15]:

$$V_{xc}(x) = \frac{-e^2}{\epsilon(x) a_o^* \pi \alpha r_s} [1 + 0.7734 \ln(1 + X^{-1})]$$

onde:

$$\alpha = \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{1/3} ; r_s = \left(\frac{4\pi a_o^{*3} n(x)}{3} \right)^{-1/3} ; X = \frac{r_s}{21} ; a_o^* = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon(x)}{m^* e^2}$$

a_o^* é o raio de Bohr efetivo.

n é a densidade eletrônica, vide seção 2.4

ϵ é a permeabilidade elétrica dos materiais [01].

O efeito do "stress", portanto, é "sentido" pelo elétron tanto através do operador energia cinética quanto do potencial efetivo. Este efeito só é considerado nos dispositivos do capítulo 6, onde haverá

diferença nos parâmetros de rede dos materiais de um mesmo dispositivo monocristalino.

2.2 Equações que Descrevem o Sistema

As equações serão explicadas no momento oportuno e muitas referem-se à teoria básica de semicondutores [20].

Na direção de confinamento, x , a função de onda eletrônica, Ψ , deve satisfazer simultaneamente as equações de Schrödinger e de Poisson, através da densidade eletrônica n (equação 2.4-2).

A equação de Schrödinger é:

$$H\varphi_n = E_n\varphi_n \quad (2.2-1a)$$

$$\text{ou} \quad H\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \quad (2.2-1b)$$

$$\text{onde} \quad \Psi = \sum_n \varphi_n(x) e^{i(kx - E_n t / \hbar)}$$

A equação de Poisson é:

$$\frac{d}{dx} \varepsilon(x) \frac{d}{dx} V_h = -e[N_D^+(x) - N_A^- - n(x)] \quad (2.2-2)$$

onde:

φ_n é a auto-função de onda eletrônica referente à n -ésima sub-banda, de energia E_n .

N_D^+ é a densidade de doadores ionizados, vide [seção 2.3](#).

N_A^- é a densidade de aceitadores ionizados; em todos os dispositivos deste trabalho é assumida constante em $\sim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, resultado de dopagem residual não intencional.

A equação de Poisson tem como condições de contorno o valor da energia potencial do fundo da banda de condução no *bulk*

(substrato ou *buffer*) e o valor no *gate* (em $x=0$). Todos os valores de energia têm como referencial o nível de Fermi ($E_F = 0$ eV). Já as auto-funções do Hamiltoniano H têm valores nulos (barreira infinita) nestas mesmas posições.

A energia potencial no *gate* é:

$$V_h(x=0) = -eV_{GS} + \phi \quad (2.2-3)$$

onde V_{GS} é a tensão “Gate-Source”, ou simplesmente tensão no gate, e ϕ é a barreira de potencial devida principalmente à função trabalho entre o semicondutor e o contato Schottky, valores extraídos da Ref. [21]. Outro efeito sobre a barreira, não incluído por ser de menor importância, é o das cargas-imagem.

No *buffer* e no substrato (*bulk*) calculamos o valor do potencial como um semicondutor 3D com dopagem residual não-intencional tipo-p extremamente baixa (caso não-degenerado). Se o material for GaAs ou InP tal dopagem é normalmente devido à presença de Carbono, se for Silício é devido à presença de Boro, vide **seção 2.5**.

2.3 Densidade de Doadores Ionizados

A incorporação de átomos doadores na estrutura cristalina de um semicondutor faz com que surjam níveis de energia permitidos ao elétron na banda de energias proibidas. Se o dopante for Antimônio em Silício, este nível de doadores fica a 39meV abaixo da BC, se

for Silício num cristal de GaAs, fica à $\sim 5.8\text{meV}$, num cristal de InAlAs, fica à 40meV , etc. (pág.116 na Ref. [20]).

A estes níveis doadores correspondem estados eletrônicos localizados ao redor dos íons (após cederem o elétron). Para baixas densidades de dopantes, a extensão de tais estados não permite efetiva sobreposição das funções de onda e portanto, há muito pouca interação entre os sítios doadores. Diz-se que o semiconductor é não-degenerado. Para altas concentrações, em geral maiores que 10^{18}cm^{-3} , os estados doadores se acoplam de tal forma que surge uma espécie de banda de níveis doadores, abaixo da banda de condução. É o chamado semiconductor degenerado. Sendo uma banda de doadores, as transições entre os níveis necessitam de muito baixa energia para ocorrerem, de forma que, qualquer excitação térmica ionize a impureza. Assim, é prática comum (pág.133 em [20]) considerar as impurezas implantadas ou uma fração delas como ionizadas, independentemente da temperatura ou da diferença de sua energia em relação ao nível de Fermi. Uma estatística da situação degenerada em detalhe é muito complexa e não difere muito da ionização constante, para as propriedades físicas que aqui analisamos [22].

Nos capítulos 4, 5 e 7 a região dopada dos cristais é degenerada e portanto, de densidade de doadores ionizados constante.

Observação: embora obedeça à uma estatística não-degenerada, a densidade de aceitadores ionizados, N_A^- na equação 2.2-2, é muito baixa para que sua variação com o nível de Fermi ou com a temperatura afete sensivelmente os cálculos. Assim, ela também foi considerada constante evitando maior esforço computacional.

Para as situações não-degeneradas, utilizadas no capítulo 6, a densidade ionizada é:

$$N_D^+ = \frac{N_D(x)}{1 + g_n e^{(E_F - E_D)/kT}} \quad (2.3-1)$$

onde:

N_D é a densidade de impurezas doadoras, que em semicondutores com dopagem seletiva é função da posição (x).

g_n é a degenerescência do nível doador, em geral assumida devido ao spin e portanto igual a 2. **Obs.:** para aceitadores, devido à degenerescência em buracos leves e pesados, esta assume o valor 4.

E_D é a energia do nível doador.

E_F é a energia do nível de Fermi.

A dedução de tal relação não é difícil, envolvendo Termodinâmica Estatística elementar (por exemplo vide pág.123, na Ref.[20]).

2.4 Densidade Eletrônica

A densidade dos elétrons que ocuparão as sub-bandas é bidimensional (2D).

Para um intervalo de energia dE , em torno da energia E , o número de elétrons presentes por unidade de área, dn , será $dn = g(E)f(E)dE$, onde $g(E)$ é a densidade de estados, por unidade de área, permitidos ao elétron com energia E , e f é a distribuição de Fermi de energias, que dita o quão provável é o estado de ser ocupado.

A densidade de estados, por unidade de área, de um gás de elétrons bidimensional é $[m^* / (\pi \hbar^2)]$, onde esta massa efetiva é referente ao movimento no plano de confinamento. Para o Silício cristalino no capítulo 5, crescido na direção $[100]$, a massa efetiva paralela é diferente da perpendicular, vide Ref. [23]. E para situações onde a função de onda se localiza em materiais diferentes, adota-se uma massa efetiva paralela que seja uma média ponderada por esta função de onda.

Calculamos, então, a densidade eletrônica bidimensional em cada sub-banda j como sendo:

$$n_j^{2D} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_{E_j}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{(E - E_j - E_F)/kT}} dE = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} kT \ln \left(1 + e^{-(E_j + E_F)/kT} \right) \quad (2.4-1)$$

A correspondente densidade de carga tridimensional, na direção de confinamento, é obtida multiplicando-se n_j pela carga elementar e pela densidade de probabilidade da respectiva sub-banda j , somando a colaboração de todas as sub-bandas:

$$n_{3D}(x) = e \sum_j |\varphi_j(x)|^2 n_j^{2D} = n(x) \quad (2.4-2)$$

Esta é então a carga devido aos elétrons nas sub-bandas, que aparece na **equação 2.2-2**.

2.5 Nível de Fermi (Potencial Químico)

O nível de Fermi (E_F) é definido como a energia cujo estado respectivo terá, se este estado for permitido ao elétron, a probabilidade $\frac{1}{2}$ de ser ocupado. Na verdade, esta definição é a de potencial químico termodinâmico, que à temperatura de 0K se confunde com E_F . Tornou-se comum o uso indistinto de ambos os termos em semicondutores, mesmo a temperaturas elevadas.

Em geral ele é tomado como referencial energético, $E_F = 0$ eV, como fizemos aqui, por ser constante em todo o cristal, no equilíbrio.

Em todas estas heteroestruturas calculamos E_F no *bulk*, onde o semiconductor não apresenta confinamento dos elétrons (é tri-dimensional,

ou 3D). O cálculo é feito impondo-se a neutralidade de carga total para semicondutores não-degenerados.

A conservação de carga é dada por:

$$\left(\frac{2kTm^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \left[-F_{1/2}\left(\frac{E_F - E_C}{kT}\right) + F_{1/2}\left(\frac{E_V - E_F}{kT}\right) \right] - \frac{N_A}{1 + g_A e^{\frac{E_A - E_F}{kT}}} = 0 \quad (2.5-1)$$

onde

$F_{1/2}$ é a integral de Fermi-Dirac de ordem $1/2$ (pag.118 na Ref. [20])

Obs.: na equação 2.4-1 temos também uma integral de Fermi-Dirac mas de ordem 0 pois a densidade de carga é bidimensional.

$E_{C,V}$ é a energia do fundo da banda de condução (BC) ou do topo da banda de valência (BV).

Nesta equação as duas primeiras parcelas são as densidades de elétrons e buracos em BC e BV respectivamente. A última é a densidade de aceitadores ionizados.

Sendo a dopagem extrínseca a principal responsável pelos buracos no *bulk* dos sistemas semicondutores aqui tratados ($N_A \gg N_D$, $N_A \gg n_i$), usou-se a aproximação:

$$N_V e^{\frac{(E_V - E_F)}{kT}} + \frac{N_A}{1 + g_A e^{\frac{(E_A - E_F)}{kT}}} = 0 \quad (2.5-2)$$

onde

$N_V = 2(2\pi (m_n^*/m_o) kT/\hbar^2)^{3/2}$ é a densidade de estados efetiva (pg.118 na Ref. [20])

A única incógnita na equação transcendental é E_F , sendo então facilmente resolvida numericamente (pág.15 na Ref. [24]) ou aproximada analiticamente, como exposto a seguir.

Sendo p a densidade de buracos, neste regime extrínseco tem-se $p=N_A^-$ (a densidade de buracos é igual à de aceitadores ionizados).

Definindo N como

$$N = \frac{N_V}{g_A} e^{(E_V - E_A)/kT} \Rightarrow p = \frac{N_A}{1 + \frac{p}{N}} \Rightarrow p = \frac{N}{2} \left(\sqrt{1 + 4 \frac{N_A}{N}} - 1 \right) = N_V e^{(E_V - E_F)/kT}$$

O nível de Fermi se torna, então:

$$E_F = E_V - kT \ln \left[\frac{N}{2N_V} \left(\sqrt{1 + \frac{4N_A}{N}} - 1 \right) \right] \quad (2.5-3)$$

Usando tal equação, o nível de Fermi no Silício devido ao Boro, em função da temperatura, é mostrado na [figura 2.1](#) (pag.132 na Ref. [20]).

Figura 2-1: posição do nível de Fermi como função da temperatura para as dopagens indicadas. E_i é a posição de E_F para Si intrínseco.

Para os limites superiores de temperatura em que tal aproximação é válida E_F se aproxima do centro da banda proibida. Para temperaturas tendendo à 0K, E_F tende à $(E_A + E_V)/2$.

2.6 Transcondutância × Capacitância

Por definição, a transcondutância intrínseca, g_m , de um transistor é:

$$g_m = \left(\frac{\partial I_{DS}}{\partial V_{GS}} \right)_{V_{DS} = \text{constante}} \quad (2.6-1)$$

Tal grandeza mede o quão eficiente é a alteração da corrente entre dreno e fonte (*drain-source*), I_{DS} , quando se varia a voltagem no *gate*, V_{GS} . Sua unidade é o *Siemens* ($S = \text{Ampère/Volt}$), mas normalmente é medida como mS por unidade de largura do gate. É, portanto, um dos mais importantes parâmetros ao se considerar a amplificação de transistores.

A estrutura básica dos contatos de um destes dispositivos é ilustrada na [figura 2.2](#).

Figura 2.2: Contatos de um FET. Apenas o gate, G, é Schottky. A corrente indicada, I , vai do Drain, D, ao Source, S, passando por baixo de G. Perpendicular ao desenho é a direção de crescimento epitaxial do semiconductor.

A corrente, ao fluir do Drain ao Source, passa por baixo do contato Schottky numa extensão típica, L_G , em torno de $1\mu\text{m}$ (no FET da figura anterior o valor é $0.25\mu\text{m}$). Seja Z a largura do gate, na figura indicada por $100\mu\text{m}$. A área sob o gate é então ZL_G . Seja n_F , aproximada como constante nas direções y e z , a densidade eletrônica bidimensional abaixo do gate. Portanto a carga total abaixo deste será (eZL_Gn_F) . Seja v_s a

velocidade de saturação dos elétrons. Considerando a corrente como um fluxo “laminar” de elétrons sob o gate têm-se:

$$I_{DS} \cong en_F Z v_S \Rightarrow g_m = Z e v_S \frac{\partial n_F}{\partial V_{GS}} = \frac{\partial(e L_G Z n_F)}{\partial V_{GS}} \frac{v_S}{L_G} = \frac{\partial Q}{\partial V_{GS}} \frac{v_S}{L_G}$$

$\Downarrow$
 C_F

onde C_F é a capacitância do gate ao source.

Em termos mais específicos, esta é a chamada “*short-channel approximation*”, válida para pequenos comprimentos de gate.

Assim, estabelece-se a relação entre g_m e a capacitância devido aos elétrons no canal bidimensional:

$$g_m = C_F \frac{v_S}{L_G} \quad (2.6-2)$$

Deve-se notar que são os *elétrons livres* que colaboram para o transporte, sob o gate (pág.147, na Ref. [13], e [6]). São aqueles elétrons cujo movimento ocorre em regiões (materiais) separadas dos íons espalhadores. Assim, é a densidade destes que deve ser considerada para esta analogia, daí o sub-índice F (do inglês *free*, livre), embora não sejam realmente livres pois o potencial coulombiano tem alcance infinito.

2.7 Frequência de Corte

A frequência de corte, f_{max} , é definida como a maior frequência de um sinal de corrente, num transistor, onde ainda há ganho. O ganho (h) é a razão entre as correntes de entrada, no Drain, e de saída, no Source. Seja o modelo simples de um circuito equivalente ao transistor:

Figura 2-3: Circuito equivalente a um transistor para sinais pequenos. C é a capacitância Gate-Source, g_{m0} é a transcondutância intrínseca e R_s é a resistência de acesso entre Source e Gate.

Pela definição, então:

$$h = \frac{I_D}{I_G} = \frac{g_m V_C}{i\omega C V_C} = \frac{f_{\max}}{if}$$

$$f_{\max} = \frac{g_m}{2\pi C} \quad (2.7-1)$$

C aqui é a capacitância total e não apenas aquela devido aos elétrons livres.

Enquanto $f_{\max} \geq f$, o módulo de h é maior que 1 e portanto há ganho de corrente.

3. MÉTODO NUMÉRICO

3.1 Diferenças Finitas

A resolução das equações 2.2-1a,b e 2.2-2 envolve derivadas de segunda ordem, aqui escritas na forma de *diferenças finitas*. Isto quer dizer que o domínio espacial tem sua variável representativa, x , tratada não mais como contínua mas como **discreta**. Assim um erro é introduzido no procedimento de cálculo, erro este que é menor quanto menor for o intervalo de discretização, Δx . Também a variável temporal, t , é discretizada em intervalos Δt . A denominação diferença *finita* vem do fato das derivadas envolvidas nas equações diferenciais não serem mais consideradas como o limite quando o intervalo de variação de uma função vai a zero. O intervalo agora tem um valor não nulo e da sua escolha depende a precisão dos cálculos.

Para todos os dispositivos expostos o referencial espacial foi tomado no contato Schottky ($x=0$). Utilizamos uma *discretização não-uniforme* do domínio x [25]. Dessa forma, reduzimos enormemente o número de “pontos”, aos quais atribuem-se os valores das funções discretas. Nos intervalos espaciais onde as funções a serem derivadas tem maior variação discretiza-se mais intensamente o domínio, minimizando o erro numérico. Δx varia de 0,5 ou 1 Å nos poços quânticos à 100 Å ou mais no buffer. Δt tem seu valor em torno de 0,02 fs, chegando à 0,5 fs na evolução de pacotes de onda em tempo real.

Utilizamos a diferença finita para tratar heterojunções com uma função multiplicativa “dentro” da derivada segunda (equações 2.1-2 e 2.2-2) para o operador energia cinética e na equação de Poisson.

Sendo o domínio espacial discretizado como ilustrado no esquema seguinte, as derivadas segunda num certo ponto i são indicadas a seguir.

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dx} g(x) \frac{d}{dx} f(x) &\cong \frac{d}{dx} g(x) \left[\frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta_i + \Delta_{i+1}} 2 \right] = \\
 &= \left(g_{i+1/2} \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta_{i+1}} - g_{i-1/2} \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta_i} \right) \frac{2}{\Delta_i + \Delta_{i+1}} = \\
 &= \left(\frac{2g_{i+1/2}}{\Delta_{i+1}(\Delta_i + \Delta_{i+1})} \right) f_{i+1} + \\
 &\quad - \left(\frac{2g_{i+1/2}}{\Delta_{i+1}(\Delta_i + \Delta_{i+1})} + \frac{2g_{i-1/2}}{\Delta_i(\Delta_i + \Delta_{i+1})} \right) f_i + \\
 &\quad + \left(\frac{2g_{i-1/2}}{\Delta_i(\Delta_i + \Delta_{i+1})} \right) f_{i-1}
 \end{aligned} \tag{3.1-1}$$

Os valores da função g nos pontos intermediários ($i \pm 1/2$) são calculados por interpolação linear.

Temos, então, um conjunto de N expressões da forma (3.1-1), uma para cada ponto de discretização, onde N é o número de pontos em que foi discretizado espacialmente o domínio. Para calcular a derivada num ponto, os 2 pontos vizinhos também são utilizados. A expressão para cada ponto é igualada a valores conhecidos e a incógnita a ser determinada é a própria função f em cada ponto (caso da equação diferencial). Este conjunto constitui um sistema linear de equações cuja forma matricial é tridiagonal.

Para este trabalho utilizamos o *algoritmo de Thomas* (pág.113 na Ref. [26]) em sua resolução.

3.2 “Split-Operator” em Tempo Real (Evolução Temporal)

Para um potencial efetivo que varia lentamente num intervalo de tempo Δt , pela equação (2.2 -1b), tem-se:

$$\Psi(t + \Delta t) = e^{\frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} H dt} \Psi(t) \cong e^{-iH\Delta t/\hbar} \Psi(t) \quad (3.2-1)$$

Esta é a evolução temporal de um pacote de onda Ψ .

O operador evolução temporal da equação (3.2-1) contém o operador energia cinética (K) que é a derivada segunda explícita na equação (2.1-2). O procedimento que empregamos aqui para aplicar este operador evolução consiste em “quebrá-lo” (*split* - do inglês, separar) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} e^{-iH\Delta t/\hbar} &= e^{\frac{-i\Delta t}{\hbar}[K+V]} = e^{\frac{-i\Delta t}{\hbar}[V/2+K+V/2]} \cong \\ &\cong e^{\frac{-i\Delta t}{\hbar}(V/2)} e^{\frac{-i\Delta t}{\hbar}K} e^{\frac{-i\Delta t}{\hbar}(V/2)} = \Gamma_1(x) e^{cK} \Gamma_1(x) \end{aligned} \quad (3.2-2)$$

Γ_1 e c são indicados para simplificar a notação.

Devido à não comutatividade do operador K com V a aproximação é correta até ordem de $(\Delta t)^3$ (pág.11 na Ref. [27]).

A exponencial central é aproximada para o seguinte operador unitário:

$$e^{cK} \cong \frac{1 + cK/2}{1 - cK/2} \quad (3.2-3)$$

Tal operador tem sua expansão igual à da exponencial até ordem de $(\Delta t)^2$.

Como mostra (3.2-2), a evolução temporal implica em primeiro aplicar Γ_t sobre Ψ . Feito isto atuamos (3.2-3) sobre a função resultante, obtendo uma nova função a ser chamada de $\eta(x, t)$. Seja $\Gamma_t \Psi = \zeta(x, t)$, então:

$$\begin{aligned} \frac{1 + cK/2}{1 - cK/2} \zeta &= \eta \\ (1 + cK/2) \zeta &= (1 - cK/2) \eta \end{aligned} \quad (3.2-4)$$

Escrevendo esta equação na forma de *diferenças finitas*, lembrando que K apresenta derivadas de ordem 2 e portanto deve ser escrito na forma (3.1-1), os N pontos da função η quando discretizada, η_i , constituem as incógnitas de um sistema linear não-homogêneo tridiagonal cuja solução, como dito, é exposta na pág.113 da Ref. [26].

Obtido η , em seguida calculamos $(\Gamma_t \eta)$ e temos então a evolução temporal de Ψ .

Como observação é necessário escolher o intervalo de tempo Δt de forma que a energia média do pacote não varie sensivelmente em t .

3.3 Tempo Imaginário (Auto-Estados)

Desejamos calcular n auto-estados (e auto-energias) eletrônicos num potencial efetivo V . Para tanto submetemos n funções

linearmente independentes quaisquer ao procedimento descrito em 3.2, mudando t , ou Δt , por $-it$ (“tempo imaginário”), e as obrigamos a serem ortonormalizadas a cada passo de tempo.

O número de passos de tempo necessários para atingirmos a convergência de todas as auto-funções é relativo a cada sistema, em geral bastando menos de 1000 iterações. O critério de convergência que estabelecemos foi que o valor esperado da posição, $\langle x \rangle$, da auto-função correspondente à última sub-banda varie menos de 10^{-5} Å de um passo para outro. Se as funções iniciais escolhidas forem próximas das auto-funções o número de iterações necessárias diminui bastante. O valor de Δt foi determinado por tentativas: quanto maior, melhor, desde que haja maximização da convergência. Para que haja convergência, em geral este valor deve obedecer à:

$$\frac{\Delta t}{(\Delta x_{\min})^2} \leq 0.5 \text{ (fs/Å}^2\text{)}$$

Esta desigualdade está deduzida na Ref. [26], pág.25, para uma equação diferencial parcial parabólica linear com coeficientes unitários e discretização uniforme, mas que mostrou-se útil como guia e primeira tentativa, em nossos casos também.

O fato de trocar a variável tempo, real, por um número imaginário puro transforma a equação de Schrödinger dependente do tempo numa equação especial de difusão, como a de calor, e a evolução temporal de uma função submetida a ela corresponde à estabilização da “função temperatura”.

A razão da convergência para os auto-estados é deduzida à seguir.

O conjunto de todas as auto-funções de um Hamiltoniano, $\phi_i(x)$, é um conjunto completo e pode ser utilizado como

base. Assim, qualquer função $\Psi(x,t)$ pode ser expandida nessa base da seguinte forma:

$$\Psi = \sum_n b_n(t) \varphi_n = \sum_n \left(a_n e^{-iE_n t/\hbar} \right) \varphi_n$$

Fazendo-se a evolução temporal imaginária desta função, impondo a normalização e “isolando” o estado fundamental nas expressões tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\Psi}{\sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle}} &= \frac{\sum a_j e^{-E_j \tau/\hbar} \varphi_j}{\left[\sum |a_j|^2 e^{-2E_j \tau/\hbar} \right]^{1/2}} = \\ &= \frac{\sum a_j e^{-E_j \tau/\hbar} \varphi_j}{|a_0| e^{-E_0 \tau/\hbar} \left[1 + \sum_{j=1} \frac{|a_j|^2}{|a_0|^2} e^{-2(E_j - E_0) \tau/\hbar} \right]^{1/2}} = \\ &= \frac{\frac{a_0}{|a_0|} \varphi_0 + \sum_{j=1} \frac{a_j}{|a_0|} e^{-(E_j - E_0) \tau/\hbar} \varphi_j}{\left[1 + \sum_{j=1} \frac{|a_j|^2}{|a_0|^2} e^{-2(E_j - E_0) \tau/\hbar} \right]^{1/2}} \end{aligned}$$

Na última expressão é simples observar que quando o tempo evolui as exponenciais vão evanescendo e portanto, no limite $\tau \rightarrow \infty$, que numericamente aqui significa da ordem de 500 iterações, a função Ψ torna-se o estado fundamental.

Se outra função é submetida à mesma evolução, mas à ela é imposta a ortogonalidade com a primeira, esta converge para o segundo auto-estado. Isto porque ortogonalizar significa obrigar a_0 a ser nulo. Para relembrar, o procedimento de ortogonalização é o de Gram-

Schmidt, onde o produto escalar de um vetor i por outro j em Álgebra Linear, aqui significa o "braket" $\langle i | j \rangle$ dessas funções de onda.

O mesmo ocorrerá submetendo mais funções a esta evolução e impondo a ortogonalidade entre elas. Estas convergirão para o $3.^o$, $4.^o$, etc auto-estados.

A normalização é necessária porque o operador (3.2-3) não é mais unitário, no tempo imaginário.

A auto-energia E_i (nas heteroestruturas é a sub-banda i) é obtida pela integral $\langle \varphi_i | H | \varphi_i \rangle$.

Como consideração computacional, no cálculo de 3000 iterações numa PHEMT (Capítulo 6), levando em conta 4 sub-bandas, gastamos por volta de 35s de CPU do CRAY- YMP2E da UFRGS, para uma voltagem de gate específica. O programa FORTRAN vetorizado tem uma performance de 120 Mflops, já incluídos todos os cálculos de variação da densidade eletrônica e valores esperados.

4. HEMT OU MODFET

A estrutura protótipo para a dopagem modulada ou seletiva foi a *super-rede com dopagem modulada*, conceito sugerido por *Esaki e Tsu* [28]. Tal conceito foi primeiro demonstrado por *Stormer* [29] em 1979. Consiste na dopagem em camadas diferentes daquela onde os elétrons se localizarão, permitindo o seu transporte com maior mobilidade devido à maior distância dos elétrons em relação aos centros doadores responsáveis pelo espalhamento coulombiano.

O primeiro MODFET (*MODulation Doped Field Effect Transistor* - transistor de efeito de campo com dopagem modulada) em operação, com um gate de 400 μ m, teve sua literatura publicada em 1980 [30], embora houvesse um trabalho da Universidade de Illinois em cooperação com a Rockwell International ao mesmo tempo para a produção de um MODFET de 1 μ m e performance em micro-ondas. Outros detalhes históricos e características destes dispositivos estão muito bem organizados por *Drummond et al* [31].

O nome MODFET reflete a similaridade do dispositivo com os MOSFETs. MODFET era a nomenclatura original aplicada a tais estruturas pela AT&T Labs. que também os chama de SDHT, *Selectively Doped Heterojunction Transistor* - transistor com heterojunção de dopagem seletiva. Outros nomes são TEGFETs (*Two-dimensional electron gas FET* - FET com gás de elétrons bidimensional) e HEMT (*High Electron Mobility Transistor* - transistor com alta mobilidade eletrônica). Este último nome, introduzido pelos japoneses, embora muito popular, não é muito feliz pois não reflete a velocidade em saturação, característica de todos os dispositivos em campos elétricos elevados, onde é comum a sua operação.

Um esquema típico de MODFET é mostrado na [figura 4-1](#).

Figura 4-1: diagrama esquemático de um MODFET. À esquerda há uma representação ilustrativa do potencial efetivo ao qual os elétrons estão sujeitos. Porcentagem de Alumínio na liga: $x=30\%$.

Devido à diferença de gap de energia entre o GaAs e o $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, a banda de condução forma um degrau na heterojunção, o qual depende da composição x , sendo menor o potencial energético do GaAs. Embora os doadores estejam no $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, os elétrons que estes cedem se dirigem para a interface, no lado do GaAs, que tem um potencial menor. O degrau na banda de condução e a distribuição de carga devido aos doadores ionizados fazem com que o confinamento eletrônico se dê num potencial tipo triangular que quantiza as energias permitidas na direção perpendicular à interface nas chamadas sub-bandas, enquanto no plano da interface é comum a aproximação de elétron livre.

Utilizando o procedimento auto-consistente descrito no [capítulo 3](#) fizemos um estudo teórico da estrutura eletrônica do MODFET da [figura 4-1](#). As dimensões e parâmetros foram extraídos de *Vinter* [6] e/ou

DasGupta [32] para comparação com seus resultados experimentais. Calculamos os valores das sub-bandas, sua população eletrônica e as auto-funções associadas ao elétron no potencial efetivo ao qual os mesmos estão submetidos. Um dos resultados é mostrado na figura 4-2 para uma densidade de dopantes ionizados de $2,2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Figura 4-2: Acima: potencial efetivo, calculado auto-consistentemente para o HEMT. Abaixo: densidades de probabilidade eletrônicas correspondentes a cada sub-banda, alinhadas com as mesmas.

Tanto à 77K quanto à temperatura ambiente os elétrons se localizam no poço (u-GaAs). Embora o terceiro auto-estado à 300K se estenda pelo $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$, esta sub-banda não tem uma população eletrônica relevante. A peculiar localização dos elétrons, separados da camada dopada, faz com que o transporte paralelo sofra menor influência do espalhamento coulombiano gerado pelos íons presentes na região doadora no AlGaAs . Este é o maior argumento para se justificar a alta mobilidade neste tipo de material, que já em 1983 era possível se obter dispositivos que atingiam $10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ à 2K e 8500 à 9000 cm^2/Vs à 300K [33].

O aumento da temperatura permite que mais sub-bandas sejam ocupadas e as características de transporte do dispositivo são prejudicadas, como a diminuição da mobilidade devido principalmente ao espalhamento por fônons.

4.1 O Efeito do Campo

Mostramos na [figura 4-3](#) a densidade de probabilidade dos elétrons para algumas voltagens de gate específicas, junto com os perfis de potencial. Nesta figura a amostra tem densidade de doadores ionizados de $2,2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$.

Para o estudo ilustrado nestes gráficos indicamos situações com voltagens extremas: ou com alta saturação eletrônica nas sub-bandas ou com a sua total despopulação. A aplicação de voltagens negativas eleva a condição de contorno no contato Schottky, elevando também o potencial efetivo, em relação ao nível de Fermi, tornando as sub-bandas vazias. Já as voltagens positivas baixam o potencial, permitindo que mais sub-bandas sejam preenchidas e aumentando a densidade das já ocupadas. Para este dispositivo em especial, a densidade volumétrica de impurezas doadoras é muito intensa, acima de 10^{18}cm^{-3} , consideramos todas como constantes e ionizadas, vide discussão na [seção 2.3](#). Tal densidade constante permite que a banda de condução do AlGaAs se localize acima do nível de Fermi (degeneração).

Figura 4-3: efeito do campo sobre o potencial efetivo e densidades de probabilidade eletrônicas de HEMT. As tensões gate-source ou porta-fonte estão indicadas. À esquerda têm-se o transistor à 77K e à direita à 300K. Amostra com densidade de doadores ionizados de $2,2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$.

Além de baixar o potencial, as voltagens muito positivas fazem com que se forme um segundo poço atrator de elétrons no lado do AlGaAs e é ali que vão se localizando a maior parte deles. Nessas voltagens o transporte eletrônico é prejudicado pois há muito espalhamento pelos íons.

Aparece também, à $V_{GS} = +0.7V$ e 300K, uma configuração próxima à ressonância entre a segunda e a terceira sub-banda. Quando em ressonância, ambos os auto-estados têm a mesma densidade de probabilidade (as curvas se sobrepõem) e ficam completamente deslocalizados entre os poços.

As muitas ressonâncias entre sub-bandas de outro dispositivo com maior densidade de dopantes ionizados ($2,8 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$) são mostradas na [figura 4-4](#). Estas ressonâncias são os aparentes cruzamentos entre as curvas. Nesta figura há a variação das sub-bandas bem como suas respectivas populações eletrônicas em função da voltagem de gate. O intervalo em que variamos a voltagem de gate (de 20 em 20mV) mostra-se suficiente para traçar o perfil das curvas em função de V_{GS} .

Em uma temperatura mais elevada as curvas correspondentes às populações de cada sub-banda são mais próximas pois as probabilidades de ocupação dos estados vão tornando-se equivalentes.

Figura 4-4: Acima: densidade eletrônica em cada sub-banda em função da voltagem gate-source para HEMT. Abaixo: as próprias sub-bandas. À esquerda, 77K, e à direita, 300K. Amostra com densidade de doadores ionizados de $2,8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Calculamos então a capacitância gate-source intrínseca (C_{GS}) em relação à voltagem de gate (V_{GS}), comparando-a aos resultados

experimentais [6 ou 32], vide figura 4-5. Deve-se notar que num circuito equivalente ao transistor em operação, C_{GS} total é um parâmetro de grande importância, mas é a capacitância dos elétrons no canal (chamados livres em muitas situações por sofrerem menos espalhamento coulombiano) que se relaciona à transcondutância [34].

Figura 4-5: comparação entre a capacitância e os resultados experimentais apresentados por Vinter [6] ou Das Gupta [32].

Este resultado nada mais é do que a derivada da soma das populações (densidade total de elétrons) mostradas na figura 4-4, multiplicada pela carga elementar. A concordância com o experimento é muito boa, mas assim como a simulação de DasGupta [32], esta apresenta um pequeno desvio em voltagens maiores devido ao efeito de impedâncias resistivas em série, as quais não foram incluídas no simulador.

O “duplo-cotovelo” nas curvas C-V, típico de HEMTs, aparece nos resultados da simulação. Com a elevação da voltagem as sub-bandas vão se populando acentuadamente e se aproximando abruptamente do nível de Fermi, a começar pela primeira. Na voltagem correspondente ao primeiro

"cotovelo" a primeira sub-banda tem sua população de elétrons saturada. A curva C-V só vai ter um crescimento acentuado novamente quando a próxima sub-banda se aproximar de E_F e mesmo assim se esta aproximação for "abrupta" (aproximação acentuada de E_F num intervalo curto de voltagem de gate). Assim, para que seja observado mais um "cotovelo" há necessidade de ressonância entre as duas sub-bandas seguintes àquela saturada pois ao entrarem em ressonância elas trocam de característica e se "repelem" em valores de energia, a mais baixa incidindo mais abruptamente sobre o nível de Fermi. Ao incidir sobre E_F esta segunda sub-banda também se satura de elétrons, gerando o segundo "cotovelo". Comparar a [figura 4-4](#) com a [figura 4-5](#).

É importante salientar que neste nosso simulador apenas parâmetros experimentais foram utilizados. Nenhum parâmetro de ajuste é requerido para as curvas o que o torna de maior credibilidade na descrição dos fenômenos físicos envolvidos.

5. δ -FET de Silício

Devido, principalmente, às suas propriedades ópticas, materiais compostos dos elementos das colunas III-V e II-VI da tabela periódica geraram uma grande perspectiva na integração opto-eletrônica. As pesquisas motivaram um grande desenvolvimento na tecnologia de crescimento epitaxial que agora está sendo utilizada também para o crescimento de semicondutores tradicionais, criando materiais eletrônicos com novas características.

Silício cristalino com dopagem planar (tipo- δ) é um novo material cujas pesquisas são muito recentes [09,11,37]. Cristal de Silício, crescido por MBE, com alta qualidade de dopagem tipo δ conseguida através de epitaxia de fase sólida ou dopagem por feixe de íons é apresentado como um material interessante para a produção de δ -FETs[07,08]. A estrutura esquemática de tal dispositivo está mostrada na figura 5-1.

Figura 5-1: diagrama esquemático de um δ -FET com três planos de dopagem doadora tipo delta acoplados. Nesta análise a dopagem de cada plano é $2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$.

Uma característica deste material é que as massas efetivas eletrônicas são maiores que no GaAs, onde as pesquisas com δ -FETs se iniciaram. Deve-se ter uma menor separação entre planos de dopagem para haver acoplamento. Acoplando mais planos e todos ficando mais próximos ao gate haverá maior transcondutância.

Um argumento contra esta hipótese de resposta mais rápida é que a massa efetiva, sendo maior, torna a velocidade eletrônica menor. Porém, a velocidade de saturação dos elétrons no Silício não é menor que, por exemplo, no GaAs (vide Sze [38], pág.46 ou Kelly [01f], pág.21). Como tais dispositivos só têm operado a campos elevados, é esta a velocidade a ser considerada dentro de tais materiais (Pierret [39], págs.136-137).

Outro estudo interessante diz respeito ao aumento da mobilidade, entre outras modificações tecnológicas interessantes, causado pelo acoplamento de dois planos de dopagem tipo δ em GaAs [9,10].

Unindo estes tópicos de grande interesse tecnológico e científico: dopagem δ em Si e acoplamento dos planos em δ , propomos aqui estruturas de Silício cristalino com um, dois e três planos de dopagem delta acoplados com dimensões possíveis de serem obtidos experimentalmente [35,36]. Calculamos as suas estruturas eletrônicas e com elas temos a capacitância dos dispositivos à temperatura de 77K e 300K. Estimamos o valor da transcondutância intrínseca através da capacitância devido à densidade de carga dos *elétrons livres*. Elétrons livres são considerados aqui aqueles cuja densidade de carga não se sobrepõe à dos planos de dopagem, planos estes com uma espessura de 20Å. Esta é uma consideração razoável e utilizada baseando-se na maneira já comumente aplicada a HEMTs (Weisbuch e Vinter [13], pág.147; Vinter [06]) onde a capacitância dos elétrons no canal, fora da região dopada, chamada de capacitância dos elétrons livres, tem direta correspondência com a transcondutância, vide equação (2.6-2).

Devemos lembrar que no Silício o elétron pode admitir duas massas efetivas distintas, o elétron leve e o pesado, devido a forma de sua primeira zona de Brillouin [23].

Os potenciais efetivos aos quais o elétron está sujeito são mostrados na [figura 5-2](#) para duas temperaturas diferentes.

Figura 5-2: Potenciais efetivos para elétrons leves e pesados, à 77K e 300K, para Silício com uma a quatro deltas acopladas, sem voltagem aplicada. Não se leva em conta o acoplamento entre os elétrons leves e pesados.

Como primeira observação geral, nota-se que a energia potencial na região de dopagem delta (canais) à 77K está mais próxima ao nível de Fermi (E_F) que os potenciais à 300K. No *bulk* ocorre que à 77K E_F é mais distante da banda de condução (BC) que à 300K, fato este inclusive relacionado à condição de contorno na resolução da equação de Poisson. À temperaturas maiores mais sub-bandas são ocupadas, "estendendo" mais a densidade eletrônica. A maior densidade de elétrons à 300K faz com que o potencial calculado através da equação de Poisson seja menos "agudo" que aquele à 77K.

Os elétrons pesados, pela maior massa efetiva, apresentam um raio de Bohr efetivo menor que os elétrons leves, ou seja, os pesados estão localizados mais próximos às δ s. Assim, o potencial efetivo devido aos elétrons pesados é mais abrupto e portanto mais próximo ao E_F que os leves.

O acoplamento entre δ s, para estes sistemas, praticamente não abaixa o potencial, apenas "alarga" o canal de condução. Não se tem, portanto, um aumento do número de elétrons condutores devido a geometria de acoplamento, mas sim devido a maior quantidade de doadores.

Uma visão geral de todas as densidades de probabilidade eletrônicas, sem voltagem aplicada, pode ser vista na [figura 5-3](#).

No cálculo levamos em conta quatro sub-bandas quando o cristal tem uma ou duas deltas e seis sub-bandas quando tendo três deltas acopladas. A razão da utilização deste número de sub-bandas é garantir que a soma da população destas possua mais de noventa por cento dos elétrons fornecidos pelos doadores nas situações de voltagem de gate positiva elevada de tal forma que a somatória na [equação \(2.4-2\)](#) represente realmente a densidade de elétrons.

Figura 5-3: Nesta “matriz” de gráficos estão as densidades de probabilidade eletrônicas alinhadas com as respectivas sub-bandas e plotadas sobre os potenciais efetivos correspondentes. As colunas correspondem a transistores com uma, duas e três deltas acopladas.

Com o aumento no número de deltas acopladas as auto-funções eletrônicas são mais deslocalizadas não se sobrepondo tanto aos íons doadores, centros de espalhamento coulombiano. Com isto é diminuído este importante fator de espalhamento no canal de transporte paralelo e espera-se que a mobilidade eletrônica aumente. Porém, o caráter bidimensional vai se perdendo.

Em função da voltagem aplicada no gate (efeito de campo) calculamos as sub-bandas e as respectivas densidades eletrônicas, valores esperados da posição ($\langle x \rangle$) e desvios padrão (σ) das densidades de probabilidade dos elétrons.

Mostramos a capacitância em função da voltagem de gate para elétrons leves na [figura 5-4](#).

Todos os dispositivos apresentaram uma *capacitância total* DC de aproximadamente $200\eta\text{F}/\text{cm}^2$ com a forma da curva sem diferenças marcantes para elétrons leves ou pesados. A voltagem de “pinch off” ou *limiar (threshold)* (voltagem negativa onde não mais estão disponíveis elétrons de condução) deve ser mais negativa à 300K do que à 77K, pois sub-bandas mais elevadas são ocupadas, o que demanda maior elevação do potencial para despovolar-las. Nas curvas de capacitância-voltagem devido a cada sub-banda individualmente nota-se que a principal sub-banda responsável pela capacitância total para a estrutura com uma única delta é a primeira sub-banda. Para a estrutura com duas deltas é a segunda sub-banda a principal responsável e para a estrutura com três deltas é a terceira. Isto porque as sub-bandas abaixo da respectiva já estão saturadas e é esta a que começa a ser preenchida, nos intervalos de voltagem estudados.

Figura 5-4: Curvas de C-V para elétrons leves à 77K e 300K. A colaboração de cada sub-banda individualmente é mostrada.

Na [figura 5-5](#) apresentamos a capacitância devido aos *elétrons livres*. Como deduzido anteriormente, na [seção 2.6](#), a forma desta curva tem relação direta com a transcondutância intrínseca (g_m). Assim posto, g_m é maior para estruturas com mais deltas, e em geral maior à 77K do que à 300K.

Figura 5-5: densidades dos chamados elétrons livres e curvas C-V respectivas para δ -FETs de Si. Espera-se que a transcondutância intrínseca tenha a mesma forma de C-V.

As tensões de porta referentes aos picos tendem a valores mais negativos com o aumento no número de δ s pois quanto maior o número de planos de dopagem, maior o número de elétrons fornecidos ao sistema e mais negativa é a voltagem de gate necessária para variar este número.

Um melhor "comportamento" do transistor (maior g_m) sem polarização ou para voltagens positivas ocorre no δ -FET simples (única delta), mas lembramos que o aumento no número de elétrons devido às deltas extras é uma importante vantagem a ser considerada para um transistor.

Para a estrutura com uma delta o limiar de condução situa-se em torno de $-0,65V$ e para as demais cai para menos de $-1,0V$. Estes valores relacionam-se a uma possível operação dos dispositivos em chaveamento lógico.

Há o aumento esperado no número de elétrons livres aumentando-se o número de deltas. O número de elétrons livres leves é sempre maior que o número de elétrons livres pesados porque sua massa menor implica numa menor concentração das auto-funções próximas aos centros doadores.

No geral a melhor performance (maior g_m e menor capacitância total) ocorre para duas ou três deltas acopladas. A capacitância total apresenta pouca variação e pode ser aproximada para valores constantes em modelos simples.

Uma, duas e três deltas não são suficientes para estabelecer uma convergência para algum parâmetro elétrico, mas a [figura 5-5](#) sugere algo neste sentido, onde a transcondutância talvez adquira uma curva característica não importando o número de deltas.

Espera-se grandes valores g_m para estes dispositivos. Em transistores típicos de comprimento de gate de $1\mu\text{m}$ podemos estimar, pelos valores de pico de C-V mostrados, em 1000mS/mm (equação 2.6-2). Usando este valor na equação (2.7-1) frequências de corte com até 80GHz podem ser esperadas, desde que seja válido o circuito equivalente simplificado da figura 2-3.

6. PHEMT

PHEMT são as iniciais de **P**seudomorphic **H**EMT (HEMT pseudomorfo). O adjetivo pseudomorfo vem do fato de que, neste transistor, certas camadas do cristal semiconductor possuem, propositalmente, materiais com parâmetro de rede diferente dos demais e estas camadas são "forçadas" a manter a estrutura cristalina (*forma*) do material sobre o qual estão sendo crescidas (*pseudo*, do grego, *falso*). Tais camadas são ditas tensionadas ou "estressadas" ou ainda *sob "strain"*. Vide [apêndice](#).

Observou-se que desde que as camadas epitaxiais não ultrapassassem uma espessura crítica era possível produzir heteroestruturas com materiais de parâmetros de rede cristalinos diferentes sem gerar os indesejáveis *defeitos cristalinos*, os mais comuns sendo as *deslocações lineares* (pág.72 na Ref. [\[40\]](#)). Estas heteroestruturas stressadas apresentam muitas características interessantes e com desempenho superior a outros materiais eletrônicos.

Os primeiros HEMTs para micro-ondas eram baseados em GaAs/AlGaAs e ficou claro, por volta de 1986, que substratos de GaAs com canais (poços quânticos) de InGaAs pseudomorfo aumentavam o desempenho dos transistores na faixa de ondas milimétricas, reduzindo o ruído e aumentando a eficiência no ganho de potência [\[41\]](#). A quantidade de Índio na liga variava de 15 a 25% para evitar o aumento na densidade de defeitos ou mesmo nanofissuras na estrutura cristalina. A utilização de substratos de InP permitiu aumentar tal porcentagem de In e já em 1986 também foi produzido um HEMT sobre InP com canal de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ [\[42\]](#). Este não era um transistor pseudomorfo pois havia o casamento perfeito dos parâmetros de rede. Mesmo assim ele apresentava uma frequência de

utilização 50% maior que o similar de GaAs. Assim, outros exemplos se sucederam demonstrando o alto desempenho dos sistemas contendo Índio e baseados em Fosfato de Índio (InP). Uma interessante revisão da situação de tal tecnologia até 1996 é descrita por Smith [05].

Um típico PHEMT baseado em InP é mostrado na figura 6-1.

Figura 6-1: diagrama esquemático de um PHEMT. À esquerda há uma representação ilustrativa do potencial efetivo ao qual os elétrons estão sujeitos. Compare com a figura 4-1.

A maior quantidade de Índio na liga (usado tipicamente de 53% a 80%) faz com que o canal no sistema material de InAlAs/InGaAs apresente mais alta mobilidade e velocidade eletrônica. A grande descontinuidade na Banda de Condução (BC) na heterojunção de InGaAs/InAlAs permite altas densidades eletrônicas bidimensionais (*two-Dimensional Electron Gas* - 2DEG). Disto resultam altas correntes e transcondutâncias (g_m). Transcondutâncias de 1500-1700 mS/mm já foram atingidas. Como comparação, típicos transistores com 0,1 μm sobre InP têm de 800 a 1000 mS/mm, enquanto os similares PHEMTs sobre GaAs apresentam 600 mS/mm. É a alta transcondutância a principal responsável pelo aumento da frequência de operação e excelentes propriedades de ganho de largura de banda. Atualmente o recorde de frequência de

operação de um transistor é de um PHEMT baseado em InP, com 600 GHz [12].

Assim como os HEMTs comuns de uma única heterojunção, os PHEMTs necessitam de simulações de sua estrutura eletrônica. Não há um simulador analítico versátil o suficiente para explicar as propriedades das diversas heteroestruturas que têm surgido, com múltiplas camadas pseudomorfas ou não, às vezes com dopagem tipo delta, etc [43-46].

As simulações numéricas observadas na literatura incluem os efeitos de *strain* como uma correção no *offset* da banda de condução (BC) ou na massa efetiva.

O Hamiltoniano que propomos inclui estas alterações de BC e da massa efetiva e vai além, vide equação (2.1-1). Mostramos que a inclusão do *strain* dessa maneira é essencial para a concordância entre teoria e experimento para medidas de C-V em dispositivos com canal pseudomorfo e também para prever características como a transcondutância.

Simulamos o efeito de campo elétrico em duas heteroestruturas pseudomorfas. A primeira é um típico PHEMT de AlGaAs/InGaAs em GaAs, com o poço estressado, à 77K [47]. A outra, um PHEMT crescido pelo *Hughes Labs.*, contém camadas de InGaAs e InAlAs sobre InP, com diferentes concentrações de Índio, e *stress* fora do poço delta-dopado. Além da simulação desta heteroestrutura, baseado em alguns parâmetros do cristal [48], também realizamos a medida experimental da transcondutância deste transistor, à 300K.

6.1 PHEMT Baseado em GaAs

A sequência nominal de camadas do dispositivo que estudamos é a seguinte:

- 333 Å - cap layer de GaAs:Si
- 375 Å - $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As:Si}$, $3 \cdot 10^{18}$ átomos dopantes / cm^3
- 25 Å - spacer
- 170 Å - canal ou poço de $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ - **estressado**
- 1 μm - buffer de GaAs
- substrato de GaAs

Esta é uma amostra que foi produzida e caracterizada em 1987 [47], sendo assim, altos desvios destes valores são comuns por diferentes técnicas de caracterização.

Como a densidade de dopantes é alta, consideramos como constante a densidade de doadores ionizados (vide seção 2.3). Para ajustar os resultados da simulação com a curva de capacitância-voltagem de gate tal densidade foi estimada em $0,8 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$.

A distância ao cap layer, na simulação, foi de 500Å (ao invés dos 400Å nominais) e a largura do poço foi considerada como sendo de 200Å.

Com estes valores obtivemos pela primeira vez a excelente concordância entre teoria e experimento como mostra a figura 6-2 referente à simulação da capacitância-voltagem de gate do PHEMT devido a todos os elétrons nas sub-bandas.

Figura 6-2: Comparação entre a simulação utilizando o Hamiltoniano aqui proposto e a simulação e resultado experimental de *Nguyen et al.* [47].

A curva sem *strain* é obtida utilizando como dados de entrada no programa de simulação os mesmos que *com strain* exceto o parâmetro de rede, que é considerado o mesmo para o material no poço e fora dele.

Como observa-se, a curvatura de C-V tem direta relação com o *strain* incluído no Hamiltoniano. As simulações que apresentamos sem *strain* e a da Ref. [47], têm formas muito semelhantes com um desvio para as voltagens maiores. Este desvio entre a simulação e o resultado experimental não foi explicado na época. Lembramos que não fizemos

nenhum outro ajuste para que nossa simulação sem *strain* concordasse melhor com o experimento.

Outros resultados comparativos com e sem os efeitos de *strain* em nossa simulação são mostrados na [figura 6-2B](#).

Figura 6-2B: À esquerda resultados da simulação sem efeitos de *strain* e à direita com *strain* para as sub-bandas e respectivas populações eletrônicas para PHEMT/GaAs.

A alteração no *offset* da banda de condução e os não triviais efeitos que nosso Hamiltoniano inclui tem significativa influência para tensões acima de $-0,4\text{V}$. Nessas voltagens surgem ressonâncias entre as sub-bandas. Para voltagens menores não há diferença nos resultados.

6.2 PHEMT Baseado em InP

A sequência nominal de camadas da amostra é a seguinte [48]:

- contato Schottky no Gate tipo T de Ti/Pt/Au
- 70 Å - cap layer de n^+ $\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$

- 175 Å - $\text{Al}_{0.60}\text{In}_{0.40}\text{P}$ - **estressada**
- 50 Å - $\text{Al}_{0.60}\text{In}_{0.40}\text{As}$ - **estressada**
- 50 Å - $n^+ \text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$
- 15 Å - spacer de $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$
- 300 Å - poço de $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ com Si n^+ δ -doping à 150 Å
- 0,25 μm - $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$
- substrato de InP

Este PHEMT tem uma camada de passivação muito espessa (1000 Å) para proteção radiativa pois destina-se a utilização em satélites de telecomunicações. Não tem frequências de utilização notáveis mas tem um ruído muito baixo. A aparência por cima, dos contatos, é apresentada na [figura 2-2](#).

Não dispondo de outros dados da amostra, fizemos certas considerações razoáveis a seu respeito, para a simulação:

- a) estimamos a espessura da camada com dopagem tipo delta, no centro do poço, em 20 Å e densidade uniforme $N_D = 0,5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$.
- b) admitimos que as regiões dopadas são não-degeneradas, típicas em dispositivos de baixo ruído, mesmo que para a simulação a densidade de impurezas superasse 10^{18}cm^{-3} . Utilizamos $N_D = 2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$.

O perfil do potencial efetivo que calculamos é mostrado na [figura 6-3](#).

Figura 6-3: perfil do potencial efetivo (banda de condução) do PHEMT submetido à 350mV Gate-Source. As camadas dos materiais são indicadas.

O degrau que aparece na banda de condução, entre o AlInAs com 40% de Índio e o com 52%, é um dos efeitos do *stress*.

As densidades de probabilidade dos elétrons nas quatro primeiras sub-bandas estão mostradas na [figura 6-4](#).

Figura 6-4: densidades de probabilidade eletrônicas, alinhadas com as respectivas sub-bandas, sob as voltagens indicadas.

Quando a banda de condução é abaixada, ou seja, quando as voltagens vão se tornando positivas, os dopantes ionizados (N_D^+) referentes à delta vão se extinguindo, vide equação 2.3-1. Já os doadores ionizados da região fora do poço só se extinguirão para voltagens bem mais positivas pois a banda de condução nessa região, além de estar num material de gap maior, devido ao *strain* sofre uma "elevação" extra.

Varrendo-se as tensões de porta sobre o dispositivo, nossa simulação mostra os resultados da figura 6-5.

Figura 6-5:Grandezas físicas da PHEMT/InP em função da voltagem Gate-Source: (A) sub-bandas, (B) densidades eletrônicas respectivas, (C) valor esperado da posição do elétron, em relação ao Gate, quando ocupando cada uma das sub-bandas ($\langle X \rangle$), (D) desvio padrão das densidades de probabilidade (σ).

Observamos a tendência dos elétrons a se dirigirem em direção à porta (gate), com o aumento da tensão de polarização. Esta tendência não é linear devido à complexidade da heteroestrutura e aos efeitos de redistribuição de carga (blindagem) próprios da auto-consistência.

Devemos observar que por volta de 0.6V, em direção às voltagens positivas, a simulação do dispositivo **não** é mais realista pois as auto-funções estão muito próximas ao contato Schottky, não valendo mais a condição de contorno nula para elas, na equação de Schrödinger. A [figura 6-5 \(C\)](#) mostra o *valor esperado da posição*, que reflete tal fato. Observa-se também nestas voltagens o exagerado aumento na população eletrônica das sub-bandas, além do que os doadores poderiam suprir ([figura 6-5 \(B\)](#)). Vale, porém, a inclusão desta região de voltagem como curiosidade de propriedades quânticas: são nestas voltagens que ocorrem as ressonâncias entre sub-bandas, e durante a passagem por uma destas ressonâncias, as auto-funções trocam suas características, fato este refletido pela troca de valor médio da distância ao gate ($\langle x \rangle$), em (C) e pelo cruzamento das curvas do desvio padrão da densidade de probabilidade [$\sigma = (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)^{1/2}$], em (D).

Fizemos medidas da corrente *Dreno*→*Fonte* em função da tensão *Porta-Fonte*, V_{GS} , e calculamos então a transcondutância extrínseca. Utilizando a densidade de carga apenas dos elétrons livres e o procedimento descrito na [seção 2.6](#) simulamos a curva de capacitância, e portanto de transcondutância intrínseca, do dispositivo. O resultado é mostrado na [figura 6-6](#) junto com os dados de nossa medida experimental de transcondutância.

Figura 6-6: Comparação entre a transcondutância e a capacitância dos elétrons livres para a PHEMT/InP. Os gráficos estão sobrepostos com os extremos das ordenadas obedecendo a equação 2.6-2.

Para obter tais curvas fizemos a aproximação dos pontos das curvas de $I_{DS} \times V_{GS}$ -*experimental* e de $n_{FREE} \times V_{GS}$ -*simulado* pela tangente hiperbólica (com 4 parâmetros de ajuste), prática comum para transistores tipo HEMT [49, 50], e então derivamos tal função hiperbólica.

O resultado é muito satisfatório dado o desconhecimento de alguns dados da estrutura para a simulação. Importante a se notar é a quase irrelevante diferença dos resultados com e sem os efeitos de *strain* para este dispositivo, nas propriedades analisadas. Esta diferença mínima é melhor observada na figura 6-7 que compara as sub-bandas e o valor esperado da posição do quarto auto-estado, com e sem *strain*.

Figura 6-7: comparações de variações de grandezas referentes à PHEMT/InP com e sem *strain*. Acima o valor esperado da posição do quarto auto-estado, único com alguma diferença visível nesta escala. Abaixo as sub-bandas.

Sem o efeito de *strain* não há o degrau entre o AlInAs com 40% e a liga com 52%, que confina um pouco mais os auto-estados. Assim o 4º auto-estado “escapa” do canal com uma voltagem um pouco menor, sem *strain*.

As sub-bandas apresentam diferenças por volta de 2meV, irrelevantes à temperatura ambiente para as grandezas mensuráveis aqui estudadas.

O efeito do *strain* é pequeno pois a densidade eletrônica se localiza no poço quântico e o *stress* está fora deste.

7. SUPER-REDE FINITA

O termo super-rede denota uma sequência infinita de poços quânticos acoplados [28]. Mostrou-se que muitas características de uma super-rede podem ser observadas em sistemas com uma quantidade finita de poços [51-53]. Às vezes apenas cinco ou seis poços acoplados são suficientes para extrapolar certas propriedades de super-redes, como mostrado na figura 7. Para o fenômeno que queremos tratar neste capítulo este será o caso, daí o termo super-rede finita (do inglês *Finite SuperLattice* – FSL). Usaremos também o termo mini-banda (quase-contínuo conjunto de auto-energias) para designar o conjunto de sub-bandas (discreto), embora impróprio.

Figura 7: largura das mini-bandas de elétrons e buracos em poços quânticos acoplados de GaAs em $\text{Al}_{20\%}\text{Ga}_{80\%}\text{As}$, em função do número de poços. Poços de 40 Å e barreiras de 20 Å [54].

Uma matéria de grande relevância acadêmica e tecnológica são as oscilações de pacotes-de-onda em poços quânticos (duplos, assimétricos e acoplados – ADQW, *assimetric double quantum well*) [55,56] e em super-redes [57-59] que têm sido associadas à observação de

emissão de ondas eletromagnéticas coerentes de comprimento-de-onda submilimétrico (infra-vermelho distante). A simplicidade do modelo para explicar tais emissões, através de uma oscilação de carga [60,61], e a revolução tecnológica que tais dispositivos causariam, por exemplo nos fotodetectores, chaveadores óticos e emissores infra-vermelhos torna o estudo destas heteroestruturas de grande interesse.

Em particular, para os poços duplos [55] é a assimetria a causa da localização do pacote-de-onda num instante inicial. Esta localização é indispensável para a formação da “carga” apenas em um dos poços, que irá oscilar emitindo radiação.

Outra matéria de muita pesquisa atualmente são os estados localizados (ou estados Tamm) [62-64] em super-redes, principalmente para estudos de éxcitons. Este estado Tamm quebra a simetria de translação da super-rede.

Neste trabalho foi simulada a oscilação de pacotes-de-onda numa heteroestrutura tipo super-rede finita onde a quebra de simetria necessária para localizar o pacote-de-onda inicialmente vem da inclusão de um estado Tamm. Como nos ADQW, pode-se associar tal oscilação à emissão infra-vermelha [51,52].

Outra proposta inovadora nesta heteroestrutura foi que, como fonte dos elétrons que ocuparão a FSL colocamos camadas de dopagem modulada “ensanduichando” a super-rede finita. Nos trabalhos de emissão de carga em heteroestruturas o suprimento de elétrons que oscilarão vêm de bombeamento óptico, através do uso de complexo laser com capacidade de chaveamento em femtosegundos.

A idéia de se utilizar múltiplos poços (super-rede finita) ao invés de dois apenas, como fizeram *Roskos et al* [55], é devido ao fato de

que o sinal da oscilação (emissão) num ADQW torna-se muito fraco com uma pequena variação do campo elétrico fora da ressonância. Os auto-estados, que quando em ressonância estão completamente deslocalizados, ao se alterar um pouco o campo elétrico sobre o ADQW voltam a se tornarem extremamente localizados. Como numa FSL os outros auto-estados já estão deslocalizados, acreditamos que a alteração do campo necessário para localizar novamente o estado Tamm tenha que ser maior, já que a ressonância agora ocorre mais deslocalizados. É extremamente necessário se ter interfaces com alto grau de perfeição para não se quebrar a coerência da oscilação, quando o pacote-de-onda tunela por elas, pelo menos durante um período de oscilação.

A heteroestrutura (FSL) proposta está esquematizada na figura 7-1.

Figura 7-1: esquema de camadas de materiais da super-rede finita. À camada mais espessa de GaAs corresponde um poço quântico mais largo, cuja primeira auto-energia (sub-banda) situa-se abaixo da mini-banda formada pelo acoplamento dos auto-estados dos outros poços. Há duas camadas com implante de doadores: a densidade de dopantes ionizados na camada superior é $8,25 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ numa espessura de 110 Å e na inferior é $0,75 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ em 50 Å.

Não se pode ter íons doadores dentro da FSL pois estes quebrariam a coerência de uma possível oscilação, devido ao espalhamento. Por isso colocamos a dopagem fora dos poços ou barreiras

entre eles. Inicialmente propusemos uma única camada modulada mas a distorção no perfil de potencial efetivo ao qual o elétron está sujeito não permitiu a obtenção de estados muito deslocalizados (mini-bandas). A inclusão de outra camada modulada abaixo da FSL corrigiu a inclinação do potencial efetivo, tornando os poços quase alinhados e permitindo que os auto-estados ficassem deslocalizados. Mesmo assim, várias configurações tiveram de ser testadas, referentes à largura e profundidade dos poços, à espessura dos materiais propostos e à fração de Al na liga $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, além das densidades de dopagem, vide [figura 7-2](#). Nossa intenção foi conseguir uma heteroestrutura onde, sem voltagem aplicada ao gate, apenas a sub-banda correspondente ao estado Tamm estivesse populada e a mini-banda estivesse vazia.

Figura 7-2: Perfis de potencial insatisfatórios. As densidades de probabilidade eletrônicas estão alinhadas com as respectivas auto-energias (mini ou sub-bandas). Problemas apontados: (A) e (B) densidade de dopantes insuficiente para popular qualquer sub-banda; (C) mini-banda populada; (D) acoplamento muito intenso que deslocaliza demais o estado Tamm.

À 77K, o perfil de potencial da heteroestrutura escolhida está indicado na [figura 7-3](#). Lembrando, entretanto, que este não é o único perfil possível.

Figura 7-3: (A) e (C) perfis de potencial e densidades de probabilidade eletrônicas da FSL, alinhadas com as respectivas sub-bandas nas voltagens indicadas. (B) densidade eletrônica correspondente à sub-banda Tamm. (D) Sub-bandas em relação ao nível de Fermi como função da voltagem de gate; observe a voltagem onde ocorre a primeira ressonância, 158mV.

Sem voltagem aplicada, a “carga” livre está toda obedecendo ao perfil localizado no poço Tamm ([figura 7-3\(B\)](#)). Como é um auto-estado, permanece neste perfil indefinidamente, em tempo real. Com a aplicação repentina da voltagem que causa a primeira ressonância da sub-banda Tamm com a mini-banda, o que era um auto-estado, sem tensão aplicada, agora deixa de ser e se torna um pacote-de-onda que terá uma evolução temporal nesse novo Hamiltoniano. Tal evolução é a oscilação que está

mostrada na [figura 7-4](#) e que deve emitir radiação com frequência de 0.6THz.

Figura 7-4: Esquerda: valor esperado da posição do inicialmente auto-estado Tamm, como função do tempo. Direita: densidade de probabilidade deste pacote-de-onda em alguns instantes selecionados.

Num Hamiltoniano que não corresponde à ressonância, a evolução temporal em nada lembra uma oscilação.

O rápido chaveamento no gate muda o potencial efetivo, e portanto o Hamiltoniano ao qual os elétrons estão submetidos. O retardo desta mudança deve ser menor que pelo menos um período de oscilação do pacote Tamm (1.64 ps), afim de que tal evolução temporal se processe no novo Hamiltoniano. Para estimar este tempo considere a heteroestrutura como um capacitor de impedância variável e em série com um resistor de 50Ω , valor comumente adotado para os cabos e outras impedâncias de circuitos com contatos Schottky. O tempo necessário para carregar este capacitor, quando se aplica 158mV, é uma estimativa do tempo de “acomodação” do Hamiltoniano.

As equações para um circuito RC em série com uma fonte de voltagem são:

$$V = \frac{Q}{C} + R \frac{dQ}{dt} \quad dt = \frac{RC}{VC - Q} dQ \quad \Delta t = R \int_0^{Q_T} \frac{C}{VC - Q} dQ$$

$R=50\Omega$, $V=158\text{mV}$, Q_T é a carga quando a FSL está sob 158mV

Assim, incluindo as curvas mostradas na [figura 7-5](#) no integrando da última equação, calculamos numericamente este tempo em 1.56ps , para uma área de contato Schottky de $2\text{ }\mu\text{m}^2$.

Figura 7-5: Ordenada esquerda: densidade de carga de elétrons livres presente na FSL em função da voltagem de gate. Direita: capacitância correspondente. O limite da abcissa é 158mV , voltagem sob a qual ocorre a ressonância entre o estado Tamm e a primeira sub-banda.

É possível, então, que tal heteroestrutura se estabilize antes dos 1.64 ps, período da oscilação do pacote que promove a emissão eletromagnética. Reduzindo a área do contato diminui-se mais ainda o tempo de estabilização do Hamiltoniano.

Expusemos, nesta simulação, uma possível emissão infravermelha distante, sem bombeamento óptico, devido a um rápido chaveamento na voltagem de gate aplicada a uma heteroestrutura semicondutora.

Outra heteroestrutura talvez possa ser proposta, de forma que o perfil de potencial mude mais rapidamente quando a voltagem de gate for chaveada. A inclusão de estimativas do tempo de defasagem devido à imperfeições nas interfaces seriam interessantes também.

O “auto-estado Tamm”, inicial, ao se chavear a tensão, se torna um estado que pode ser pensado como a combinação dos auto-estados (base) do novo Hamiltoniano resultante do chaveamento. Os principais elementos dessa base que comporão tal pacote de onda são os que estão em ressonância. Pode haver uma situação onde tal pacote seja a soma de auto-estados de uma *Escada Stark* [65] e assim a frequência da radiação emitida poderia ser controlada linearmente pelo campo elétrico (ou pela voltagem de gate) e não ser apenas uma emissão monocromática só sob o campo de ressonância. Dessa forma, tal oscilação seria um tipo de Oscilação de Bloch com frequência controlada pela tensão aplicada.

8. Conclusões

Através deste novo procedimento numérico auto-consistente, versátil e eficiente, simulamos o efeito de voltagens em contatos Schottky de heteroestruturas semicondutoras variadas, de aplicação tecnológica: *Transistores de Efeito de Campo com Dopagem Modulada*, pseudomorfos ou não.

Mostramos as alterações na estrutura eletrônica e a implicação destas com as grandezas mensuráveis, capacitância e transcondutância.

A simulação de HEMTs tradicionais apresentou uma excelente concordância com o experimento, vide [figura 4-5](#). Nosso procedimento mostrou claramente a forma das densidades de probabilidade das auto-funções e suas alterações devido ao efeito de campo externo.

Tal é a versatilidade do método que propusemos estruturas de Silício cristalino delta-dopado e as simulamos como possíveis transistores. Além da estrutura para os dois “tipos” de elétrons, capacitâncias e a possível performance do dispositivo são discutidas. Também propusemos e simulamos uma heteroestrutura com capacidade de emitir radiação infravermelha distante, devido ao efeito de campo.

Os HEMTs Pseudomorfos, já utilizados comercialmente e sendo os transistores mais promissores nas novas gerações de circuitos de telecomunicações e comunicações ópticas, foram simulados com sucesso, dada a consideração mais cuidadosa que nosso Hamiltoniano apresenta, com relação aos efeitos de *stress*. Tratamos PHEMTs baseados em GaAs e em InP teoricamente e no último também medimos experimentalmente sua

transcondutância. As figuras 6-2 e 6-6 mostram resultados muito importantes que permitiram avaliar a importância do *strain* nessas heteroestruturas.

É possível também inferir possíveis alterações de interesse tecnológico no transistor. Por exemplo, a alteração da largura e da posição do pico de transcondutância pela modificação da dopagem, conforme mostrado na figura 8-1 e equação 2.6-2.

Figura 8-1: simulação do deslocamento da curva de capacitância (e portanto transcondutância) da PHEMT/InP (seção 6.2) pela alteração da dopagem modulada. Na curva sólida a dopagem estende-se do *spacer* até o gate, nas demais ela pára na camada estressada. O asterisco indica a dopagem no plano delta do centro do poço.

A diminuição da dopagem faz com que uma tensão negativa menor seja necessária para influenciar a população as sub-bandas, daí o deslocamento das curvas para a direita, nesta figura. A alteração da densidade de doadores não tem expressiva atuação na altura dos picos de transcondutância.

Outra simulação, mostrada na [figura 8-2](#), nos dá idéia da influência da espessura da camada de $\text{In}_{0,4}\text{Al}_{0,6}\text{As}$ sobre a transcondutância intrínseca.

Figura 8-2: curvas de *capacitância* $\times$ *voltagem de gate* para PHEMT/InP onde se altera a espessura da camada tensionada (fora do poço). As espessuras estão indicadas sobre as curvas.

Na [figura 8-2](#) vemos que o aumento do pico de transcondutância pode ser associado à diminuição da camada estressada. Este aumento não tem muita relação com o fato da camada ser tensionada, como indicamos na [figura 6-6](#), mas sim com o aumento da distância ao gate. Uma curva mais "larga", que corresponde a maiores intervalos de tensão de gate onde o transistor tem performance superior, ocorre para maiores espessuras. O aumento da espessura e portanto da distância ao gate faz com que maiores tensões de gate positivas sejam necessárias para "influir" na densidade eletrônica do canal. Outra forma de visualizar estes resultados é apresentada na [figura 8-3](#).

Figura 8-3: valores de pico da figura 8-2. As projeções da curva são indicadas.

Outro resultado foi obtido deslocando o plano de dopagem tipo δ do centro do poço de InGaAs em 90 Angstroms, mostrado na figura 8-4.

Figura 8-4: capacitância e equivalente transcondutância intrínseca para o PHEMT/InP ao se deslocar a δ -dopagem do centro do canal em 90 Å.

A alteração da transcondutância é pouco expressiva devido ao deslocamento da δ e acreditamos que esta alteração seja devido à diminuição no número de elétrons livres. Deslocando a região onde se localiza a delta para a esquerda, região esta cuja densidade eletrônica não é considerada no cálculo dos elétrons livres, esta passa a se posicionar numa região do poço de potencial onde os elétrons mais se localizam, vide [fig. 6-4](#), diminuindo assim a densidade de carga livre.

Assim a otimização de dispositivos é uma das perspectivas deste procedimento.

Sendo o comportamento eletrônico basicamente quântico, nestes modernos transistores, a análise aqui realizada se mostra muito útil na pesquisa e desenvolvimento dos futuros dispositivos.

Todos os cálculos auto-consistentes foram realizados via INTERNET, pelo protocolo TELNET, no super-computador CRAY-YMP2E da UFRGS, Porto Alegre, RS, sendo possível, portanto, realizá-la em qualquer ponto de nosso país. Os mesmos podem ser realizados em micro-computadores de alta performance sem maiores problemas. A análise gráfica foi feita pelo software MicrocalOrigin v4.0 e os desenhos esquemáticos por PaintShopPro v.3.11. Na editoração utilizou-se MicrosoftWord 97.

Apêndice – Considerações sobre Stress e Strain

O tensor strain ϵ (às vezes traduzido para “esforço”) e o tensor stress σ (“tensão”), de rank 2, são os modos de se especificar o estado de deformação de um corpo. Um corpo está num *estado de stress* quando submetido a forças externas ou forças que uma parte do corpo exerce nas partes vizinhas.

σ é a força por unidade de área exercida na superfície de um diferencial de volume, pelo material que o envolve. O stress é dito *homogêneo* se a força que age num diferencial de volume de determinada forma e orientação independe da posição desse diferencial no material. As camadas estressadas dos PHEMTs do capítulo 6 são consideradas como submetidas a stress homogêneo.

Considerando uma orientação espacial qualquer, sendo o diferencial de volume como o exposto na figura A-1, os elementos do tensor stress serão:

σ_{ii} componentes normais

$\sigma_{ij}, i \neq j$ componentes de cisalhamento

Figura A-1: elemento diferencial de volume de um material. Sobre sua superfície estão indicadas as direções de atuação das componentes do stress, caso esteja neste estado.

Quando todas as componentes normais do stress são positivas o mesmo é dito *de tensão*. Quando negativas, é dito *de compressão* (esta definição pode ser invertida em piezoelasticidade ou fotoelasticidade). O poço ou camada estressada do PHEMT/GaAs, [seção 6.1](#), sofre uma compressão; ao passo que na PHEMT/InP, [seção 6.2](#), a camada estressada, fora do poço, sofre tensão.

Formas especiais do tensor stress:

- Uniaxial

Exemplo: barra vertical suportando uma massa em sua extremidade.

$$\begin{bmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

- Biaxial

Exemplo: chapa fina onde forças comprimem ou esticam suas arestas. É o caso nas camadas epitaxiais estressadas.

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

- Pressão Hidrostática

$$\begin{bmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{bmatrix}$$

O strain ϵ relaciona-se ao stress pelo módulo de elasticidade ou módulo de Young (E):

$$\sigma = E \epsilon$$

Mais completa abordagem do tema é obtida nos *capítulos V e VI* da Ref. [\[66\]](#).

REFERÊNCIAS

- [01a] S.Adachi - "Material parameters of $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ and related binaries", J. Appl. Phys. 53 (12), Dezembro 1982, pp.8775-8792.
- [01b] S.Adachi - "GaAs, AlAs, and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: Material parameters for use in research and device applications", J. Appl. Phys. 58 (3), Ag.1985, pp.R1-R29.
- [01c] K.Heime - "InGaAs Field-Effect Transistors", John Wiley & Sons Inc., Taunton, 1989.
- [01d] S.L.Chuang - "Physics of Optoelectronic Devices", Wiley Series in Pure and Applied Optics, pp.710-711,1995
- [01e] L.Hrivnak - "Determination of Γ electron and light hole effective masses in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ on the basis of energy gaps, band-gap offsets, and energy levels in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum wells", Appl. Phys. Lett. 56 (24), Jun. 1990, pp.2425-2427.
- [01f] M.J.Kelly - "Low-Dimensional Semiconductors, Materials, Physics, Technology, Devices", Oxford Science Publications, Oxford, 1995, pp.323,377.
- [02] M.H.Degani - "Stark ladders in strongly coupled GaAs-AlAs superlattices", Appl. Phys. Lett. 59 (1), Julho 1991, pp.57-59.
- [03] M.H.Degani - "Electron energy levels in a δ -doped layer in GaAs", Phys. Rev. B vol.44, no.11, Setembro 1991, pp.5580-5584.
- [04] M.H.Degani - "Electronic properties of multiple Si δ doping in GaAs", J. Appl. Phys. 70 (8), Outubro 1991, pp.4362-4365.
- [05] P.M.Smith - "Status of InP HEMT Technology for Microwave Receiver Applications", IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol.44, no.12, Dezembro 1996, pp.2328-2333.
- [06] B.Vinter - "Subbands and charge control in a two-dimensional electron gas field-effect transistor", Appl. Phys. Lett. 44 (3), Fev. 1984, 307.
- [07] E.F.Schubert - "The Delta-Doped Field-Effect Transistor (δFET)", IEEE Transactions on Electron Devices, vol.ED-33, no.5, Maio 1986, pp.625-632.

- [08] L.M.Gaggero-Sager, R.Pérez-Alvarez - "A simple model for delta-doped field-effect transistor electronic states", J. Appl. Phys. 78 (7), Outubro 1995, pp.4566-4569.
- [09] Y.Fu, M.Willander - "Subband structure and ionized impurity scattering of the two dimensional electron gas in δ -doped field effect transistor", J. Appl. Phys. 78 (5), Set.1995, pp.3504-3510.
- [10] H.H.Radamson, M.R.Sardela Jr., O.Nur, M.Willander, B.E.Sernelius, W.X.Ni, G.V.Hansson - "Electron mobility enhancement in Si using doubly δ -doped layers", Appl. Phys. Lett. 64 (14), Abril 1994, pp.1842-1844.
- [11] D.Krüger, P.Gaworzewski, R.Kurps, H.P.Zeindl - "Characterization of B and Sb delta-doping profiles in Si and $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys grown by molecular-beam epitaxy", J. Vac. Sci. Technol. B 14 (1), Jan./Fev. 1996, pp.341-347.
- [12] P.M.Smith, S.M.J.Liu, M.Y.Kao, P.Ho, S.C.Wang, K.H.G.Duh, S.T.Fu, P.C.Chao - "W-band high efficiency InP-based power HEMT with 600 GHz f_{max} ", IEEE Microwave Guided Wave Lett., vol.5, no.7, Julho 1995, pp.230-232.
- [13] C. Weisbuch and B. Vinter, Quantum Semiconductor Structures: Fundamentals and Applications (Academic Press, inc., San Diego, 1991).
- [14] L. Hedin, B.I. Lundqvist - "Explicit local exchange-correlation potentials", J.Phys.C: Solid St. Phys. 4 (14), pp.2064-2083, (1971).
- [15] P.Ruden, G.H.Döhler - "Electronic structure of semiconductors with doping superlattices", Phys.Rev.B, v27, no.6, pp.3538-3546, Março 1983.
- [16] B.Lee - "Wigner Transport Equations for Strained Heterostructures", Superlattices and Microstructures, vol.14, no.4, pp.291-293, 1993.
- [17] J.H.Oh, K.J.Chang, G.Ihm - "Electronic Structure of $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$ Strained Quantum Wells with a δ -doped Layer", J. Phys.: Condens. Matter 8, pp.1705-1712, 1996.
- [18] G.T.Einevoll, P.C.Hemmer, J.Thomsen - "Operator ordering in effective-mass theory for heterostructures. I. Comparison with exact results for superlattices, quantum wells, and localized potentials", Phys. Rev. B, vol.42, no.6, Agosto 1990, pp.3485-3496.
- [19] G.T.Einevoll - "Operator ordering in effective-mass theory for heterostructures. II. Strained systems", Phys. Rev. B, vol.42, no.6, Agosto 1990, pp.3497-3502.

- [20] R.F.Pierret – “Advanced Semiconductor Fundamentals, in Modular Series on Solid State Devices”, vol.VI, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1987.
- [21] A.M.Cowley, S.M.Sze – “Surface States and Barrier Height of Metal-Semiconductor Systems”, J. Appl. Phys., vol.36, no.10, Out.1963, pp.3212-3220.
- [22] D.S.Lee, J.G.Fossum – “Energy-Band Distortion in Highly Doped Silicon”, IEEE Trans. On Electron Devices, ED-30, 626, Junho 1983.
- [23] F.Stern, W.W.Howard – “Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit”, Phys. Review, vol.163, no.3, Nov.1967, pp.816-835.
- [24] M.A.Souza – “Propriedades eletrônicas de um poço duplo assimétrico com dopagem delta”, Dissertação de Mestrado - IFQSC - USP - 1994.
- [25] I-H.Tan, G.L.Snider, L.D.Chang, E.L.Hu - “A self-consistent solution of Schrödinger-Poisson equations using a nonuniform mesh”, J. Appl. Phys. 68 (8), Outubro 1990, pp.4071-4076.
- [26] D.U.von Rosenberg - “Methods for the numerical solution of partial differential equations - Modern Analytic and Computational Methods in Science and Mathematics”, Elsevier, New York, 1975.
- [27] J.E.Manzoli – “Dinâmica de Pacotes de Onda em Fios e Poços Quânticos duplos Assimétricos e Acoplados”, Dissertação de Mestrado - IFQSC - USP - 24/9/1993.
- [28] L.Esaki, R.Tsu - “Superlattice and negative conductivity in semiconductors”, IBM Res. Rep. RC-2418, 1969.
- [29] H.L.Stormer, R.Dingle, A.C.Gossard, W.Wiegmann, M.D.Sturge - “Two-Dimensional electron gas at differentially doped GaAs-Al_xGa_{1-x}As heterojunction interface”, Vac. Sci. Technol., vol.16, pp.1517-1519, 1979.
- [30] T.Mimura, S. Hiyamizu, T.Fujii, K.Nanbu - “A new field effect transistor with selectively doped GaAs/n-Al_xGa_{1-x}As heterostructures”, Japanese J. Appl. Phys., vol.19, pp.L225-L227, 1980.
- [31] T.Drummond, W.T.Masselink, H.Morkoç - “Modulation-Doped GaAs/(Al,Ga)As Heterojunction Field-Effect Transistors: MODFETs”, Proceedings of the IEEE, vol.74, no.6, Junho 1986, pp.773-815.
- [32] A.DasGupta, N.DasGupta - “A Simple Analytical Model for Gate Capacitance-Voltage Characteristics of HEMTs”, Solid-St. Electron., v.37, no.7, pp.1377-1381, 1994.

- [33] S. Hiyamizu, J.Saito, K.Nanbu, T.Ishikawa - "Improved electron mobility higher than 10^6 cm²/Vs in selectively doped GaAs/N-AlGaAs heterostructures grown by MBE", Japanese J. Appl. Phys., vol.22, pp.L606-L611, 1983.
- [34] M.J.Maloney, F.Ponse, H.Morkoç - "Gate capacitance-voltage characteristics of MODFETs: Its effect on transconductance", IEEE Trans. Electron Devices, vol.ED-32, pp. 1675-1648, Set.1985.
- [35] J.E.Manzoli, O.Hipólito - "Electronic Structure and Gate Capacitance Voltage Characteristics of MBE Silicon δ -FETs" in Materials Modification and Synthesis by Ion Beam Processing - edited by D. E. Alexander, W. Skorupa, N. W. Cheung and B. Park (Mater. Res. Soc. Proc. 438, Pittsburgh, PA, 1997).
- [36] J.E.Manzoli, O.Hipólito - "Numerical Gate Capacitance - Voltage Characteristics and Electronic Structure of MBE Silicon δ -FETs" - submitted to Microelectronic Engineering.
- [37] T.K. Carns, X. Zheng, K.L. Wang, S.L. Wu and S.J. Wang, J. Vac. Sci. Technol. B {12} (2) (1994) 1203.
- [38] S.M. Sze, Physics of Semiconductor Devices (Wiley-Interscience, 2nd ed., Singapore, 1981) pag. 46.
- [39] R.F.Pierret - "Field Effect Devices, in Modular Series on Solid State Devices", vol.IV, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1990.
- [40] W. D. Callister, Jr. - "Materials Science and Engineering, an Introduction", John Wiley & Sons, Inc., New York, 1994.
- [41] T.Henderson, M.I.Aksun, S.K.Peng, H.Morkoç, P.C.Chao, P.M.Smith, K.H.G.Duh, L.F.Lester - "Microwave performance of a quarter-micrometer gate low-noise pseudomorphic InGaAs/AlGaAs modulation-doped field-effect transistor", IEEE Electron Device Lett., vol.7, pp.649-651, Dez.1986.
- [42] M.I.Aksun, C.K.Peng, A.A.Ketterson, M.Morkoç - "High frequency modulation doped field effect-transistors in InAlAs/InGaAs/InP material system", in IEDM Tech. Dig., 1986, pp.822-823.
- [43] T.Enoki, K.Arai, A.Kohzen, Y.Ishii - "Design and Characteristics of InGaAs/InP Composite-Channel HFET's", IEEE Trans. Electron Devices, vol.42, no.8, Ag.1995, pp.1413-1418.
- [44] A.Chin, T.Y.Chang - "Achievement of exceptionally high mobilities in modulation-doped Ga_{1-x}In_xAs on InP using a stress compensated structure", J.Vac.Sci.Technol. B 8 (2), Mar./Abr. 1990, pp.364-366.

- [45] A.M.Küsters, R.Wüller, H.J.Geelen, A.Kohl, K.Heime – “Sub-Half-Micrometer Pseudomorphic InP/In_xGa_{1-x}As/InP HEMT's ($0.74 \leq x \leq 0.81$) with Very High f_T Values”, IEEE Electron Device Lett., vol.16, no.9, Set.1995, pp.396-398.
- [46] M.Ke, D.Westwood, R.H.Williams, M.J.Godfrey – “Theoretical and experimental investigations of the electronic structure for selectively δ -doped strained In_xGa_{1-x}As/GaAs quantum wells”, Phys.Rev.B, vol.51, no.8, Fev.1995, pp.5038-5042.
- [47] L.D.Nguyen, W.J.Schaff, P.J.Tasker, A.N.Lepore, L.F.Palmateer, M.C.Foisy, L.F.Eastman – “Charge Control, DC, and RF Performance of a 0.35 μ m Pseudomorphic AlGaAs/InGaAs Modulation-Doped Field-Effect Transistor”, IEEE Trans. Electron Devices, vol.35, no.2, Fev.1988, pp.139-144.
- [48] J.J.Brown, Ph.D. – Hughes Research Labs., Malibu, CA – comunicação pessoal.
- [49] A.Eskandarian – “Determination of the Small-Sign Parameters of an AlGaAs/GaAs MODFET”, IEEE Trans. Electron Devices, vol.35, no.11, Nov.1988, pp.1793-1801.
- [50] M.A.Romero, A.A.Salles – “Modelamento DC e RF para os Transistores de Alta Mobilidade (HEMTs)”, IV Simpósio Brasileiro de Microondas – 25 à 27/07/1990, São Carlos, SP – Anais, pag.225-230.
- [51] J.E.Manzoli, O.Hipólito - “Numerical Simulation of Electronic Behavior in a Finite Superlattice with a Tamm State: a Possible Submillimeter Wave Emitter Without Optical Pumping” in Infrared Applications of Semiconductors - Materials, Processing and Devices - edited by M.Omar Manasreh, Thomas H. Myers and François H. Julien (Mater. Res. Soc. Proc. 450, Pittsburgh, PA, 1997) pp.439-444.
- [52] J.E.Manzoli, O.Hipólito - “Finite Superlattice With a Localized State: a Possible New Submillimeter Wave Emitter, in a Numerical Simulation” - submitted to Microelectronic Engineering.
- [53] F.Beltran - 6th. Brazilian School of Semiconductor Physics, São Carlos, SP, 1993.
- [54] D.Bosquetti, J.E.Manzoli, O.Hipólito - “Estudo de Heteroestruturas de Baixa Dimensionalidade para Simulações Numéricas: Mini-bandas, Stark Ladder e Oscilações de Bloch em Super-Redes” - XVII ENFMC - Caxambú, MG, Brasil, 7 à 11/06/1994, p.327.
- [55] H.G. Roskos, M.C. Nuss, J. Shah, K. Leo, D.A.B. Miller, A.M. Fox, S. Schmitt-Rink, K. Köhler- “Coherent Submillimeter-Wave Emission from Charge Oscillations in a Double-Well Potential”, Phys.Rev.Lett. v68, no.14, pp.2216-2219 (1992).

- [56] S. Luryi - "Polarization Oscillations in Coupled Quantum Wells - A Scheme for the Generation of Submillimeter Electromagnetic Waves", IEEE Journal of Quantum Electronics, V27, no.1, pp.54-60, Janeiro 1991.
- [57] K.Leo, P.H.Bolivar, F.Brüggemann, R.Schwedler, K.Köhler - "Observation of Bloch Oscillations in a Semiconductor Superlattice", Solid St. Communications, v84, no.10, pp.943-946, 1992.
- [58] K.Leo, J.Feldmann, J.Shah, G. von Plessen, P.Thomas, S.Schmitt-Rink, J.Cunningham - "Optical Investigation of Bloch Oscillations in Semiconductor Superlattices", v13, no.1, pp.55-60, 1993.
- [59] P.Leisching, P.H.Bolivar, R.Schwedler, K.Leo, H.Kurz, K.Köhler, P.Ganser - "Investigation of Bloch oscillations in a GaAs/AlGaAs superlattice by spectrally resolved four-wave mixing", Semicond. Sci. Technol. 9, pp.419-421, 1994.
- [60] C. Dean - "Simple Schrödinger Wave Functions which Simulate Classical Radiating Systems", Am. J. Phys. {27}, pp.161-163, (1959).
- [61] F.E.Low - "Correspondence Principle Approach to Radiation Theory", Am.J.Phys. 29, pp.298-299, (1961).
- [62] H. Ohno, E.E. Mendez, J.A. Brum, J.M. Hong, F. Agulló-Rueda, L.L. Chang, L. Esaki - "Observation of "Tamm States" in Superlattices", Physical Review Letters v64 no.21, pp.2555-2558, Maio 1990.
- [63] F. Agulló-Rueda, E.E.Mendez, H.Ohno, J.M.Hong - "Interactions between extended and localized states in superlattices", Physical Review B (Rapid Comm.), v42, no.2, pp.1470-1473, Julho 1990.
- [64] I. Tanaka, M. Nakayama, H. Nishimura, K. Kawashima, K. Fujiwara - "Resonant Coupling between buried single-quantum-well and Wannier-Stark-localization states in a GaAs/AlAs superlattice", Solid-State Electronics v37 nos.4-6, pp.863-866, (1994).
- [65] E.E. Mendez and G. Bastard - "Wannier-Stark Ladders and Bloch Oscillations in Superlattices", Physics Today, pp.34-42, Junho 1993.
- [66] J.F.Nye - "Physical Properties of Crystals", Oxford University Press, London, 1964.