



Fabricação, Caracterização e Simulação de nanoestruturas Baseadas em Semicondutores

Palavras-Chave: Rolled-up Nanotubes, Optical resonators, III-V semiconductors

Autores/as:

Gabriel Gomes dos Santos [IFGW-UNICAMP]

Prof. Dr. Christoph Friedrich Deneke (orientador) [DFA-IFGW-UNICAMP]

INTRODUÇÃO:

Micro e Nanotubos são estruturas circulares que podem ser criadas de uma grande abundância de materiais, com diferentes espessuras e diâmetros, e posicionadas à vontade do experimentador. Tendo sido primeiro propostas por Prinz et al [1], estas estruturas são criadas a partir do rolamento natural de membranas tensionadas, liberadas a partir da corrosão seletiva da camada sacrificial. A partir da sua proposição, nanotubos são alvo de interesse de cientistas do mundo todo [2] por muitas características [3]. Uma das características interessantes que estas estruturas podem apresentar é a presença de modos de “whispering gallery” azimutais, modos ressonantes constituídos por ondas que se propagam ao redor do nanotubo e interagem consigo mesmas de forma construtiva [4], [5]. Estes modos foram bem estabelecidos no passado, tendo sido possível atingir *lasing* [6] em modos que ocorrem para comprimentos de onda maiores que 1000 nm. Porém, a falta de modos sustentáveis encontrados dentro do espectro visível se tornou um grande problema da área, visto que o Arsenieto de Gálio possui alta absorção nesta parte do espectro eletromagnético. Este problema implica na necessidade de otimização da estrutura para melhorar os fatores de qualidade dos modos ressonantes dentro do espectro visível.

Apesar de ter sido conduzida no passado, otimizações das estruturas de nanotubos são processos demorados, requerendo muito material para criação das amostras e tempo para processamento das mesmas em nanotubos funcionais. Por este motivo, simulações computacionais são utilizadas na tentativa de predeterminar uma estrutura otimizada, economizando tempo e material. Uma técnica de simulação altamente utilizada para simulações eletromagnéticas é FDTD – Finite Difference Time Domain [7].

FDTD é um método que usa a discretização de tempo para determinar o estado de um sistema em determinado intervalo de tempo, a partir do estado do mesmo sistema no intervalo de tempo anterior. Este método faz isso a partir da resolução numérica das equações de Maxwell, mas pode ser empregado de diferentes formas, com diferentes ferramentas. A ferramenta utilizada neste trabalho é a base de código MEEP, que possui uma interface em Python [8], [9].

No trabalho aqui apresentado, o código MEEP foi utilizado para simular nanotubos baseados em GaAs, embebidos com estruturas que emitem sinais eletromagnéticos na faixa de baixa energia do espectro visível de radiação eletromagnética (700 ~ 800 nm). Isso é feito para se estudar a presença de modos ressonantes nesta faixa de frequência, sendo uma faixa de emissão de alto interesse de se encontrar modos ressonantes abrangida por estruturas previamente criadas pelo nosso grupo de pesquisa. Com o auxílio de dados previamente retirados em laboratório, foram conduzidas sistematicamente simulações de nanotubos com diferentes espessuras e diferentes

condições de revestimento óxido, a fim de se encontrar modos ressonantes potencialmente reproduzíveis em nanotubos reais. Foram encontradas ressonâncias de baixo fator de Qualidade para anéis puros de GaAs, sendo posteriormente mostrados – por uma ferramenta dentro do código MEEP – como flutuações tomadas como modos ressonantes. Estes modos foram descartados, sendo utilizado o termo ‘pseudo-modos’ para outras ressonâncias parecidas, e o limiar de $Q > 200$ foi determinado para descartar estes pseudo-modos encontrados em outras estruturas. Utilizando tubos com revestimento óxido de Al_2O_3 e TiO_2 no interior e exterior de uma camada central de 45 nm de GaAs, foram encontrados modos com fatores de qualidade mensuráveis em laboratório, sendo o maior fator de qualidade encontrado como sendo $Q=1651$ para uma estrutura de 200 nm TiO_2 / 200 nm Al_2O_3 / 45 nm GaAs / 200 nm Al_2O_3 / 200 nm TiO_2 .

METODOLOGIA:

Para a condução do experimento aqui exposto, foi utilizado um código construído conjuntamente pelo orientador e aluno, onde uma fonte que emite um sinal gaussiano é disposta na parede do nanotubo de GaAs. Este tubo é construído pela sobreposição de cilindros com eixos sobrepostos contendo raios ligeiramente diferentes, dando a impressão de um anel. Assim, ao se posicionar um cilindro com índice de refração $n=1$ e $2,525 \mu\text{m}$ de raio no interior de outro cilindro com o índice de refração de GaAs e raio $2,570 \mu\text{m}$, o código interpreta como um tubo oco de $2,525 \mu\text{m}$ de raio interno e 45 nm de espessura, constituído de GaAs, que é o efeito desejado.

Para poupar tempo de simulação, ao invés de simular uma estrutura tridimensional, simulamos um anel bidimensional, visto que o modo ressonante dos nanotubos podem ser aproximados por modos de anéis bidimensionais [10]. Na figura 1a, vemos um corte de um anel puramente de GaAs, enquanto na figura 1b, o corte é respectivo a um anel de 45 nm de GaAs com revestimento óxido de 50 nm de Al_2O_3 e outros 50 nm de TiO_2 . Esta figura mostra os dois modelos de nanotubos simulados neste trabalho, anéis puros de GaAs (1a), e anéis de GaAs com revestimento de óxidos (1b).

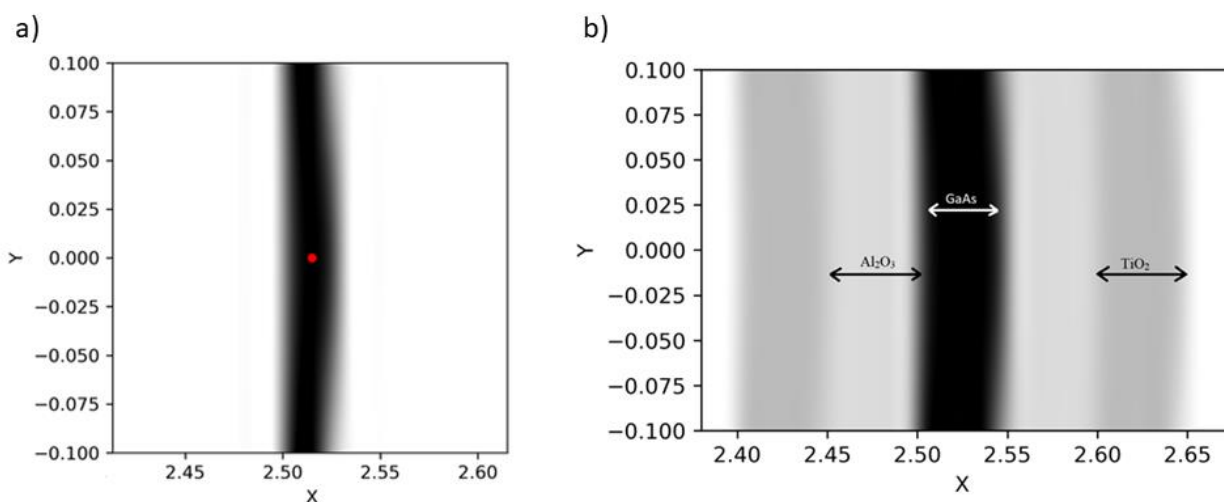


Figura 1 - Representação de um corte do anel simulado. a) anel composto de uma camada de 30 nm de GaAs; b) anel composto pela estrutura 50 nm TiO_2 /50 nm Al_2O_3 /45 nm GaAs/50 nm Al_2O_3 /50 nm TiO_2

Cinco séries de simulações foram conduzidas com estas duas estruturas, sendo uma sobre estruturas de anéis somente de GaAs, e quatro com anéis de GaAs com revestimento óxido. Na série de simulações sobre tubos somente de GaAs, a espessura destes anéis foi alterada de 30 nm a 200 nm, em passos de 10 nm cada, totalizando 18 simulações com este tipo de estrutura. Já nas séries de tubos com revestimento óxido, a estrutura $x \text{ nm TiO}_2/y \text{ nm Al}_2\text{O}_3/45 \text{ nm GaAs}/y \text{ nm Al}_2\text{O}_3/x \text{ nm TiO}_2$ foi simulada, com diferentes espessuras dos revestimentos óxidos. Na primeira série de simulações com revestimento, a espessura do óxido de alumínio foi fixa em $y=30 \text{ nm}$, enquanto a

espessura 'x' do óxido de titânio foi alterada de 30 a 200 nm, em passos de 10 nm cada simulação. Na segunda e terceira séries de simulações com revestimento dielétrico, as espessuras do TiO₂ foram mantidas constantes com x=100 nm e x=200 nm, respectivamente, enquanto a espessura 'y' do Al₂O₃ foi alterada, novamente de 30 a 200 nm, em passos de 10 nm. Por fim, a quarta série de simulações com revestimento foi conduzida mantendo as camadas óxidas com a mesma espessura x=y, novamente de 30 a 200 nm em passos de 10 nm. Após esta retirada de dados, a média dos fatores de qualidade dos modos encontrados foi retirada para cada simulação e foi plotado um gráfico relacionando a espessura da camada sendo alterada com este valor.

Por fim, foi feito o uso de uma ferramenta do MEEP que permite o código a emitir imagens com uma representação do campo elétrico em determinados momentos. Com estas imagens, é possível verificar a posição e distribuição do campo elétrico sobre o guia de onda, de forma a identificar modos ressonantes reais de erros do código. Como MEEP usa inversão harmônica para encontrar possíveis modos ressonantes [11], é possível que o código aponte algumas flutuações no campo elétrico que ocorrem devido a artefatos computacionais como modos ressonantes. Com o uso de imagens do campo elétrico, podemos identificar e descartar estes artefatos, aos quais nos referimos como "pseudo-modos".

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Com os resultados da série de simulações feito utilizando anéis compostos unicamente de GaAs, os resultados apresentados na figura 2 foram derivados. A figura 2a mostra a relação de espessura com fator de qualidade médio encontrado na simulação que foi realizada com uma fonte gaussiana com emissão de 700 a 800 nm. Por outro lado, a figura 2b mostra a mesma análise feita quando a simulação é repetida para a mesma estrutura, porém, com a fonte gaussiana possuindo 10 nm de largura, centrada em cada ressonância encontrada na simulação anterior.

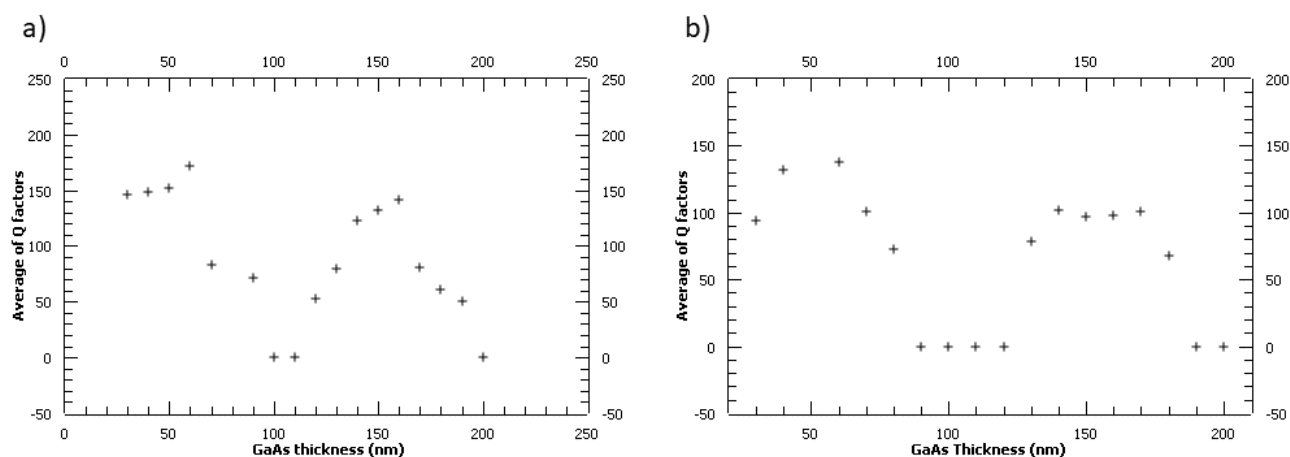


Figura 2-Análise de dados sobre estruturas puramente de GaAs. a) análise de fator de qualidade em função de espessura do anel para fonte entre 700 e 800 nm; b) análise de fator de qualidade em função de espessura do anel para fontes gaussianas focadas nas ressonâncias previamente encontradas

A partir da figura 2a, é possível observar que há dois máximos locais do fator de qualidade médio, um para a estrutura com 60 nm de GaAs e outro para a estrutura com 160 nm do semiconductor. Estes máximos ocorrem para $Q_{ave}=175$ e $Q_{ave}=150$, respectivamente. Entre estes pontos, há um vale onde a média do fator de qualidade se anula para estruturas de 100 e 110 nm de GaAs. De qualquer forma, nenhum valor de fator de qualidade ultrapassa o valor $Q=200$. Para as simulações com fontes mais estreitas, porém, os máximos locais caem para $Q_{ave}=140$ e $Q_{ave}=100$, respectivamente, enquanto o vale se estende de 90 a 120 nm. Como estes dados são mais confiáveis, é possível dizer que o fator de qualidade médio para anéis unicamente de GaAs não ultrapassam $Q_{ave}>150$ e nenhum fator de qualidade individual ultrapassa $Q=200$. A única

exceção para ambas afirmações é um modo na estrutura com 50 nm de GaAs que chega a $Q \approx 2600$. Como este modo está isolado na estrutura e foge à regra de todos os modos de anéis puramente de GaAs, foi um dos modos estudados mais a fundo com imagens do campo elétrico, que mostraram que este e todos os outros modos ressonantes encontrados para estruturas puramente de GaAs são artefatos computacionais. Visto que outros modos encontrados em medições prévias apontam para modos com $Q < 200$ como sendo todos artefatos computacionais, o que é corroborado por todas as imagens de campos elétricos retiradas nesta série de simulações. Por este motivo, $Q = 200$ é tomado como um mínimo para um modo ser considerado elegível como um modo ressonante real. De outro modo, se $Q < 200$, o modo é assumido como um “pseudo-modo” e é descartado.

Com os resultados da série de simulações feitos utilizando estruturas de x nm TiO_2/y nm $\text{Al}_2\text{O}_3/45$ nm GaAs/ y nm $\text{Al}_2\text{O}_3/x$ nm TiO_2 , com $x=y$ sendo alterado a cada simulação, os resultados apresentados na figura 3 foram derivados. A figura 3a mostra a relação de espessura dos óxidos com fator de qualidade médio encontrado na simulação que foi realizada com uma fonte gaussiana com emissão de 700 a 800 nm. Por outro lado, a figura 3b mostra a mesma análise feita quando a simulação é repetida para a mesma estrutura, porém, com a fonte gaussiana possuindo 10 nm de largura, centrada em cada ressonância encontrada na simulação anterior.

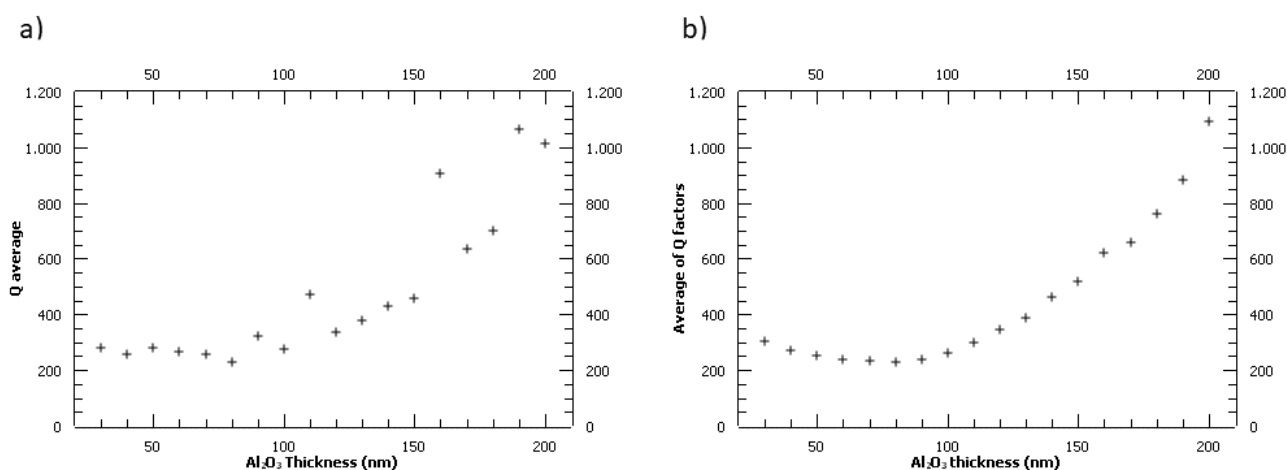


Figura 3-Análise de dados sobre estruturas com cobertura oxidada, onde ambos os óxidos possuem a mesma espessura. a) análise de fator de qualidade em função de espessura dos óxidos para fonte entre 700 e 800 nm; b) análise de fator de qualidade em função de espessura dos óxidos para fontes gaussianas focadas nas ressonâncias previamente encontradas.

A partir da figura 3a, é possível notar um aumento do fator de qualidade médio com a espessura dos óxidos a partir da espessura de 100 nm. O fator de qualidade médio aumenta de $Q_{ave} = 300$ para $Q_{ave} = 1000$ neste intervalo. Este aumento possui alguns pontos que fogem à curva, mas, em média, as ressonâncias são mais acentuadas conforme a espessura dos óxidos aumenta. Isso é corroborado pelos dados na figura 3b, onde há um crescimento a partir da estrutura com 80 nm de espessura dos óxidos. Este aumento ocorre de $Q_{ave} \approx 250$ até $Q_{ave} \approx 1100$, para a estrutura de 200 nm $\text{TiO}_2/200$ nm $\text{Al}_2\text{O}_3/45$ nm GaAs/ 200 nm $\text{Al}_2\text{O}_3/200$ nm TiO_2 . As imagens de campos elétricos mostram que os modos encontrados apresentam padrões de campos pertinentes com modos de whispering gallery azimutais de nanotubos.

CONCLUSÕES:

Neste trabalho, conduzimos diferentes séries de simulações a fim de estudar modos ressonantes em nanotubos baseados em GaAs. É claro, dos resultados obtidos de anéis de Arsenieto de Gálio sem revestimento, que estas estruturas não apresentam ressonâncias mensuráveis no espectro visível da luz. Usando as imagens de campo elétrico, os modos com fator de qualidade menor que 200 foram mostrados como possuindo apenas “pseudo-modos”, o que é o caso para todas as ressonâncias encontradas para anéis puramente de GaAs. Isso concorda com

os resultados de laboratório do grupo de pesquisa, que não encontraram nenhum modo de whispering gallery em nanotubos enrolados.

Ademais, simulações foram conduzidas com estruturas baseadas em GaAs com revestimento óxido. Quatro series de simulações diferentes foram conduzidas com este tipo de estrutura, na tentativa de criar um guia de onda que acomodem modos ressonantes acoplado ao nanotubos de GaAs. Usando análise da média do fator de qualidade e do número de modos encontrados em cada simulação, juntamente com análise de imagens de campo elétrico quando necessário, fomos capazes de identificar estruturas promissoras de serem fabricadas e medidas experimentalmente. Além disso, não foram encontrados modos ressonantes para a estrutura previamente estudada 30 nm TiO₂/30 nm Al₂O₃/45 nm GaAs/30 nm Al₂O₃/30 nm TiO₂, concordando com os resultados encontrados ao estudá-la.

Encontramos diversas estruturas com modos potencialmente mensuráveis e altos fatores de qualidade. Entre estes, o modo mais promissor é 200 nm TiO₂/200 nm Al₂O₃/45 nm GaAs/200 nm Al₂O₃/200 nm TiO₂, possuindo uma média de fatores de qualidade de $Q_{ave}=1092$, com o modo com maior medição possuindo $Q=1651$, sob comprimento de onda $\lambda=726$ nm. Imagens do campo elétrico deste modo mostraram que o campo elétrico ressonante sobrepõe a camada de GaAs, possibilitando a interação da mesma com os emissores óticos embebidos nesta camada, tornando esta estrutura altamente promissora para experimentos futuros.

BIBLIOGRAFIA

- [1] V. Y. Prinz *et al.*, “Free-standing and overgrown InGaAs/GaAs nanotubes, nanohelices and their arrays”, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 6, n° 1, p. 828–831, fev. 2000, doi: 10.1016/S1386-9477(99)00249-0.
- [2] A. Cho, “Nanotechnology - Pretty as you please, curling films turn themselves into nanodevices”, *Science*, vol. 313, n° 5784, p. 164–165, jul. 2006.
- [3] O. G. Schmidt e K. Eberl, “Thin solid films roll up into nanotubes”, *Nature*, vol. 410, n° 6825, Art. n° 6825, mar. 2001, doi: 10.1038/35065525.
- [4] T. Kipp, H. Welsch, Ch. Strelow, Ch. Heyn, e D. Heitmann, “Optical Modes in Semiconductor Microtube Ring Resonators”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 96, n° 7, p. 077403, fev. 2006, doi: 10.1103/PhysRevLett.96.077403.
- [5] C. Strelow *et al.*, “Optical microcavities formed by semiconductor microtubes using a bottle-like geometry”, *Physical Review Letters*, vol. 101, n° 12, p. 127403, set. 2008, doi: 10.1103/PhysRevLett.101.127403.
- [6] F. Li e Z. Mi, “Optically pumped rolled-up InGaAs/GaAs quantum dot microtube lasers”, *Opt. Express, OE*, vol. 17, n° 22, p. 19933–19939, out. 2009, doi: 10.1364/OE.17.019933.
- [7] D. M. Sullivan, *Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method*. John Wiley & Sons, 2013.
- [8] A. F. Oskooi, D. Roundy, M. Ibanescu, P. Bermel, J. D. Joannopoulos, e S. G. Johnson, “Meep: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method”, *Computer Physics Communications*, vol. 181, n° 3, p. 687–702, mar. 2010, doi: 10.1016/j.cpc.2009.11.008.
- [9] E. Lambert *et al.*, “Python Bindings for the Open Source Electromagnetic Simulator Meep”, *Computing in Science Engineering*, vol. 13, n° 3, p. 53–65, maio 2011, doi: 10.1109/MCSE.2010.98.
- [10] X. Li, “Self-rolled-up microtube ring resonators: a review of geometrical and resonant properties”, *Adv. Opt. Photon., AOP*, vol. 3, n° 4, p. 366–387, dez. 2011, doi: 10.1364/AOP.3.000366.
- [11] V. A. Mandelshtam e H. S. Taylor, “Harmonic inversion of time signals and its applications”, *J. Chem. Phys.*, vol. 107, n° 17, p. 6756–6769, nov. 1997, doi: 10.1063/1.475324.