

# Uso de cálculos computacionais para auxílio ao projeto e análise de revestimentos antirrefletores para sensores de infravermelho

## RESUMO

Buscando melhoria do desempenho de fotodetectores construídos sobre substrato de fosfeto de índio (InP), o presente trabalho mostra como cálculos computacionais, relativamente simples, permitem obter parâmetros ideais para escolha de materiais adequados à deposição de revestimentos antirrefletores (RAR), além de auxiliar na análise desses filmes. Por conta de seu índice de refração próximo do ideal, a alumina ( $Al_2O_3$ ) foi identificada como uma boa opção de material para RAR. Utilizando a mesma metodologia, determinamos a espessura ideal da cama. Filmes reais foram depositados, por evaporação induzida por feixe eletrônico, e caracterizados. Os cálculos permitiram interpretar os dados coletados e determinar os índices de refração efetivamente obtidos. O experimento mostrou diminuições expressivas das refletâncias médias, tanto em substratos de InP sem camadas epitaxiais, quanto em substratos de InP com camadas epitaxiais de arseneto de gálio e índio, InGaAs. Os cálculos também permitiram identificar caminhos a seguir para melhorar o resultado.

**Palavras-chave:** Revestimento Antirrefletores; Fosfeto de Índio; Fotodiodo InGaAs.

**Giordano Bruno Crepaldi DeSimone**  
[giordano\\_desimone@gmail.com](mailto:giordano_desimone@gmail.com)  
[orcid.org/0000-0002-1244-8051](https://orcid.org/0000-0002-1244-8051)  
Instituto de Estudos Avançados (IEAv),  
São José do Campos, São Paulo, Brasil.

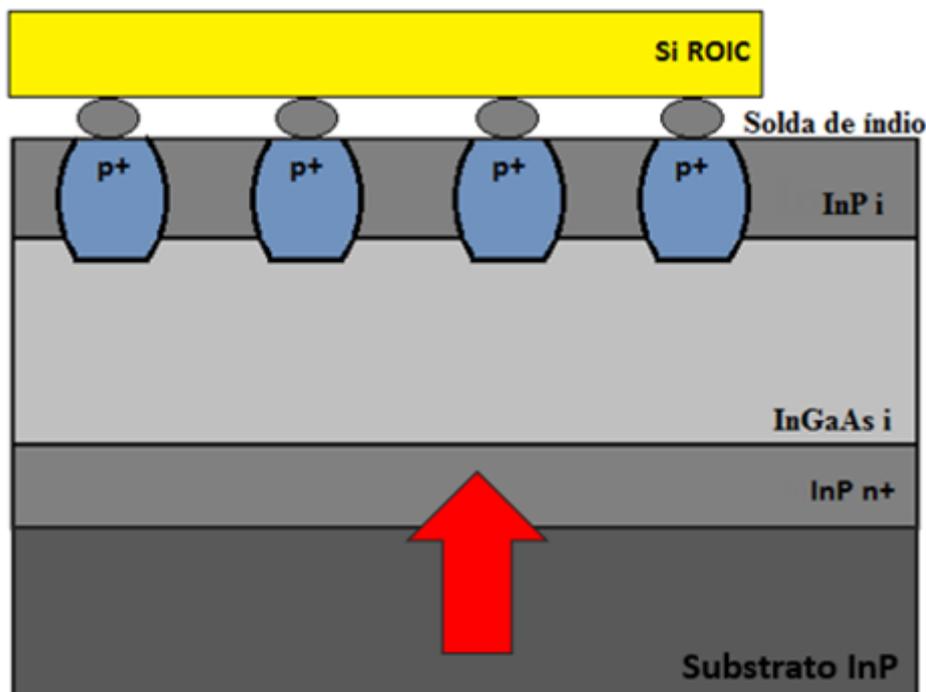
**Gustavo Soares Vieira**  
[gvieira@ieav.cta.br](mailto:gvieira@ieav.cta.br)  
[orcid.org/0000-0002-9512-0026](https://orcid.org/0000-0002-9512-0026)  
Instituto de Estudos Avançados (IEAv),  
São José do Campos, São Paulo, Brasil.

## INTRODUÇÃO

Fotodetectores de infravermelho são de interesse estratégico em diversos setores relevantes para nosso país. É possível encontrar aplicações nos setores de agronegócio, aviação (civil e militar), segurança pública e defesa, saúde, entre outros. Cada aplicação utiliza radiação de uma faixa específica do espectro infravermelho, portanto necessita também de um tipo específico de fotodetector para cada faixa. Por exemplo, os fotodiodos de arseneto de gálio e índio (InGaAs), crescidos sobre substrato de InP (com parâmetros de rede casados), operam na faixa de  $0,9 \sim 1,7 \mu\text{m}$  (*short waveinfrared* ou SWIR) e são utilizados em aplicações diversas (ROGALSKI, 2003; ROUVIÉ, HUET e HAMARD, 2003; BATTAGLIA e BRUBAKER, 2007; ALLIED SCIENTIFIC PRO, 2015; HOELTER e BARTON, 2003 e TURNER, BAKKER e DIXON, 2008).

Fotodiodos de InGaAs, costumam ser fabricados de forma tal que a radiação incida na região ativa através do substrato de fosfeto de índio (InP) que é transparente a radiação no SWIR. A **Figura 1** ilustra uma configuração básica de um tipo possível destes sensores. Entretanto, devido a diferença de índices de refração entre o ar e o substrato de InP existe uma perda significativa de sinal por reflexão (aproximadamente 30%, como pode ser visto em cálculos e medidas abaixo), o que acaba prejudicando a sensibilidade dos detectores e a resolução espacial das imagens geradas através deles. Uma solução para diminuir a quantidade de luz refletida, nestes casos, consiste na confecção de revestimentos antirrefletores, RAR, no substrato. Sistemas como estes, criam condições para que exista interferência destrutiva entre as ondas refletidas em cada uma das interfaces, diminuindo substancialmente a refletância total resultante.

Figura 1 - Estrutura básica de um fotodiodo de InGaAs



Fonte: Autoria Própria

Os sistemas RAR podem ser idealizados para atingir refletâncias nulas em um comprimento de onda determinado, o que beneficia principalmente lasers e dispositivos que operam em um único comprimento de onda ou em uma largura de banda ultracurta (CHIN *et al*, 1983; MORTON, STEVENSON e GARCIA, 2004). Eles também podem ser configurados para diminuir satisfatoriamente a refletância em espectros mais largos, criando diversos pontos de mínima refletância, desta vez não nula, o que beneficia principalmente dispositivos que operem em larguras de banda mais amplas, como por exemplo, células solares e sensores (BOUHAFS *et al*, 1998; HANTEHZADEH, GHORANNEVISS e SARI, 2006).

Além do efeito interferométrico, a refletância média também pode ser reduzida se um material com índice de refração intermediário, de qualquer espessura, for depositado sobre dado substrato. Efeito análogo pode ser observado na atmosfera terrestre que possui uma variação gradativa de sua densidade devido à mudança na pressão com a altura e uma reflexão baixíssima, como consequência (POITRAS e DOBROWOLSKI, 2004). Sendo assim, pode-se obter uma diminuição na refletância média devido aos dois fenômenos, se os materiais adequados forem encontrados.

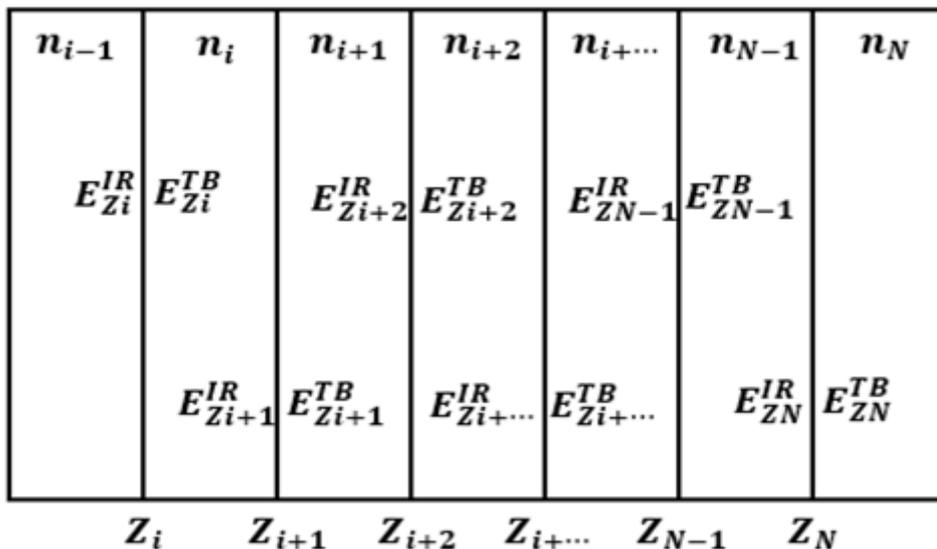
As camadas que compõe os sistemas RAR precisam de características específicas para que se criem as condições de mínima refletância, desta forma, é necessário que se tenha conhecimento do coeficiente de reflexão em cada interface para obtenção do coeficiente de reflexão total do sistema (e consequentemente a refletância total do sistema). Um método muito útil, para se obter o coeficiente de reflexão total a partir das características das camadas, é o método da matriz de transferência (**TMM**) (DE SIMONE, 2016; MACLEOD, 2010). Por ser um método matricial ele facilita a construção de um modelo matemático que descreva um sistema de várias camadas, sendo particularmente útil na construção de algoritmos para os cálculos computacionais.

## MÉTODO DAS MATRIZES DE TRANSFERÊNCIA

Quando se considera uma onda plana, linearmente polarizada e monocromática incidindo perpendicularmente sobre uma sequência de camadas planas, de espessura homogênea, e composta de materiais homogêneos e isotrópicos, é possível relacionar a intensidade total dos campos elétricos e magnéticos imediatamente antes de dada interface com essas intensidades em um ponto imediatamente anterior a próxima interface, por meio de uma matriz que envolve a espessura da camada correspondente e suas propriedades eletromagnéticas. Esta matriz é conhecida como matriz de transferência e é muito útil para se calcular a transmissão em um sistema de camadas múltiplas, visto que a forma da matriz se mantém a mesma para todas as camadas, mudando apenas a espessura e os valores dos coeficientes eletromagnéticos.

Considerando um sistema de múltiplas interfaces como na **Figura 2**, em que os materiais possuem baixa perda (baixa absorção e espalhamento da radiação), pode-se relacionar a intensidade dos campos elétricos e magnéticos imediatamente anteriores à interface em  $z_1$  com as intensidades desses campos em um ponto imediatamente anterior à interface em  $z_N$  pela equação matricial (1).

Figura 2 - Incidência da radiação em um sistema de  $N$  interfaces



Fonte: Autoria Própria

O sistema de  $N$  interfaces fica então caracterizado pela equação matricial descrita em (1).

$$\begin{bmatrix} E_{Z_i}^{IR} \\ \eta_0 H_i^{IR} \end{bmatrix} = \left( \prod_{i=1}^N \begin{bmatrix} \cos \beta_i (z_{i+1} - z_i) & \frac{j}{n_i} \sin \beta_i (z_{i+1} - z_i) \\ j n_i \sin \beta_i (z_{i+1} - z_i) & \cos \beta_i (z_{i+1} - z_i) \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} E_{Z_N}^{IR} \\ \eta_0 H_{Z_N}^{IR} \end{bmatrix}, \quad (1)$$

em que  $i$  é o número da interface e da camada após ela,  $E_{Z_i}^{IR}$  é a soma das componentes refletidas e incididas do campo elétrico,  $H_{Z_i}^{IR}$  é a soma das componentes refletidas e incididas do campo magnético,  $n$  é o índice de refração,  $\eta_0$  é a impedância elétrica do vácuo,  $\beta = n \frac{2\pi}{\lambda}$  é o módulo do vetor de onda.

### EQUAÇÃO CARACTERÍSTICA E CONDIÇÕES DE MÍNIMA REFLETÂNCIA EM RAR DE CAMADA ÚNICA

Sistemas RARs criam condições para que exista interferência destrutiva entre a onda refletida na primeira interface e as ondas refletidas nas interfaces posteriores. No caso de sistemas RAR de camada única, ao inserir um novo material entre os dois originais duas novas interfaces são criadas (no lugar da interface existente até então) de modo que a radiação incidente seja refletida em ambas as interfaces. Utilizando a **Equação (1)** e considerando materiais sem perda, a refletância de um sistema composto por uma única camada de RAR, pode ser descrita por meio da **Equação (2)**, considerando o último meio como semi-infinito:

$$\Gamma_{tot} = \left( \frac{r_{z_1} + r_{z_2} e^{-j\beta_1 2d_{z_1/z_2}}}{1 + r_{z_1} r_{z_2} e^{-j\beta_1 2d_{z_1/z_2}}} \right)^2, \quad (2)$$

na qual  $d_{z_1/z_2}$  é a espessura da camada entre a interface 1 e a interface 2. Observe que se  $z_{i+1} - z_i = 0$  (não existindo o RAR), a **Equação (2)** se torna a **Equação (3)**, que fornece a refletância da interface entre dois materiais.

$$\Gamma_{tot} = \left( \frac{n_2 - n_0}{n_2 + n_0} \right)^2. \quad (3)$$

Para o caso de RAR de camada única existem duas situações possíveis para obter-se reflexão nula, **Equação (4)**:

$$\Gamma_{tot} = 0 \Rightarrow \quad (4)$$

$$\Rightarrow \left( r_{z_1} + r_{z_2} (\cos \varnothing - j \sin \varnothing) \right)^2 = 0,$$

na qual  $\varnothing = \beta_1 2d_{z_1/z_2}$ .

No primeiro caso  $\varnothing$  assume múltiplos pares de  $\pi$  ( $\varnothing = m\pi$ ), o que nos leva a situação descrita pela **Equação (5a)** :

$$r_{z_1} = -r_{z_2}, \quad (5a)$$

que é o caso em que as ondas refletidas na primeira e na segunda interface têm intensidades iguais, mas fases invertidas. Isto acontece quando um material está imerso entre dois outros materiais de índices de refração iguais ( $n_0 = n_2 \neq n_1$ ), como por exemplo, uma bolha de sabão.

No segundo caso  $\varnothing$  assume múltiplos ímpares de  $\pi$  ( $\varnothing = \pi(2m + 1)$ ), o que nos leva a situação descrita pela **Equação (5b)**:

$$r_{z_1} - r_{z_2} = 0, \quad (5b)$$

em que as ondas refletidas na primeira e na segunda interface tem intensidades e fases iguais. Isto acontece quando se tem um sistema crescente ou decrescente de índices de refração, onde a fase da onda ou não é alterada em nenhuma das reflexões, ou é invertida em ambas, como pode ser observado na **Figura 3**.

Desta forma, se a camada RAR possuir adequada espessura e índice de refração, a componente da onda refletida na segunda interface ( $Z_2$ ) retornará em contra fase (devido à diferença de caminho óptico) à componente da onda refletida na primeira interface ( $Z_1$ ), gerando interferência destrutiva, **Figura 3**.

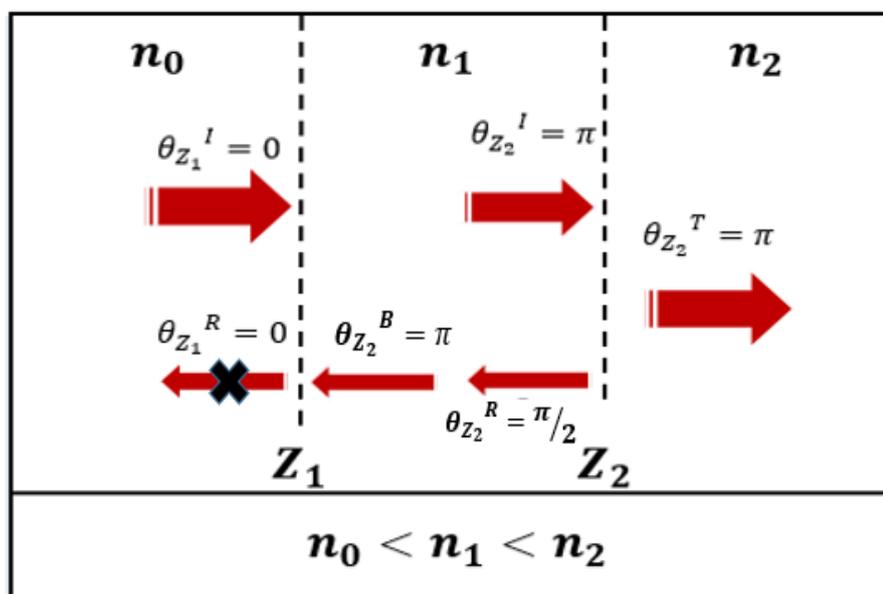
Neste caso, em especial, consegue-se atingir zero de refletância se o índice de refração da camada antirrefletora for dado pela **Equação (6)**:

$$n_1 = \sqrt{n_0 n_2}, \quad (6)$$

o que implica na espessura dessa camada ser um múltiplo ímpar de um quarto do comprimento de onda dentro do material, **Equação (7)**, com  $m \in Z_+^*$ .

$$d_{z_1/z_2} = (2m + 1) \frac{\lambda}{4n_1}. \quad (7)$$

Figura 3 - Esquema de reflexão em RAR de camada única



Fonte: Autoria Própria

### MODELO COMPUTACIONAL PARA CÁLCULO DO SISTEMA RAR DE CAMADA ÚNICA

No exemplo aqui apresentado, busca-se reduzir a refletância média, na faixa de atuação do fotodiodo de InGaAs, de um substrato de InP com uma concentração mínima de portadores (semi-isolante). Serão apresentados cálculos e resultados experimentais para duas situações. Em uma, tem-se apenas o substrato de InP. Na outra, o substrato de InP possui uma sequência de camadas de InGaAs em uma das faces.

Utilizando as equações fundamentais, é possível prever quais as condições necessárias para que exista mínima reflexão da radiação em dado comprimento de onda, e então projetar os sistemas RAR. É importante notar, entretanto, que nenhum material disponível na natureza terá exatamente as características desejadas, além de que o índice de refração não depende apenas da composição do filme, mas também de sua estrutura, e essa depende do substrato e da forma como o filme foi depositado.

Outro ponto a ser notado é que, muitas vezes, não é possível obter grande precisão na espessura do filme. A seleção do material do filme deve levar em consideração, além do índice de refração, sua compatibilidade com o substrato e adequação ao ambiente ao qual será exposto. Desta forma, é interessante incluir uma etapa de exploração numérica dos sistemas RAR, que nos possibilite estudar o comportamento deles sob condições diferentes da ideal e buscar, de forma eficiente, aqueles que melhor se adequam. Essa exploração numérica também se mostra útil na compreensão dos fenômenos físicos envolvidos, na interpretação e na discussão dos resultados, gerando economia de tempo e recursos.

Um ponto importante na exploração numérica é criar um critério de busca, que sirva como guia na determinação dos parâmetros. Como, neste caso, busca-se

a diminuição da refletância na faixa de operação do sensor, o critério deve refletir um valor médio. Assim, o critério escolhido consiste no valor médio do espectro de refletância sobre a região do espectro de operação do sensor ( $\Gamma_M$ ), e é calculado pela **Equação (8)**:

$$\Gamma_M = \frac{\int_{\lambda_{in}}^{\lambda_{fi}} \Gamma_{tot}(\lambda) d\lambda}{\lambda_{fi} - \lambda_{in}}. \quad (8)$$

Como forma de buscar uma melhor coincidência entre o resultado calculado e o experimental, considerou-se também a dispersão cromática do índice de refração dos materiais. A dispersão cromática refere-se à dependência do índice de refração com o comprimento de onda da radiação incidente. Para incluir a dispersão cromática na simulação, a literatura apresenta uma relação empírica conhecida como equação de Sellmeier (PALIK, 1998). A forma usual desta equação em materiais ópticos é apresentada na **Equação (9)**:

$$n^2(\lambda) = A + \frac{B\lambda^2}{\lambda^2 - C} + \frac{D\lambda^2}{\lambda^2 - E}, \quad (9)$$

em que,  $A, B, C, D$  e  $E$ , são os coeficientes de Sellmeier.

Para iniciar o projeto do RAR, é necessário inicialmente escolher um comprimento de onda,  $\lambda_0$ , para o qual haverá a interferência destrutiva máxima. Escolheu-se  $\lambda_0 = 1300 \text{ nm}$ , por ser, aproximadamente, o centro do espectro de operação do detector e, portanto, posicionando o ponto de mínimo neste valor, aproveita-se melhor o vale entorno desse mínimo.

Uma vez determinado  $\lambda_0$ , calculou-se o índice de refração ideal para o RAR por meio da **Equação (4)**. Para o ar, utilizou-se 1 como índice de refração, para o InP, calculou-se o índice de refração através da **Equação (10)**. Os coeficientes de Sellmeier, utilizados nesses cálculos, podem ser encontrados em Macleod (2010, p. 105 -121)

$$n_{InP}(\lambda) = \sqrt{7,255 + \frac{(2,316)\lambda^2}{\lambda^2 - (39,225 * 10^2)} + \frac{(2,765)\lambda^2}{\lambda^2 - (1085)}}. \quad (10)$$

Para o InP, através de (10),  $n_{InP}(1300) = 3,357$ , portanto, de acordo com a **Equação (4)**, necessita-se de um material com  $n_{RAR}(1300) = 1,832$ .

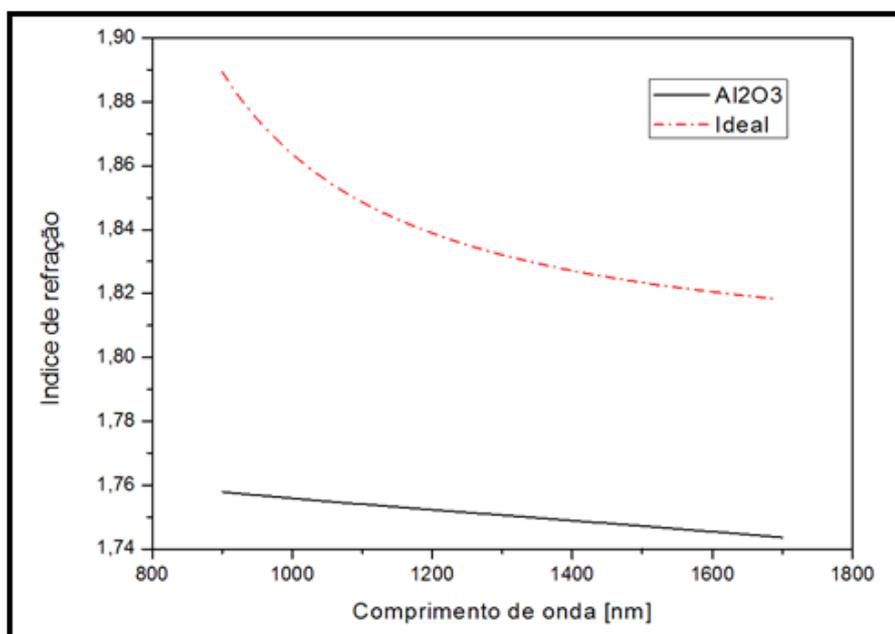
Naturalmente poucos materiais possuem as qualidades exigidas para serem utilizados como RAR em diodos de InGaAs. Os materiais devem, além de ter o índice de refração próximo ao calculado acima, possuir baixa absorção no SWIR, ter boa aderência ao InP, ser quimicamente estáveis e ainda possuir um coeficiente de expansão térmica próximo ao do substrato. Dentre os possíveis, a literatura (CHIN *et al*, 1983; MORTON, STEVENSON e GARCIA, 2004; PALIK, 1998) apresenta o óxido de alumínio ( $Al_2O_3$ ) como candidato. A alumina é escolhida por possuir um índice de refração bastante próximo do ideal, ser mecanicamente resistente e por ter um coeficiente de dilatação térmica próxima do InP

( $\alpha_{Al_2O_3} \sim \frac{5,6 \cdot 10^{-6}}{K}$  ;  $\alpha_{InP} \sim \frac{4,5 \cdot 10^{-6}}{K}$ ), o que diminui as chances do filme trincar ou descolar do substrato. Além disso, é um material relativamente barato e fácil de trabalhar. A **Equação (11)** apresenta a equação de Sellmeier com os coeficientes do  $Al_2O_3$ :

$$n_{Al_2O_3}(\lambda) = \sqrt{1,62575845 + \frac{(1,45722100)\lambda^2}{\lambda^2 - (1,1346735 * 10^2)} + \frac{(6,67604154)\lambda^2}{\lambda^2 - (400)}} \quad (11)$$

A **Figura 4** apresenta a comparação entre o índice de refração do  $Al_2O_3$ , escolhido para este trabalho, e o índice de refração ideal para o RAR (índice de refração para reflexão zero em cada comprimento de onda, **Equação (4)**).

Figura 4 - Comparação entre o índice de refração do  $Al_2O_3$  e o índice de refração ideal para o RAR de camada única



Fonte: Autoria Própria

Para o  $Al_2O_3$ ,  $n_{Al_2O_3}(1300) = 1,751$ , então, utilizando a **Equação (5)** obtém-se  $d_{Al_2O_3}(1300) = 186 \text{ nm}$ , que deve ser a espessura do RAR para que a radiação refletida na segunda interface retorne em contra fase com a radiação refletida na primeira interface.

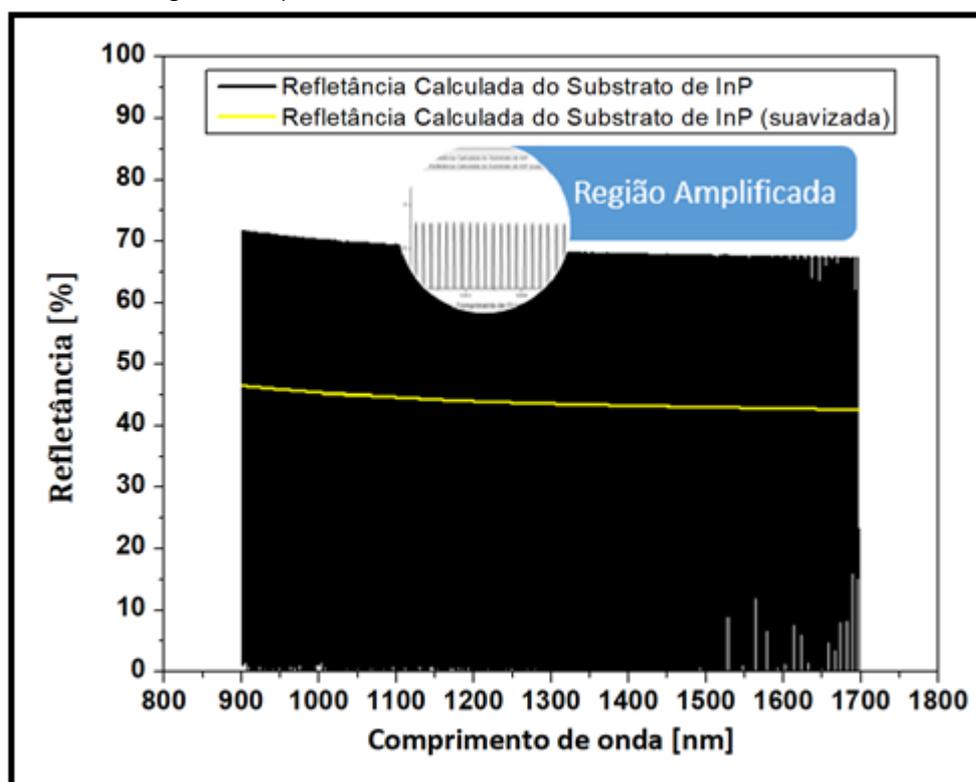
### MODELO E CÁLCULO DA REFLETÂNCIA DO SUBSTRATO DE INP

Inicialmente realizou-se o cálculo da refletância de um substrato de InP, considerando sua espessura finita e assumindo que não possui concentração significativa de cargas livres. Como o substrato é envolvido por ar e o InP é transparente à radiação com comprimento de onda acima de  $980 \text{ nm}$ , existem duas interfaces com refletâncias iguais: a primeira interface ar/InP e a segunda

InP/ar, na faixa do SWIR. Haverá interferência entre as ondas refletidas na primeira interface, com as refletidas na segunda interface, no entanto, como os comprimentos de onda são muito menores que a espessura do substrato, a oscilação observada na curva de refletância (curva preta), **Figura 5**, apresenta pontos de máximo e mínimo muito próximos. A medida de refletância não tem essa resolução espectral, apresentando, portanto, uma média sobre uma faixa que engloba várias oscilações.

Mesmo que o equipamento tivesse a resolução necessária, a rugosidade do substrato teria que ser consideravelmente baixa e os lados bastante paralelos para que as oscilações pudessem ser observadas. Sendo assim, para que os cálculos possam ser comparados com o experimento, é necessário calcular essa média gerando uma suavização da curva calculada (curva amarela).

Figura 5 - Espectro de refletância calculado do substrato de InP



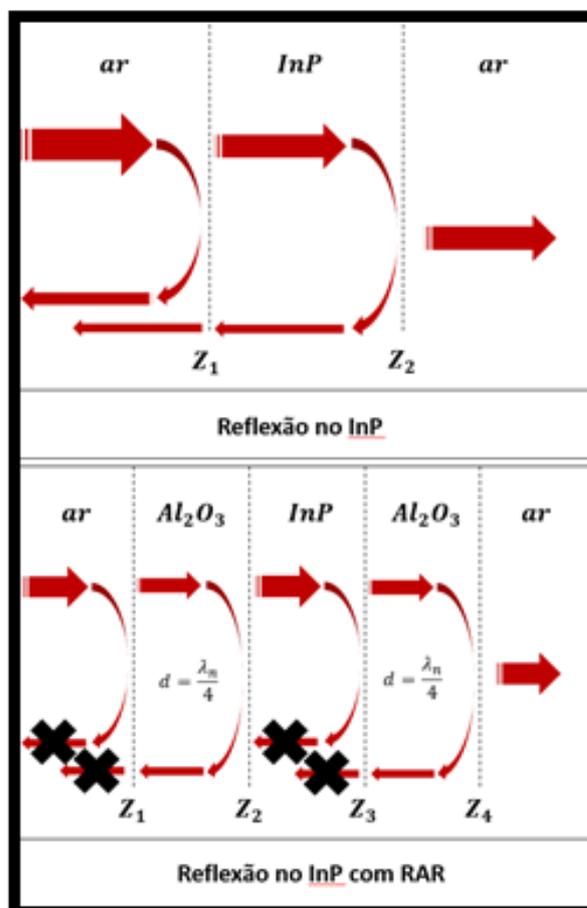
Fonte: Autoria Própria

Para diminuir o total de radiação refletida em um substrato de InP, é necessário atuar em ambas as suas interfaces, produzindo um sistema RAR em cada lado do substrato, interface  $Z_1$  e interface  $Z_2$ , respectivamente apresentados na **Figura 6**.

Apesar desta configuração não representar um fotodiodo de InGaAs, como pode ser visto mais a frente, ela serve para testar os processos de deposição e o comportamento dos revestimentos no InP. Além disso, é uma boa oportunidade para comparar os resultados experimentais com os calculados através do modelo matemático e realizar ajustes dos processos envolvidos na produção do RAR.

A **Figura 6** apresenta um esquema ilustrativo demonstrando as reflexões no InP sem e com RAR:

Figura 6 - Esquema de reflexão em um substrato de InP



Fonte: Autoria Própria

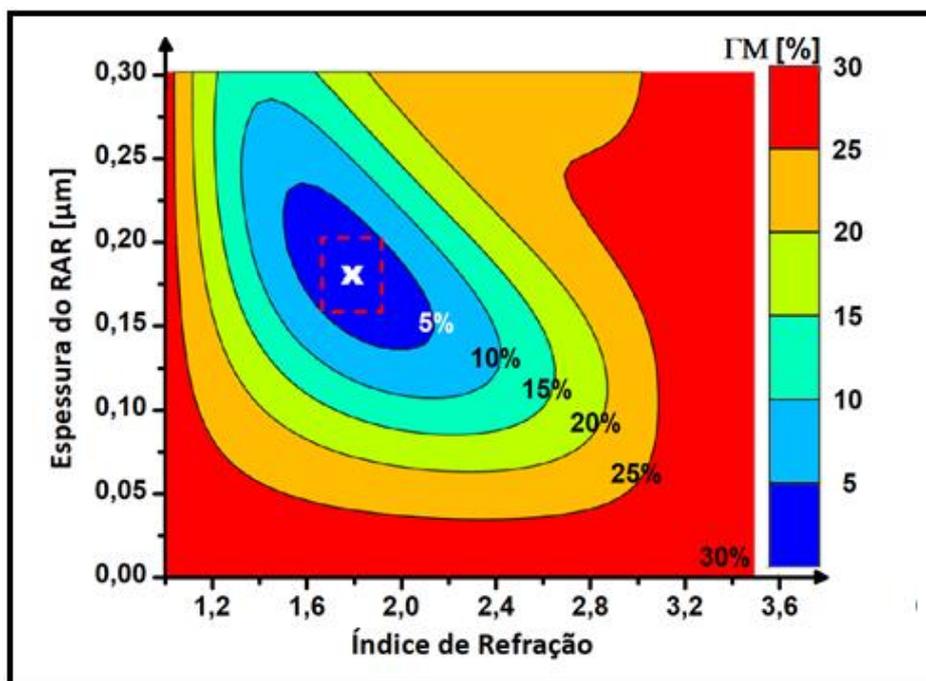
Recalculou-se a refletância média, **Equação (12)**, considerando as camadas de alumina com espessura ideal, nas duas faces.

$$\Gamma_{M_{Al_2O_3/InP/Al_2O_3}} = \frac{\int_{980}^{1700} \Gamma_{Al_2O_3/InP/Al_2O_3}(\lambda) d\lambda}{720} \cong 5\% \quad (12)$$

Existirão diferenças entre os parâmetros utilizados nos cálculos e os obtidos experimentalmente, por isso, é importante compreender como a variação destes parâmetros afeta a refletância média. Um gráfico de contornos, **Figura 7**, tem grande utilidade para tais análises, uma vez que, por meio dele, pode-se observar o efeito da variação dos parâmetros sobre a refletância média. Neste primeiro caso em que existe um revestimento para cada interface do substrato, pode-se variar duas das quatro principais variáveis ( $n^{Z_1}_{Al_2O_3}$ ;  $n^{Z_2}_{Al_2O_3}$ ;  $d^{Z_1}_{Al_2O_3}$ ;  $d^{Z_2}_{Al_2O_3}$ ) de cada vez, fixando as outras. Escolheu-se fixar a espessura da segunda camada antirrefletora ( $d^{Z_2}_{Al_2O_3} = 186 \text{ nm}$ ), além disso, considerou-se  $n^{Z_1}_{Al_2O_3} = n^{Z_2}_{Al_2O_3}$ , pois a variação do índice de refração em processos similares, sob as mesmas condições, é menos provável do que a variação da espessura.

O gráfico de contorno, **Figura 7**, mostra que desviando um pouco dessas condições ideais, ainda obtém-se refletância média de até 5 % para  $d_{Al_2O_3}^{Z_1} = 186 \pm 20 \text{ nm}$  e  $n_{Al_2O_3} = 1,75 \pm 0,1$  como pode ser visto na **Figura 7**.

Figura 7 - Refletância média em função do índice de refração e da espessura do RAR para o substrato InP



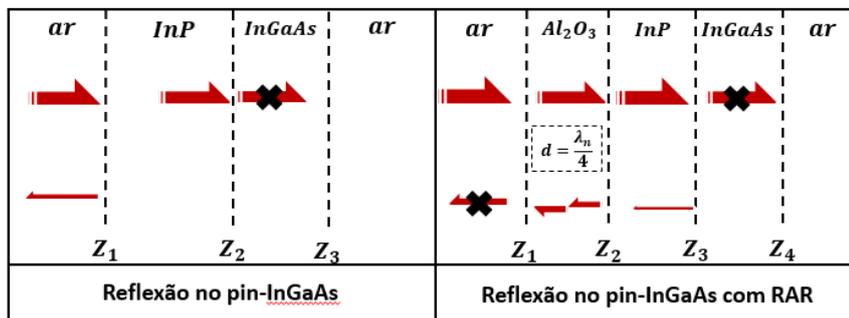
Fonte: Autoria própria.

### MODELO DA REFLETÂNCIA DO SUBSTRATO DE InP COM CAMADAS DE InGaAs

Também foram calculadas as curvas de refletância para um substrato de InP com camadas epitaxiais de InGaAs em uma das faces. Nesta configuração, espera-se que a radiação total refletida seja composta praticamente pela radiação refletida na primeira interface (ar/InP), sendo necessário reduzir apenas a refletância desta. Isto ocorre, porque a radiação abaixo de  $1700 \text{ nm}$  é absorvida pela camada de InGaAs, não chegando até a interface formada entre o InGaAs e o ar e, portanto, não sofrendo reflexões após a primeira interface.

É verdade que parte da radiação é refletida na interface formada entre InP e o InGaAs, no entanto, o índice de refração (parte real) do InP não é muito diferente do InGaAs, sendo assim, a refletância na interface entre estes dois materiais deve ser pequena (menor que 0,2% para a composição da liga apresentada neste trabalho), então ela será desconsiderada no cálculo (BATOP, 2016). A **Figura 8** apresenta o esquema de reflexão para o substrato de InP com camadas de InGaAs.

Figura 8 - Esquema de reflexão no substrato de InP com InGaAs



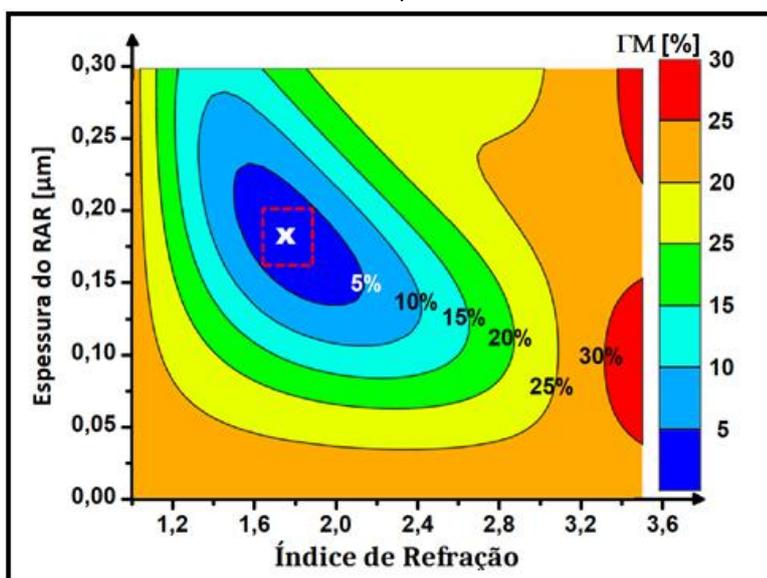
Fonte: Autoria Própria

Uma maneira de representar o sistema acima é considerar apenas um substrato de InP com espessura infinita (desconsiderando a camada de InGaAs). Tal consideração é, a princípio, razoável, pois, de forma semelhante à configuração original, um substrato de InP com espessura infinita não terá reflexão da radiação após a primeira interface. De forma semelhante ao caso anterior, foi utilizada a **Equação (1)** para obter a curva de refletância total. A **Equação (13)** fornece a refletância média do sistema sem o RAR.

$$\Gamma_{M_{InP/InGaAs}} = \frac{\int_{980}^{1700} \Gamma_{InP/InGaAs}(\lambda) d\lambda}{720 nm} \cong 30 \% \tag{13}$$

Utilizando a mesma expressão acima para o caso com a camada RAR obtém-se a refletância média de 3%. Novamente pode-se fazer uso da curva de nível, **Figura 9**, para avaliar o efeito da variação dos parâmetros na refletância média do InP. Na **Figura 7**, pode-se ver que, se a espessura se mantiver na faixa de  $d'_{Al_2O_3} = 186 \pm 20 nm$  e o índice de refração na de  $n_{Al_2O_3} = 1,75 \pm 0,1$ , obtém-se uma refletância média de até 5%.

Figura 9 - Refletância média em função do índice de refração e da espessura do RAR para o substrato pin-InGaAs



Fonte: Autoria Própria

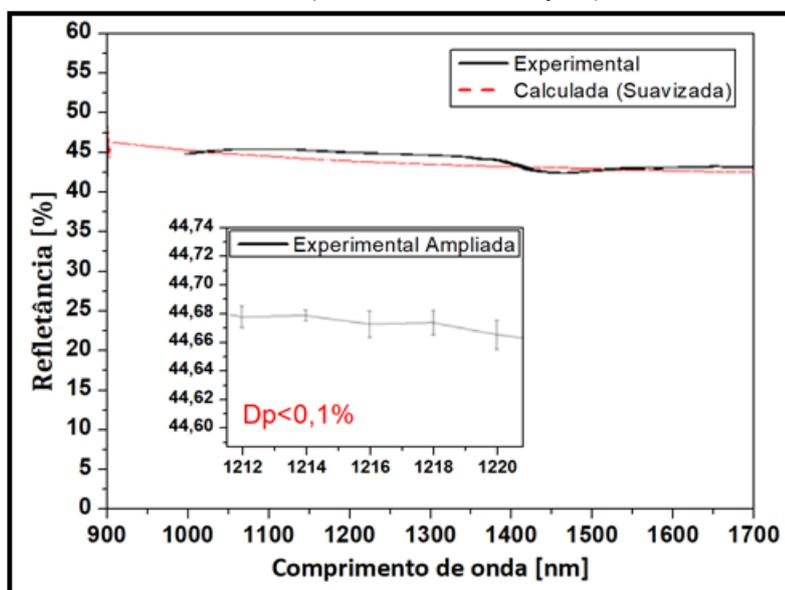
## RESULTADOS E DISCUSSÕES

Todos os revestimentos foram produzidos por evaporação de alumina por feixe de elétrons, com a evaporadora L560 da LEYBOLD. Os substratos foram polidos e limpos antes de cada etapa, maiores detalhes sobre o procedimento adotado podem ser encontrados na referência (DE SIMONE, 2016). Ambos os substratos tiveram seu espectro de reflexão medidos, através do espectrofotômetro V-570, da Jasco, antes da deposição das camadas antirrefletoras, para que fosse possível quantificar a redução na reflexão gerada pelas camadas. A espessura das camadas depositadas foi verificada por perfilometria. A refletância foi medida em quatro regiões diferentes de cada amostra, desta forma, as curvas apresentadas são curvas médias obtidas a partir destas medidas. Para facilitar a compreensão do texto, a partir deste ponto, essa curva média será referida simplesmente como espectro de refletância ( $\Gamma(\lambda)$ ) de modo que o termo refletância média ( $\Gamma_M$ ), largamente empregado no texto, referir-se-á ao valor médio dos pontos desta curva média.

### MEDIDAS DE REFLEXÃO DO SUBSTRATO DE INP

A **Figura 10** apresenta o espectro de refletância ( $\Gamma(\lambda)$ ) medido do substrato de InP sem o RAR, destacando o maior desvio padrão obtido. Nesse mesmo gráfico, também é apresentado o espectro de refletância calculado.

Figura 10 - Comparação entre a refletância do InP medida (curva preta contínua) e a calculada (curva vermelha tracejada)



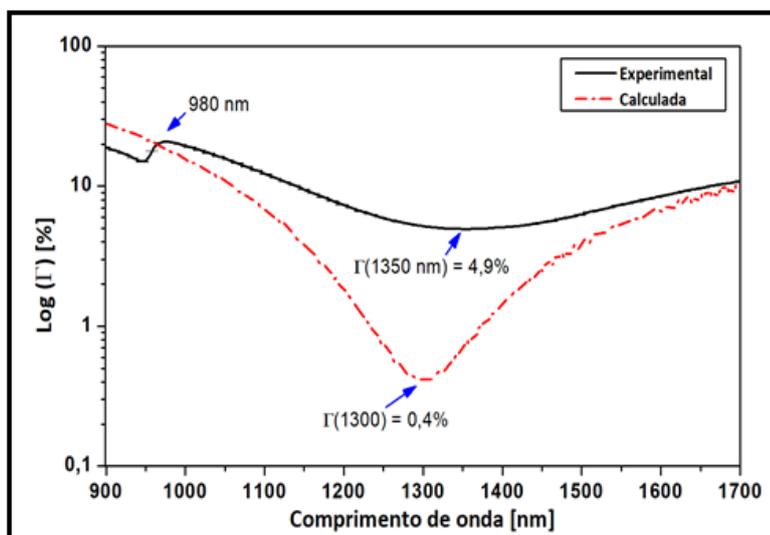
Fonte: Autoria Própria

A refletância média do substrato de InP ( $\Gamma_{M,InP}$ ) calculada a partir dos resultados experimentais é de aproximadamente 44 %, com regiões variando entre 43 % e 45 %. O resultado apresenta um razoável acordo com o cálculo computacional, efetuado utilizando parâmetros do InP obtidos da literatura (PALIK,1998) (**Equação 10**), que apresenta valores médios de aproximadamente

43 % com regiões variando entre 42% e 45 % (após a suavização da curva). Pequenas diferenças na reflexão podem ser resultado da qualidade do acabamento superficial (polimento) ou da limpeza da superfície, além da possibilidade de pequena variação dos parâmetros ópticos entre substratos. Após as medições de refletância do substrato de InP depositou-se um filme de alumina em cada uma das faces ( $Z_1$  e  $Z_2$ ). As espessuras indicadas pelo equipamento de deposição foram:  $d^{Z_1}_{Al_2O_3} = 179 \text{ nm}$  e  $d^{Z_2}_{Al_2O_3} = 178 \text{ nm}$ . Estes valores são bastante próximos do ideal calculado  $d = 186 \pm 20 \text{ nm}$ , portanto, estão dentro do erro admitido previsto no cálculo. A **Figura 9** apresenta o espectro de refletância ( $\Gamma(\lambda)$ ) do substrato de InP com o RAR. Na figura também é apresentada o cálculo para esta configuração.

No espectro de refletância experimental (curva preta) apresentado na **Figura 11**, pode-se observar a absorção do substrato em aproximadamente  $980 \text{ nm}$ , onde a radiação total refletida é substancialmente reduzida, sendo composta apenas pela refletância da primeira interface. Pode-se observar também que nesta região o espectro de refletância calculada (curva vermelha), utilizando os índices de refração obtidos com as **Equações (10) e (11)** e com a espessura obtida com a **Equação (7)**, não segue esta tendência, uma vez que não se está considerando a absorção do substrato nas equações. Com a adição do sistema RAR o mínimo de reflexão do espectro de refletância foi em aproximadamente  $1350 \text{ nm}$ , portanto, deslocado aproximadamente  $50 \text{ nm}$  do mínimo projetado ( $1300 \text{ nm}$ ). Além disso, se forem comparados os mínimos da curva calculada e da experimental, observa-se o mínimo experimental em 4,9% enquanto o teórico está em 0,4%, o que sugere um desacordo entre os parâmetros experimentais e os utilizados nos cálculos. A posição do mínimo de reflexão é uma função do índice de refração e da espessura do RAR, em outras palavras, para cada conjunto destes parâmetros, a reflexão de um comprimento de onda será minimizada. Por outro lado, a porcentagem desta redução (no mínimo) depende apenas do índice de refração, desde que se desconsidere a absorção do RAR.

Figura 11 - Comparação entre a refletância do InP medida e calculada com sistema RAR de camada única



Fonte: Autoria Própria

É possível que ambos os parâmetros estejam diferentes do projetado. A espessura do filme é controlada pelo equipamento de deposição, que utiliza um cristal piezolétrico para medir a quantidade de material depositado. Como a espessura é obtida através de uma medição indireta, dependente de informações dos materiais envolvidos no processo e da calibração do conjunto sensor, seu valor final pode sofrer flutuações.

Por sua vez, o índice de refração é influenciado por características morfológicas do material, como tensão mecânica, estequiometria, densidade e estrutura atômica, características estas que podem ser alteradas durante a fase de deposição por fatores como, taxa de deposição, pressão na câmara de vácuo, temperatura da amostra e concentração dos materiais envolvidos, sem falar que diferentes técnicas de deposição produzem diferentes resultados. Outro problema é que neste caso específico, existe um RAR em cada lado do substrato, portanto, as variações ocorrerão em ambos os lados, podendo gerar mínimos não coincidentes.

Para verificar a espessura efetivamente obtida nos filmes, realizaram-se medidas com um perfilômetro em três regiões diferentes de um degrau formado entre o substrato e o revestimento. A **Tabela 1** apresenta os valores das espessuras dos RAR ( $d_p$ ) no lado da interface  $Z_1$  e no lado da interface  $Z_2$  obtidos com o perfilômetro, bem como a média destas medidas ( $\bar{d}_p$ ) e a comparação com a espessura fornecida pelo equipamento de deposição ( $d_{dep}$ ). O desvio padrão das espessuras de cada região é relativo aos pontos da medição enquanto que o desvio padrão da espessura média é o desvio entre as espessuras absolutas de cada região. A terceira medida do dado  $Z_2$  foi descartada, pois possuía um desvio muito alto que quando verificado constatou-se um defeito local do filme.

Tabela 1 - Espessura do RAR Substrat

	$d_{dep}$	$d_{p1}$	$d_{p2}$	$d_{p3}$	$\bar{d}_p$
$Z_1$	179	$175 \pm 21$	$238 \pm 21$	$175 \pm 19$	$196 \pm 36$
$Z_2$	178	$231 \pm 34$	$220 \pm 15$	<del><math>275 \pm 73</math></del>	$226 \pm 8$

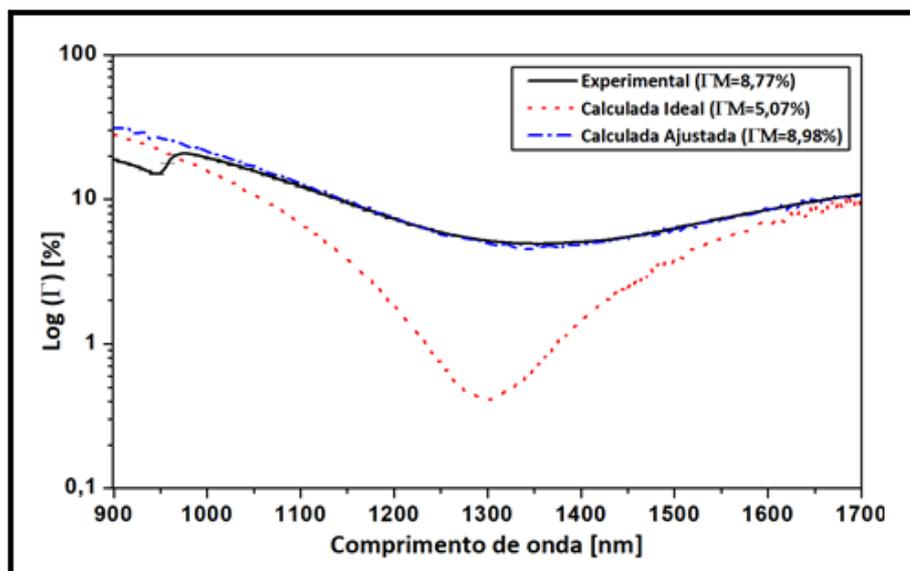
Fonte: Autoria Própria

A medida de perfilometria revela que ao menos um dos revestimentos (lado  $Z_2$ ), possui espessura fora da admitida no projeto ( $186 \pm 20 \text{ nm}$ ), justificando parte da divergência entre os resultados experimentais e teóricos apresentados na **Figura 9**.

Para se obter o índice de refração experimental, o cálculo será realimentado com as espessuras obtidas experimentalmente, comparando-o com a curva de refletância experimental. Buscou-se o índice de refração que gerasse a maior coincidência entre as duas curvas. Como a variação do índice de refração da alumina, com o comprimento de onda, é relativamente pequena na faixa de operação do sensor ( $900 \sim 1700 \text{ nm}$ ), utilizou-se um valor constante, que melhor ajustasse as curvas.

A **Figura 12** apresenta a comparação entra a refletância experimental e a refletância teórica ajustada com os parâmetros experimentais.

Figura 12 - Comparação da curva experimental com calculada ajustada para o InP.



Fonte: Aatoria Própria

O índice de refração que melhor ajustou as curvas foi  $n_{exp} = 1,59$ , revelando uma discordância entre o índice de refração obtido experimentalmente e o índice de refração obtido da literatura para a alumina ( $n_{Al_2O_3}(1300) = 1,751$ ). Pode-se atribuir este índice de refração mais baixo à necessidade de ter, durante a etapa de deposição, uma câmara de deposição rica em oxigênio ( $p_{O_2} = \sim 10^{-3} Torr$ ) para obter um filme de alumina estequiométrico, o que favoreceria um índice de refração mais alto de acordo com a literatura (PALIK, 2018), entretanto o equipamento de evaporação utilizado não permitia operação com esta pressão de oxigênio e foi necessário realizar a deposição com pressões mais baixas ( $1,5 * 10^{-4} Torr$ ).

Técnicas que favoreçam a mobilidade dos átomos na superfície podem gerar um filme mais compacto, também aumentando o índice de refração. Uma atmosfera rica em oxigênio é importante, pois apesar da evaporação de  $Al_2O_3$  gerar vapor de alumínio e oxigênio, ela não garante que os elementos serão depositados de maneira estequiométrica (mantendo a correlação entre os elementos da estrutura antes da evaporação). Isto pode criar um filme não estequiométrico, possuindo localmente ligações incompletas entre o alumínio e o oxigênio ( $Al_xO_y$ ), o que altera o índice de refração do filme. Além disso, filmes menos compactos (com menor densidade) também vão produzir índices de refração menores, uma vez que estes filmes possuem maior quantidade de espaços vazios ou preenchidos com gases, diminuindo o índice de refração médio do filme.

O controle da espessura no equipamento de deposição utilizado é realizado indiretamente através de um cristal piezométrico, que responde à massa do material depositado. Tal medida converte a quantidade de material depositado em espessura, a partir da informação prévia de sua densidade. Contudo, ao depositar-se um material com densidade diferente da informada, a espessura real será diferente da indicada. Como o índice de refração reflete, entre outros fatores, a densidade do material, obter um índice de refração menor pode indicar que o

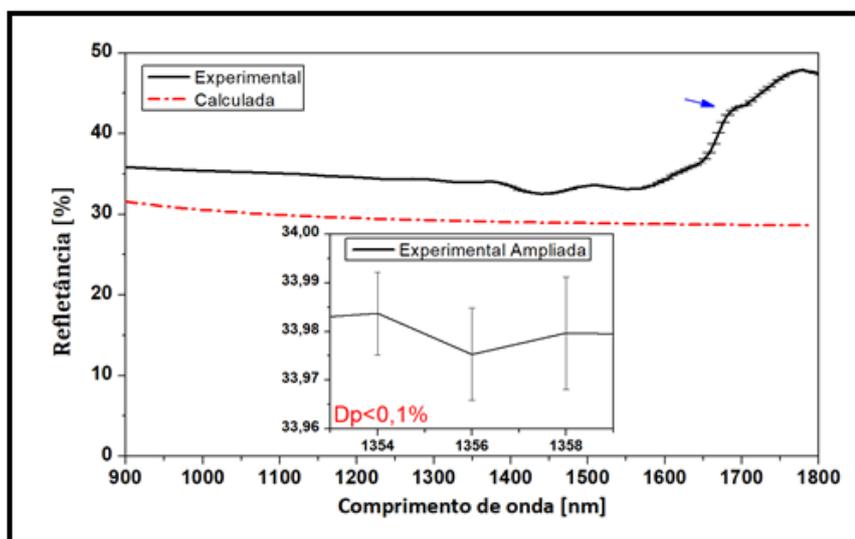
material depositado possui uma densidade menor do que a informada. Neste caso seria de se esperar uma espessura maior do que a indicada, devido à baixa densidade obtida, o que de fato foi observado.

Apesar de ter um índice de refração mais baixo e uma espessura maior, o RAR gerou uma refletância média com valores razoáveis ( $\Gamma_M \cong 9\%$ ).

### MEDIDAS DO SUBSTRATO COM CAMADAS DE InGaAs

Para o cálculo da refletância esperada do substrato que continha camadas de InGaAs em uma das faces, considerou-se que não haveria reflexão na interface de saída para o ar na faixa de absorção do InGaAs. Como o índice de refração do InGaAs é próximo do InP, também se decidiu desprezar a reflexão entre o InP e o InGaAs. Partindo de tais hipóteses, calculou-se a reflexão de um substrato de InP semi-infinito como sendo a reflexão de tal conjunto. A **Figura 13** apresenta a comparação entre a curva de refletância experimental e a calculada para a amostra sem RAR.

Figura 13 - Comparação entre a refletância do substrato com as camadas pin de InGaAs medida e a calculada.



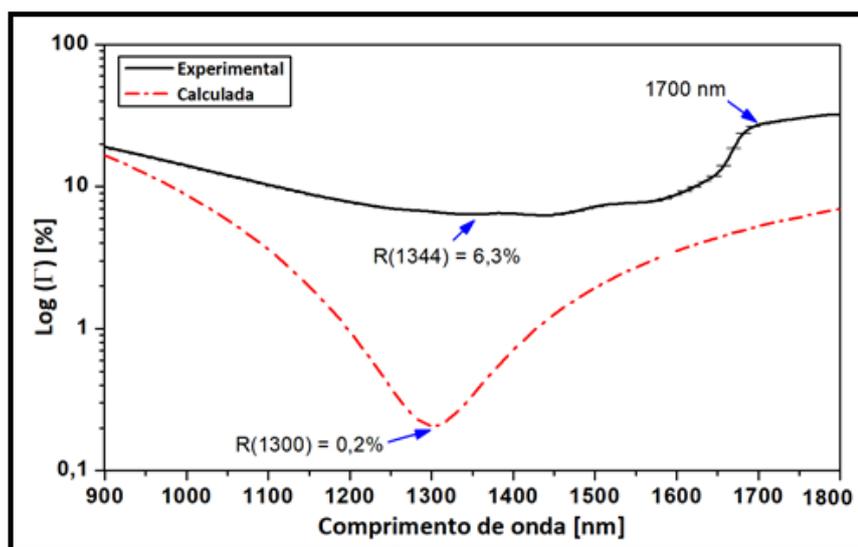
Fonte: Autoria Própria

Observa-se que a coincidência entre a curva experimental e a teórica é pior para esse caso que para o do substrato de InP puro, mesmo na faixa de absorção do InGaAs, o que indica limitação das hipóteses acima. Como as medidas de transmissão mostraram uma transmissão consideravelmente baixa, é mais provável que a diferença se deva principalmente à segunda hipótese, levando-se também em conta que há reflexão por cargas livres, visto que duas das camadas de InGaAs são dopadas, além de uma contribuição de luz reemitida (fotoluminescência). Também é possível notar um aumento da reflexão em aproximadamente 1700 nm. Este comprimento de onda corresponde à energia do *gap* das camadas de InGaAs, dessa forma, a radiação com comprimentos de onda maiores que esse não é absorvida, de forma que se passa a observar a reflexão oriunda da reflexão na interface de saída. A refletância média experimental é de

aproximadamente 35 %, com regiões variando entre mínimo de 32 % e máximo de 43 % enquanto que a calculada é de aproximadamente 30 %, com regiões variando entre mínimo de 29 % e máximo de 31 %.

Devido aos resultados razoáveis obtidos com o substrato de InP, os mesmos parâmetros de deposição para o substrato com as camadas de InGaAs foram mantidos. Neste caso, a deposição foi efetuada apenas no lado sem o InGaAs, obtendo um filme com espessura de  $d^{Z_1 Al_2O_3} = 170 \text{ nm}$ . A **Figura 14** apresenta a comparação entre o espectro de refletância experimental e o calculado com a espessura alvo após a adição do RAR.

Figura 14 - Comparação entre a refletância do pin-InGaAs experimental e a calculada com sistema RAR de camada única



Fonte: Autoria Própria

A curva experimental apresenta uma diminuição da refletância média de 74 %, possuindo uma refletância média de 9%, com regiões variando entre 27% e 6% (após a deposição do RAR), contra 91% da curva calculada, que tem uma refletância média de 3%, com regiões variando entre 10% e 0,2% (após a deposição do RAR). Novamente nota-se um pequeno deslocamento entre o comprimento de onda central projetado e o obtido experimentalmente, assim como, uma diferença significativa entre os valores de refletância de seus respectivos pontos mínimos.

A **Tabela 2** apresenta os valores da espessura do RAR para a amostra com camadas de InGaAs obtidos com o perfilômetro.

Tabela 2 - Valor das espessuras do RAR obtidas pelo perfilômetro para a amostra InP/InGaAs.

	$d_{dep}$	$d_{p1}$	$d_{p2}$	$d_{p3}$	$\bar{d}_p$
$Z_1$	170	$246 \pm 12$	$284 \pm 19$	$234 \pm 16$	$255 \pm 26$

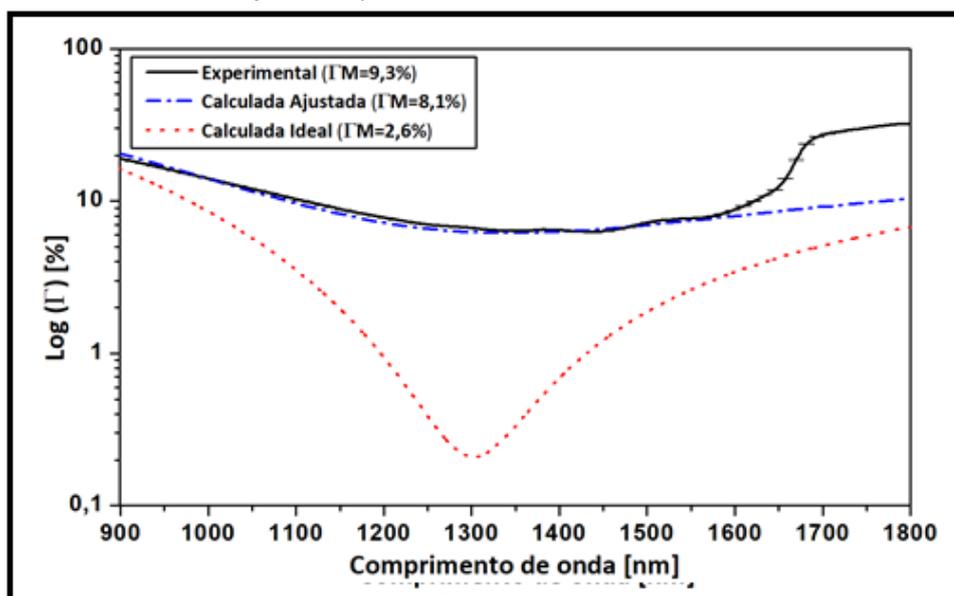
Fonte: Autoria Própria

De forma semelhante à anterior, buscou-se ajustar o índice de refração da camada de alumina para que se obtivesse uma maior coincidência entre as curvas calculadas, considerando a espessura obtida experimentalmente. No entanto, não foi possível obter um bom ajuste utilizando o valor médio da espessura. Considerando que esse filme apresentou trincamento entre as medidas de reflexão e as de perfilometria, e que houve uma variação significativa entre as três medidas, experimentou-se o ajuste considerando os valores de medidas individuais, obtendo o melhor ajuste para a menor espessura medida. A **Figura 15** apresenta a comparação entre as curvas experimentais, a calculada com parâmetros da literatura e a calculada com o índice de refração ajustado.

O índice de refração que melhor ajustou as curvas foi  $n_{exp} = 1,42$ . Desta forma, novamente obtém-se um índice de refração menor do que o esperado para um filme de alumina estequiométrico e compacto, no entanto, desta vez, é notável que o índice de refração ficou ainda menor do que o índice de refração obtido na amostra anterior, o que indica pouca reprodutibilidade do processo de deposição utilizado.

Novamente, é possível observar que o índice de refração menor foi compensado por um filme mais espesso, gerando um ponto de mínimo próximo ao centro do espectro, produzindo uma refletância média razoável ( $\Gamma M \cong 9\%$ ). Contudo, o ponto mínimo da curva neste caso específico, não experimenta uma queda aguda de seus valores, se comparada com o cálculo ou mesmo com a curva experimental da primeira amostra. Isto ocorre, pois, apesar da onda refletida na segunda interface retornar em contra fase a onda refletida na primeira interface, a relação entre os índices de refração está consideravelmente fora da ideal, enquanto na primeira amostra, está mais próximo. Por outro lado, nos dois casos, o gradiente de índice de refração formado, criou interfaces menos reflexivas o que manteve a refletância média em valores razoáveis.

Figura 15 - Comparação da curva de refletância experimental com calculada utilizando valores ajustados, para o substrato com camadas de InGaAs.



Fonte: Autoria Própria

---

## CONCLUSÃO

Os resultados computacionais, apesar da modelagem matemática simplificada, foram suficientes para definição dos índices de refração e da espessura ideais para diminuição do coeficiente de reflexão nos dois tipos de substratos. A partir destes valores fomos capazes de determinar, baseados na literatura, qual material seria mais adequado aos fins propostos.

A alumina mostrou-se extremamente eficiente como material da camada antirrefletora atingindo refletâncias médias de 8,7% e de 9,3% (com mínimas de 4,9% e 6,3%) nos substratos de InP e InP/InGaAs respectivamente

É importante ressaltar que os cálculos computacionais foram bastante úteis não só na determinação dos parâmetros iniciais do projeto, mas também auxiliando fortemente na análise dos resultados obtidos, identificando limitações do aparato experimental utilizado e possibilidades de melhoria do processo.

É importante ressaltar ainda que apesar deste trabalho utilizar como exemplo substrato de InP e InP/InGaAs, seria muito simples substituir estes materiais por outros, aproveitando as técnicas aqui discutidas.

## Use of Computational Calculation for Helping the Project and Analysis of Antireflective Coatings for Infrared Photodetectors

### **ABSTRACT**

*Seeking to improve photodetectors built on Indium phosphide substrate (InP). The present work shows how relatively simple computational calculations allow to obtain the ideal parameters for choosing the materials used for the deposition of anti-reflective coatings (ARC), besides helping analyze these films. Because of its near ideal refractive index, alumina ( $Al_2O_3$ ) has been identified as a good material choice for the RAR. Using the same methodology, we have determined the ideal film thickness. Real films were deposited by electron beam evaporation and characterized. The calculations have allowed to interpret the collected data and to determine the refractive indexes actually obtained. The experiment showed significant decreases of reflective indexes, both in InP substrates without epitaxial layers, and InP substrates with gallium and indium arsenide epitaxial layers, InGaAs. The calculations also have allowed to identifying ways to improve the results.*

**KEYWORDS:** Antireflection Coatings; Indium Phosphide; InGaAs Photodiodes.

# Uso de cálculos computacionales para ayuda al diseño y análisis de revestimientos antirreflectante para fotodetectores de infrarrojos

## RESUMEN

Buscando mejorar fotodetectores construidos sobre sustrato de fosfuro de indio (InP), el presente trabajo se presenta como cálculos computacionales relativamente simples, lo que permite obtener parámetros ideales para elegir materiales adecuados para la deposición de recubrimientos antirreflectantes (RAR), además Ayudar en el análisis de estas películas. Debido a su índice de refracción casi ideal, la alúmina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) se ha identificado como una buena opción de material para RAR. Usando la misma metodología, determinamos el grosor ideal del lecho. Se depositaron películas reales por evaporación inducida por haz de electrones y se caracterizaron. Los cálculos permitieron interpretar los datos recopilados y determinar los índices de refracción realmente obtenidos. El experimento mostró disminuciones significativas en la reflectancia media, tanto en sustratos de InP sin capas epitaxiales como en sustratos de InP con capas epitaxiales de arseniuro de galio e indio, InGaAs. Los cálculos también permitieron identificar formas de mejorar el resultado.

**Palabras clave:** Revestimiento Antirreflectante; Fosfuro de Indio; Fotodiodo de InGaAs.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio financeiro do CNPq/MCTI através do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Nanodispositivos Semicondutores (INCT-DISSE), da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), através da concessão de bolsa de mestrado, da Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP), pelo apoio financeiro através do Programa de Desenvolvimento de Sensores para Defesa (PDENSDN), e do Instituto de Estudos Avançados (IEAv), através da infraestrutura, apoio técnico e materiais. Agradecem ainda aos Profs. Álvaro José Damião e Fabio Dondeo, pelas discussões e medidas ópticas, ao tecnólogo em C&T Luis Lavras, e aos SST Ferraz e SO Francklin da EFO-IEAv, pelo apoio na deposição dos filmes, aos demais estudantes do Laboratório de Caracterização de Dispositivos Semicondutores (LCDS) e do Laboratório de Engenharia Virtual (LEV), em especial a Tiago Gonçalves Santos e Cristian Delfino, pela grandiosíssima ajuda prestada nas discussões da teoria, na construção dos algoritmos, nas etapas de deposição dos filmes e caracterização das amostras e na edição do artigo. Também, agradecemos ao Prof. Douglas Leite e seus alunos Vanderli Laurindo e Rodrigo Moraes do Laboratório de Plasmas e Processos, do Departamento de Ciências Fundamentais do ITA, pelas medidas de perfilometria e elipsometria e também pelas discussões sobre os resultados.

## REFERÊNCIAS

ALLIED SCIENTIFIC PRO. **Short Wave Infrared ( SWIR ) for surveillance applications in defense**. [2015]. Disponível: <<https://alliedscientificpro.com/blog/our-news-1/post/white-paper-short-wave-infrared-swir-for-surveillance-applications-in-defense-25>> Acesso em: 14 novembro, 2019.

BATTAGLIA, J.; BRUBAKER, R. High Speed Short Wave Infrared (SWIR) imaging and range gating cameras. In: **THERMOSENSE**, Proc SPIE, v 6541, 2007.

BATOP. **Índice de refração do InGaAs**. 2016. Disponível: <<http://www.batop.de/information/information.html>>. Acesso em: 14 novembro, 2019.

BOUHAFS, D. *et al.* Design and simulation of antireflection coating systems for optoelectronic devices: Application to silicon solar cells, **Solar Energy Materials and Solar Cells**, v. 52, p. 79–93, 1998.

CHIN, A. K. *et al.* Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> as an antireflection coating for InP/InGaAsP LEDs **Journal of Vacuum Science & Technology B**, v. 1, p. 72, 1983.

DE SIMONE, G. B. C. **Desenvolvimento de Revestimentos Antirreflexivos para Fotodiodos de Arseneto de Gálio e Índio**, Dissertação de mestrado: Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2016.

HANTEHZADEH, M. R.; GHORANNEVISS, M.; SARI, A. H. Antireflection coating on InP for semiconductor detectors, **Thin Solid Films**, v. 515, n. 2, p. 547–550, 2006.

HOELTER, T. R.; BARTON, J. B. Extended short-wavelength spectral response from InGaAs focal plane arrays. In: **INFRARED TECHNOLOGY AND APPLICATIONS**, Proc. SPIE, v 5074, p. 481–490, 2003.

MACLEOD, H. A. Thin-Film Optical Filters, **CRC Press**, v.4, p 105 -121, 2010.

MORTON, D. E.; STEVENSON, I.; GARCIA, M. Design and development of optical coatings on laser bar facets, **Appl. Phys. Lett.**, v. 78, n. 23, p. 413–423, 2004.

PALIK, E. D. **Handbook of thermo-optic coefficients of optical materials with applications**, Tsukuba: Academic Press, 1998.

POITRAS, D.; DOBROWOLSKI, J. A. Toward perfect antireflection coatings, **Applied Optics**, v. 43, n. 6, p. 1286 – 1287, 2004.

ROGALSKI, A. Infrared detectors: status and trends, **Progress in Quantum Electronics** v27, p. 129-135, 2003.

ROUVIÉ, A.; HUET, O.; HAMARD, S. SWIR InGaAs focal plane arrays in France. In: **INFRARED TECHNOLOGY AND APPLICATIONS**, Proc SPIE, v 39, 2003.

TURNER, D. G.; BAKKER, T. C.; DIXON, P. The development of, and applications for, extended response (0.7 to 1.7 $\mu$ m) InGaAs focal plane arrays. In: **INFRARED TECHNOLOGY AND APPLICATIONS**, Proc. SPIE, v. 6940, 2008.

**Recebido:** 27 de fevereiro de 2019.

**Aprovado:** 14 de novembro de 2019.

**DOI:**

**Como citar:** DE SIMONE, G.B.C., VIEIRA, G.S., Uso de cálculos computacionais para auxílio ao projeto e análise de revestimentos antirrefletores para sensores de infravermelho, **Revista Brasileira de Física Tecnológica Aplicada**, Ponta Grossa, v. 6, n.2, p. 20-43, novembro. 2019.

**Contato:** Giordano Bruno Crepaldi DeSimone: giordano.desimone@gmail

**Direito autoral:** Este artigo está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.

