

Universidade Federal de Itajubá  
Instituto de Ciências  
Departamento de Física e Química  
Dissertação de Mestrado

**Fenômenos de Transporte em Superredes de  
InAs/GaAs contendo Pontos Quânticos**

**LEANDRO RODRIGUES DE SOUZA**

**Orientador: Demétrio Artur Werner Soares – UNIFEI**

**Co-orientador: Rero Marques Rubinger – UNIFEI**

Setembro de 2005

Leandro Rodrigues de Souza

## **Fenômenos de Transporte em Superredes de InAs/GaAs contendo Pontos Quânticos**

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado da Universidade Federal de Itajubá, como requisito para a obtenção do título de mestre em Ciências dos Materiais para Engenharia.

Área de concentração: Semicondutores.

**Orientador: Demétrio Artur Werner Soares – UNIFEI**

**Co-orientador: Rero Marques Rubinger – UNIFEI**

Itajubá  
Universidade Federal de Itajubá

2005

Dissertação defendida e aprovada, em 06 de outubro de 2005, pela banca examinadora constituída pelos professores:

---

Prof. Dr. Geraldo Mathias Ribeiro – UFMG

---

Prof. Dr. Robson Luiz Moreno – Unifei

---

Co-orientador: Prof. Dr. Rero Marques Rubinger – Unifei

---

Orientador: Prof. Dr. Demétrio Artur Werner Soares – Unifei

*À minha mãe, Fátima, por ter sido  
sempre forte e ter me ensinado a  
ser forte também...*

*...e à memória de meu pai, Nelson.*

## **Agradecimentos**

Aproveito a oportunidade para agradecer a todos que, com seus conhecimentos, incentivos, e críticas colaboraram para o desenvolvimento deste trabalho. Em especial agradeço:

Ao professor Dr. Demétrio Artur Werner Soares, por sua orientação, amizade e pelo seu comprometimento no meu processo de formação científica.

Ao professor Dr. Rero Marques Rubinger, pela co-orientação, participação e por disponibilizar as amostras objeto da caracterização elétrica realizada neste trabalho.

Ao prof. Dr. Alvaro Antonio Alencar de Queiroz por sua valorosa colaboração na difusão de contatos para caracterização elétrica das amostras utilizadas neste trabalho.

Aos demais professores do curso de mestrado pelo desenvolvimento do meu conhecimento teórico e científico, especialmente ao Prof. Dr. Piotr Trzesniak, grande amigo desde a época da graduação.

Aos colegas do curso de Mestrado em Materiais para Engenharia, em especial a Paulo Henrique O. Souza e Karina Arruda de Almeida pelo auxílio prestado em várias das atividades realizadas no laboratório de caracterização termoeletróptica de materiais.

Aos alunos de iniciação científica Wagner Souza Machado e Rodrigo Zenun Franco por pelo auxílio prestado nos procedimentos experimentais.

Aos funcionários da UNIFEI, em especial aqueles do Departamento de Física e Química – Instituto de Ciências, pela colaboração necessária para realização deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Geraldo Mathias Ribeiro do Instituto de Ciências Exatas – ICEx/UFMG, pela simpatia e receptividade durante as atividades realizadas na UFMG.

Aos diversos amigos que conquistei na Unifei desde a época da graduação.

À CAPES, pelo apoio financeiro.

## SUMÁRIO

<b>Lista de figuras.....</b>	viii
<b>Lista de tabelas.....</b>	xi
<b>Lista de símbolos.....</b>	xi
<b>Resumo.....</b>	xvi
<b>Abstract.....</b>	xvi
<b>Capítulo 1 – Introdução.....</b>	1
<b>Capítulo 2 – Objetivos.....</b>	4
<b>Capítulo 3 – Princípios teóricos de materiais semicondutores.....</b>	5
<b>3.1 Conceito de material semicondutor.....</b>	5
<i>3.1.1 Bandas de energia em cristais.....</i>	5
<i>3.1.2 Impurezas em materiais semicondutores.....</i>	8
<b>3.2 Movimento de elétrons em uma rede cristalina.....</b>	12
<b>3.3 Massa efetiva.....</b>	13
<b>3.4 Transições eletrônicas em estruturas de bandas de cristais reais.....</b>	15
<b>3.5 Massa efetiva de elétrons e buracos considerando estruturas de bandas de cristais reais.....</b>	17
<b>3.6 Características básicas do InAs e do GaAs.....</b>	18
<b>3.7 Heteroestruturas de materiais semicondutores.....</b>	21
<i>3.7.1 Heterojunções de semicondutores.....</i>	22

<b>3.8 Estruturas de baixa dimensionalidade.....</b>	<b>24</b>
<b>3.8.1 Os pontos quânticos.....</b>	<b>25</b>
 <b>Capítulo 4 – Mecanismos de espalhamento de portadores em heteroestruturas de InAs/GaAs.....</b>	 <b>30</b>
<b>4.1 Movimento de deriva.....</b>	<b>30</b>
<b>4.1.1 Mobilidade.....</b>	<b>32</b>
<b>4.1.2 Condutividade e Resistividade.....</b>	<b>33</b>
<b>4.2 Experimento de efeito Hall na caracterização de materiais semicondutores.....</b>	<b>33</b>
<b>4.2.1 Características básicas do experimento Hall.....</b>	<b>34</b>
<b>4.3 Mecanismos de espalhamentos em materiais semicondutores.....</b>	<b>36</b>
<b>4.3.1 Aproximação do tempo de relaxação.....</b>	<b>36</b>
<b>4.3.2 Potenciais de espalhamento.....</b>	<b>37</b>
4.3.2.1 – Impurezas ionizadas.....	37
4.3.2.2 – Impurezas neutras.....	38
4.3.2.3 – Fônons acústicos.....	38
4.3.2.4 – Fônons ópticos.....	39
<b>4.3.3 Estados degenerados e não-degenerados.....</b>	<b>40</b>
4.3.3.1 - Estatística de estados degenerados.....	40
4.3.3.2 - Estatística de estados não degenerados.....	40
<b>4.3.4 Cálculo dos tempos de relaxação de momentum.....</b>	<b>41</b>
4.3.4.1 – Espalhamento por impurezas ionizadas.....	43
4.3.4.2 – Espalhamento por impurezas neutras.....	44
4.3.4.3 – Espalhamento por fônons acústicos.....	44

4.3.4.4 – Espalhamento por fônons ópticos.....	45
4.3.5 <i>Mecanismos de espalhamento de portadores em heteroestruturas de InAs/GaAs</i> .....	46
4.3.5.1 – Espalhamento acústico por potencial de deformação...	47
4.3.5.2 – Espalhamento acústico piezoelétrico.....	48
<b>Capítulo 5 – Materiais e métodos</b> .....	49
5.1 <b>Técnicas de Crescimento por Epitaxia</b> .....	49
5.1.1 - <i>LPE (Liquid Phase Epitaxy) – Epitaxia de Fase Líquida</i> .....	50
5.1.2 - <i>VPE (Vapour Phase Epitaxy) – Epitaxia de Fase Gasosa</i> .....	50
5.1.3 - <i>MBE (Molecular Beam Epitaxy)</i> .....	50
5.2 <b>Crescimento de amostras</b> .....	52
5.3 <b>Preparação das amostras para a caracterização elétrica</b> .....	53
5.3.1 - <i>Clivagem</i> .....	53
5.3.2 - <i>Deposição e difusão de contatos</i> .....	54
5.3.3 - <i>Soldagem dos eletrodos</i> .....	55
5.3.4 - <i>Fixação da amostra ao porta-amostra</i> .....	55
5.4 <b>Técnicas de caracterização</b> .....	58
5.4.1 - <i>Caracterização a dois pontos: <math>I(V)</math> e <math>I(t)</math></i> .....	58
5.4.2 - <i>Caracterização a 4 pontos pelo método de van der Pauw</i> .....	59
5.5 <b>Suporte físico para a caracterização elétrica</b> .....	59
5.5.1 - <i>Sistema de criogenia/control de temperatura</i> .....	59
5.5.1.1 - <i>Reservatório de He e tubo de transferência</i> .....	60
5.5.1.2 - <i>Criostato</i> .....	60
5.5.1.3 - <i>Controlador de temperatura</i> .....	61
5.5.1.4 - <i>Multímetro Keithley 2001 como leitor de temperatura</i> ..	61

<b>5.5.2 - Sistema de Campo Magnético</b> .....	62
5.5.2.1 - Eletro-imã.....	62
5.5.2.2 - Fonte de Corrente.....	63
5.5.2.3 - Chave reversora de corrente e interface controladora GPIB.....	63
<b>5.5.3 - Sistema de vácuo</b> .....	63
<b>5.5.4 - Instrumentação de alta precisão</b> .....	63
5.5.4.1 - Equipamento Keithley 237.....	63
5.5.4.2 - Eletrômetro Keithley 6512.....	63
<b>5.5.5 - Acessórios para caracterização elétrica</b> .....	64
5.5.5.1 - Placa comutadora.....	64
5.5.5.2 - Dispositivo de comutação manual.....	64
<b>5.5.6 - Sistema computacional para controle de processos</b> .....	65
<b>5.6 Configuração (montagem) dos experimentos</b> .....	68
<b>5.6.1 - Caracterização a 2 pontos</b> .....	68
<b>5.6.2 - Caracterização a 4 pontos</b> .....	68
<b>Capítulo 6 – Resultados e discussões</b> .....	69
<b>6.1 Resultados da caracterização a 4 pontos</b> .....	69
<b>6.1.1 - Resistividade</b> .....	69

<b>6.1.2 Mobilidade</b> .....	73
6.1.2.1 - Impurezas ionizadas.....	77
6.1.2.2 - Deformação de Potencial de fônons acústicos.....	78
6.1.2.3 - Fônons Acústicos Piezoelétricos.....	79
6.1.2.4 - Fônons Ópticos Polares.....	80
6.1.2.5 - Combinação dos modelos de mobilidade.....	80
6.1.2.6 - Participação das impurezas ionizadas.....	87
<b>6.1.3 Concentração de portadores</b> .....	88
<b>6.2 Resultados da Caracterização I(V) e I(t)</b> .....	90
<b>Capítulo 7 – Conclusões e perspectivas futuras</b> .....	94
<b>7.1 Conclusões</b> .....	94
<b>7.2 Perspectivas futuras</b> .....	95
<b>8. Referências à informação</b> .....	97
<b>8.1 Livros e periódicos</b> .....	97
<b>8.2 Sites da Internet</b> .....	101

## Lista de figuras

Figura 3.1 - Transformação dos estados discretos de átomos em bandas de energia.....	6
Figura 3.2 - Estrutura de bandas de energia em função da distância entre átomos.....	6
Figura 3.3 - Comparação simplificada das bandas de energia de metais, isolantes e semicondutores.....	8
Figura 3.4 - Formação de um par elétron–lacuna por excitação.....	8
Figura 3.5 – Níveis de impurezas inseridas por dopagem.....	10
Figura 3.6 – Tipos de discordâncias.....	11
Figura 3.7 – Potencial periódico de um sistema unidimensional.....	12
Figura 3.8 - Estruturas de bandas de cristais de Si e GaAs. $E_g$ representa a largura da zona proibida.....	15
Figura 3.9 - Transições entre banda de valência e banda de condução em (a) um semiconductor de gap indireto e em (b) um semiconductor de gap direto.....	16
Figura 3.10 - Estrutura das redes cristalinas de GaAs e de InAs.....	18
Figura 3.11 – Estrutura de bandas completa para o GaAs.....	19
Figura 3.12 – Estrutura de bandas completa do InAs.....	19
Figura 3.13 – Afinidade eletrônica e função de trabalho para um semiconductor.	22
Figura 3.14 - Estrutura de bandas de uma heterojunção na região da interface.	22
Figura 3.15 – Superrede de InAs e GaAs.....	23
Figura 3.16 – Perfil das bandas de condução e de valência em uma superrede de InAs e GaAs.....	24
Figura 3.17 - Confinamento espacial e densidade de estados em estruturas de baixa dimensionalidade.....	25
Fig. 3.18 - AFM ilustrando o confinamento de portadores em pontos quânticos auto-gerados.....	26
Figura 3.19 - Preparação de amostra para fabricação de pontos quânticos artificiais.....	27
Figura 3.20 - TEM de um ponto quântico contido na amostra BH9833.....	28

Figura 3.21 - Superrede com pontos quânticos de InAs verticalmente alinhados	29
Figura 3.22 – TEM de uma das amostras com superredes de InAs/GaAs.....	29
Figura 4.1 - Caminho de um elétron em um semiconductor. (a) Movimento térmico; (b) Movimento combinado devido ao movimento térmico e o campo elétrico aplicado.....	31
Figura 4.2 - Ação de deriva em um cristal sujeito a eventos de espalhamento....	32
Figura 4.3 - Amostra de formato arbitrário para medidas de efeito Hall pelo método de van der Pauw. (a) resistividade; (b) fator Hall.....	34
Figura 4.4 - Trajetória de elétrons e lacunas no espalhamento por impurezas ionizadas.....	38
Figura 4.5 - Perfil da banda de condução em uma heteroestrutura com apenas uma heterojunção (a) e potencial aproximadamente triangular e em uma superrede (b) considerando um potencial quadrado.....	47
Figura 5.1 – (a) Estrutura homoepitaxial composta por uma camada de Si tipo n sobre um substrato tipo n <sup>+</sup> . (b) Estrutura heteroepitaxial composta por uma superrede de InAs/GaAs.....	49
Figura 5.2 - Configuração básica de uma câmara MBE similar à utilizada pelo DF-ICEEx-UFGM.....	51
Figura 5.3 - Sistema Riber MBE utilizado pelo DF-ICEEx-UFGM no crescimento das amostras.....	52
Figura 5.4 – Estrutura básica das amostras contendo pontos quânticos.....	53
Figura 5.5 - (a) Amostra para caracterização a 2 pontos e (b) Amostra para caracterização a 4 pontos.....	54
Figura 5.6 – Difusão de contatos em amostras com 4 contatos.....	55
Figura 5.7 - Porta-amostra com uma das amostras utilizadas em caracterizações a 2 pontos.....	56
Figura 5.8 - Porta-amostra com amostras utilizadas para caracterização a 4 pontos.....	57
Figura 5.9 - Parâmetros físicos da amostras utilizadas na caracterização a dois pontos.....	58

Figura 5.10 - Sistema de Criogenia: (a) tubo de transferência, (b) reservatório de He e (c) sistema de válvulas para controle do fluxo de He líquido.....	60
Figura 5.11 - (a) Eletro-ímã, (b) bomba de turbo vácuo e (c) criostato.....	62
Figura 5.12 - Sistema computacional para realização de experimentos.....	65
Figura 5.13 - Programa utilizado para realização da caracterização I(V).....	66
Figura 5.14 - Programa para realização da caracterização a 4 pontos.....	67
Figura 5.15 - Montagem experimental para experimentos a 2	68
Figura 5.16 - Montagem experimental para experimentos a 4	68
Figura 6.1 - Comportamento da resistividade 2D em com variação da temperatura.....	70
Figura 6.2 - Processo de linearização para determinação da energia de ativação.....	71
Figura 6.3 - Mobilidade elétrica dos portadores para as amostras contendo pontos quânticos.....	74
Figura 6.4 - Análise do comportamento da mobilidade da amostra BH9821.....	76
Figura 6.5 - Aplicação dos modelos de espalhamento à amostra BH9821.....	82
Figura 6.6 - Aplicação dos modelos de espalhamento à amostra BH9822.....	82
Figura 6.7 - Aplicação dos modelos de espalhamento à amostra BH9823.....	83
Figura 6.8 - Aplicação dos modelos de espalhamento à amostra BH9826.....	83
Figura 6.9 - Aplicação dos modelos de espalhamento à amostra BH9831.....	84
Figura 6.10 - Aplicação dos modelos de espalhamento à amostra	84
Figura 6.11 - Concentração 2D de portadores das amostras de InAs/GaAs.....	88
Figura 6.12 - Caracterização I(V) da amostra BH9830 com iluminação a 20mA de corrente no LED.....	91
Figura 6.13 - Caracterização I(V) da amostra BH9830 com iluminação a 5mA de corrente no LED.....	91
Figura 6.14 - Oscilações de corrente registradas na amostra BH9830 com iluminação à 5mA de corrente no LED e temperatura de 140K.....	92
Figura 6.15 - Oscilações de corrente registradas na amostra BH9830 com iluminação à 5mA de corrente no LED e temperatura de 155K.....	93

Figura 6.16 – Oscilações de corrente registradas na amostra BH9830 com iluminação à 5mA de corrente no LED e temperatura de 170K.....	93
---	----

### Lista de tabelas

Tabela 5.1 – Características de crescimento das amostras utilizadas.....	53
Tabela 6.1 – Pontos característicos das curvas de resistividade.....	70
Tabela 6.2 – Energias de ativação obtidas através das curvas de resistividade...	72
Tabela 6.3 – Pontos característicos da curva de mobilidade.....	75
Tabela 6.4 – Valores do Parâmetro $B$ das curvas de mobilidade para altas e baixas temperaturas.....	76
Tabela 6.5 – Desvios entre as curvas de mobilidade medida e calculada.....	86
Tabela 6.6 – Concentração 2D de impurezas ionizadas.....	88

### Lista de símbolos

$a$ – aceleração do portador de carga	[m.s <sup>-2</sup> ]
$B$ – Campo magnético estabelecido durante o efeito Hall	[T]
$b$ – espessura efetiva do gás bidimensional de elétrons	[m]
$d$ – espessura da heteroestrutura (multicamada) de cada amostra	[m]
$e$ – Carga elementar do elétron	[1,602.10 <sup>-19</sup> C]
$f_A$ e $f_B$ – Fatores de correção devido a erros originados pela geometria das amostras	–
$E$ – energia	[J] ou [eV]
$E_0$ – energia do elétron no vácuo (longe do semiconductor)	[eV]
$E_c$ – energia da banda de condução	[eV]
$E_F$ – energia do nível de Fermi	[eV]
$E_g$ – banda proibida de energia ( <i>bandgap</i> )	[eV]
$E_{gi}$ – banda proibida de energia de um isolante	[eV]
$E_{gs}$ – banda proibida de energia de um semiconductor	[eV]
$E_k$ – Energia do portador de vetor de onda $k$ em um cristal periódico	[eV]
$E_v$ – energia da banda de valência	[eV]

$F$ – força atuando sobre um portador de carga	[N]
Ga – Gálio	–
GaAs – Arseneto de Gálio	–
$h$ – Constante de Planck	[6,626.10 <sup>-34</sup> J.s]
$\hbar$ – Constante de Planck	[1,055.10 <sup>-34</sup> J.s]
$i$ – Corrente elétrica fornecida por fonte de corrente na caracterização a 4 pontos	[A]
$I$ – Corrente elétrica	[A]
$I_{ij}$ – Corrente elétrica estabelecida através de fonte de corrente em cada passo do experimento de caracterização a 4 pontos.	[A]
In – Índio	–
InAs – Arseneto de Índio	–
$J$ – densidade de corrente total.	[A.cm <sup>-2</sup> ]
$J_n$ – densidade de corrente de elétrons.	[A.cm <sup>-2</sup> ]
$J_p$ – densidade de corrente de buracos.	[A.cm <sup>-2</sup> ]
$k_B$ – constante de Boltzmann	[1,381.10 <sup>-23</sup> J.K <sup>-1</sup> ]
$k$ – vetor de onda do elétron	[m <sup>-1</sup> ]
$k_{me}$ – posição do mínimo da banda de condução no espaço recíproco	[m <sup>-1</sup> ]
$k_{mv}$ – posição do máximo da banda de valência no espaço recíproco.	[m <sup>-1</sup> ]
$n$ – concentração de elétrons	[cm <sup>-3</sup> ]
$n_{2D}$ – concentração planar de elétrons	[cm <sup>-2</sup> ]
$n_i$ – concentração de portadores intrínseca	[cm <sup>-3</sup> ]
$n^*$ – concentração de blindagens.	[cm <sup>-3</sup> ]
$N_{ii}$ – Concentração de impurezas ionizadas	[cm <sup>-3</sup> ]
$N_{ii2D}$ – Concentração planar de impurezas ionizadas	[cm <sup>-2</sup> ]
$p$ – concentração de lacunas (buracos)	[cm <sup>-3</sup> ]
$p'$ – Momento linear do elétron	–
$q_s$ – vetor de onda	–
$q$ – vetor de onda bidimensional	–
$m^*$ – massa efetiva	[kg]

$m_n^*$ – massa efetiva de elétrons	[kg]
$m_p^*$ – massa efetiva de lacunas	[kg]
$m_o$ – massa de repouso do elétron	$[9,1.10^{-31} \text{ kg}]$
$\mathbf{r}$ - vetor posição de uma partícula	[m]
$r_B$ – raio de Bohr	$[5,29.10^{-11} \text{ m}]$
$R_{ij,kl}$ – Resistências equivalentes às tensões $V_{kl}$ e correntes $I_{ij}$ registradas durante o experimento de efeito Hall	$[\Omega]$
$R_H$ – fator Hall	$[\text{m}^3 \cdot \text{C}^{-1}]$
$t$ – tempo	[s]
$T$ – temperatura	[K]
$\Theta$ – Volume da célula unitária	$[\text{cm}^3]$
$u_l$ – velocidade dos fônons acústicos longitudinais	$[\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}]$
$u_t$ – velocidade dos fônons acústicos transversais	$[\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}]$
$V$ – tensão	[V]
$V_{kl}$ – Diferença de potencial medida em cada passo do experimento de caracterização a 4 pontos.	[V]
$V_H$ – tensão Hall	[V]
$V(x)$ – potencial elétrico	[V]
$x$ – energia cinética do elétron	[J]
$Z_0$ – distância da interface da heteroestrutura à função de onda do elétron	[m]
$w$ – largura da camada de depleção	[cm]
$Z$ – estado de cargas das impurezas do material semiconductor	–
$\psi_k$ – função de onda do elétron (espaço recíproco)	–
$e\chi$ – afinidade eletrônica do semiconductor	[eV]
$\tau_c$ – tempo livre médio	[s]
$\tau_m$ – tempo de relaxação de momentum	[s]
$\mathcal{E}$ – campo elétrico	$[\text{V} \cdot \text{cm}^{-1}]$
$\epsilon_0$ – permissividade elétrica no vácuo	$[8,85.10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1}]$
$\epsilon_A$ – potencial de deformação acústica	[eV]
$\epsilon_\infty$ – permissividade elétrica do semiconductor à alta frequência	$[\text{F} \cdot \text{m}^{-1}]$

$\epsilon_s$ – permissividade elétrica estática do semicondutor	[F.m <sup>-1</sup> ]
$e\phi_s (W_0)$ – função de trabalho do semicondutor	[eV]
$\lambda$ – comprimento de onda	[m]
$\lambda_B$ – comprimento de onda de de Broglie	[m]
$\omega$ – frequência angular	[s <sup>-1</sup> ]
$\omega_1$ – frequência dos fônons ópticos longitudinais	[s <sup>-1</sup> ]
$\Omega$ - Frequência angular relacionada a um fônon	[s <sup>-1</sup> ]
$\mu$ – mobilidade elétrica	[cm <sup>2</sup> .V <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$\mu_n$ – mobilidade elétrica de um semicondutor tipo n	[cm <sup>2</sup> .V <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$\mu_p$ – mobilidade elétrica de um semicondutor tipo p	[cm <sup>2</sup> .V <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$v_g$ – velocidade de grupo	[cm.s <sup>-1</sup> ]
$v_d$ – velocidade de deriva	[cm.s <sup>-1</sup> ]
$v_n$ – velocidade de deriva de elétrons	[cm.s <sup>-1</sup> ]
$v_p$ – velocidade de deriva de lacunas	[cm.s <sup>-1</sup> ]
$\theta$ – temperatura de Debye	[K]
$\rho$ – resistividade elétrica	[ $\Omega$ .cm]
$\sigma$ – condutividade elétrica	[ $\Omega$ .cm <sup>-1</sup> ]
$\sigma_X$ – seção de choque diferencial de espalhamento referente ao espalhamento por impurezas neutras	[cm <sup>2</sup> ]
$\Delta E_c$ – descontinuidade entre as bandas de condução na interface de uma heterojunção.	[eV]
$\Delta E_v$ – descontinuidade entre as bandas de valência na interface de uma heterojunção.	[eV]
$\Delta U(\mathbf{r})$ – perturbação do potencial da rede cristalina devido aos fenômenos de espalhamento	[V]
$\Gamma$ - posição do centro da primeira zona de Brillouin	–
AFM – Microscopia de força atômica	–
MBE – epitaxia por feixes moleculares	–
MEV – microscopia eletrônica de varredura	–
TEM – microscopia eletrônica de transmissão	–

## Resumo

Os pontos quânticos autogerados têm despertado muito interesse em pesquisas básicas e aplicadas. Neste trabalho, medidas de resistividade pelo método de van der Pauw e de efeito Hall são realizadas para obter a mobilidade de uma série de amostras de superredes de InAs/GaAs crescidas por Epitaxia de Feixes Moleculares no modo Stranski-Krastanov e contendo pontos quânticos de InAs. Efetuamos também medidas  $I(V)$  com alimentação **DC**. Três parâmetros de crescimento foram variados: a cobertura de InAs, o número de repetições das multicamadas de InAs/GaAs e a espessura do espaçador de GaAs. As medidas foram realizadas em uma faixa de temperatura de 5 a 310 K. Os resultados indicam amostras com baixa resistividade e dependência da mobilidade em relação à temperatura, que foi ajustada de forma a avaliar a aplicabilidade dos modelos de espalhamentos conhecidos. Devido ao confinamento quântico na interface entre InAs e GaAs, todos os mecanismos de espalhamento utilizados consideraram um gás bidimensional de elétrons. Os mecanismos de espalhamento considerados foram: espalhamento por deformação de potencial e piezelétrico, por fônons acústicos, por fônons ópticos polares e espalhamento por impurezas ionizadas. O espalhamento por impurezas ionizadas revela-se dominante às baixas temperaturas e o espalhamento por fônons ópticos polares, às altas temperaturas. O modelo de espalhamento por impurezas ionizadas fornece uma estimativa da concentração de impurezas. A análise da concentração de portadores evidenciou que propriedades como forma, tamanho, peso específico e simetria dos pontos quânticos têm maior influência nas propriedades elétricas às baixas temperaturas, abaixo de 30 K. A caracterização  $I(V)$  evidenciou comportamentos elétricos não lineares para altas intensidades de campo elétrico aplicado e sob excitação de radiação infravermelha.

**Palavras-chave:** InAs/GaAs, superredes, efeito Hall,  $I(V)$ , espalhamento.

## Abstract

Self-assembled quantum dots are in the center of interest of both fundamental and applied research. In this work, van der Pauw resistivity, Hall effect and I(V) measurements are applied to obtain the mobility on a series of Molecular Beam Epitaxy InAs/GaAs superlattices samples containing InAs quantum dots, grown in the Stranski-Krastanov mode. Three growth parameters were varied: the InAs coverage, the number of repetitions of the InAs/GaAs layers and the GaAs spacer thickness. The measurements were done in a 5K to 310K temperature range. The results presenting samples with low resistivity and the mobility dependence on the temperature were adjusted in order to evaluate the applicability of the known scattering models. Due to quantum confinement at the GaAs/InAs interface, all scattering mechanisms were considered for a two-dimensional electron gas. The evaluated scattering mechanisms were deformation potential scattering, piezoelectric scattering for acoustic phonons, polar optical scattering for optical phonons and ionized impurity scattering. The scattering by ionized impurities revealed dominant at the low temperatures and the polar optical scattering at high temperatures. The model of scattering by ionized impurities gives information about the impurities concentrations. The analysis of the carrier concentration evidenced that properties like form, size, density and symmetry of quantum dots influence more the electrical properties at the low temperatures, below 30K. The I(V) characterization presents nonlinear electrical behaviors at the high electrical fields intensities and under infrared radiation.

**Keywords:** InAs/GaAs, superlattices, Hall effect, I(V), scattering.

## Capítulo 1 - Introdução

A pesquisa de materiais semicondutores tem atraído considerável interesse nos últimos anos, visando o desenvolvimento de novas tecnologias e de ciência básica.

Com o desenvolvimento e aprimoramento de técnicas de crescimento de cristais, como a Epitaxia por Feixe Molecular ou MBE (Molecular Beam Epitaxy), tornou-se possível o crescimento de camadas monoatômicas individuais, produzindo redes cristalinas artificiais.

Grande parte dos avanços nessa área ocorreram a partir do surgimento das estruturas híbridas, as chamadas heteroestruturas<sup>[1,2]</sup>: estruturas baseadas em heterojunções de materiais semicondutores diferentes. Quando se unem duas redes diferentes, duas propriedades podem variar: O espaçamento interatômico e a largura da zona proibida de energia (o denominado “band gap”)<sup>[3]</sup>. Se dois semicondutores (A e B) de larguras de zona proibida de energia diferentes forem unidos atômica e quimicamente, ocorrerá uma descontinuidade na banda de energia da estrutura resultante, que passa a comportar-se como poço de potencial para o movimento de portadores na direção de crescimento da estrutura, confinando-os em um poço aproximadamente triangular. Porém, a estrutura mais comumente utilizada é a do tipo A/B/A.../B e a repetição desta, denominada superrede. Nesta estrutura a descontinuidade da banda de energia é aproximadamente quadrada formando um poço quântico finito. Se as dimensões do poço forem comparáveis ao comprimento de onda de de Broglie<sup>[4]</sup>, o movimento destes portadores torna-se quantizado, causando alterações no espectro energético e nas propriedades dinâmicas dos portadores, a exemplo da alta mobilidade eletrônica dos elétrons confinados, que permite o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos de alto desempenho.

Muitas estruturas que apresentam esses efeitos de quantização têm sido produzidas. Considerando-se duas redes de materiais semicondutores com espaçamento interatômicos diferentes, surgem tensões em ambas as redes, que, acima de certa espessura crítica, resultam na deformação da rede de maior espaçamento na forma de ilhas tridimensionais. Essas estruturas são chamadas de pontos quânticos auto-gerados. Em virtude do potencial de confinamento gerado por elas em todas as três direções espaciais, essas estruturas podem ser estudadas como átomos gigantes.

Amostras de heteroestruturas de InAs/GaAs<sup>[5]</sup> possuem este tipo de estrutura e são conhecidas pela formação de pontos quânticos de InAs de formato piramidal, que se comportam como poços de potencial. Esses poços de potencial quântico são regiões de acúmulo de gás de elétrons quase-bidimensionais (2DEG)<sup>[2,6]</sup>. O gás de elétrons normalmente apresenta propriedades físicas interessantes e de potencial importância para a tecnologia de semicondutores, particularmente no que diz respeito a propriedades óticas e propriedades de transporte, dentre elas, a de melhorar as características de condução em relação ao InAs puro.

O empilhamento deste tipo de superrede mostra que os pontos quânticos tendem a se formar uns sobre os outros, ou seja, na mesma orientação vertical dos pontos quânticos das camadas anteriores. Isto ocorre quando as camadas de InAs e GaAs da heteroestrutura são muito finas, normalmente abaixo de 3 ML<sup>[5]</sup>. As tensões sobre a rede cristalográfica de GaAs durante a formação dos pontos quânticos podem induzir a formação de defeitos intrínsecos no material, gerando estados eletrônicos no interior da zona proibida de energia do GaAs. Esses defeitos são indesejáveis, pois impedem o acesso a algumas das propriedades advindas dos pontos quânticos<sup>[7]</sup>.

O uso de pontos quânticos no desenvolvimento de dispositivos eletrônicos exige o conhecimento de algumas propriedades destas estruturas e de suas dependências dos diferentes parâmetros de crescimento. O controle dos estados eletrônicos induzidos pelos pontos quânticos, por exemplo, é de grande relevância para o desenvolvimento da computação quântica e na produção de lasers com elevada estabilidade térmica<sup>[8]</sup>. As pesquisas mais recentes nesta área estão bastante concentradas no modelamento dos níveis eletrônicos<sup>[2]</sup> e na compreensão da dinâmica dos portadores. A mobilidade dos portadores, por exemplo, é um parâmetro de especial importância na investigação e compreensão dos mecanismos de espalhamento que mais afetam a dinâmica dos portadores em heteroestruturas de materiais semicondutores<sup>[3, 9, 10, 11]</sup>.

A caracterização Hall foi empregada na investigação das propriedades de transporte de portadores em superredes de InAs/GaAs contendo pontos quânticos de InAs. Este trabalho consistiu em, de posse dos resultados de uma caracterização Hall<sup>[10]</sup>, identificar a participação combinada dos principais mecanismos de espalhamento apontados na literatura. Adotou-se, nesta fase, a mobilidade Hall como principal objeto de estudo, por ser a grandeza que melhor descreve tais fenômenos.

Verificou-se na literatura [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19] que, neste tipo de amostra, os mecanismos de espalhamento mais significativos são: Espalhamentos por impurezas ionizadas, por fônons ópticos polares, piezoelétrico, por potencial de deformação de fônons acústicos e, eventualmente, por discordâncias. Em todos os casos, a análise baseia-se na deformação causada no potencial periódico do cristal semiconductor. Através da análise das curvas de mobilidade Hall foi possível verificar que, dos mecanismos mencionados acima, os espalhamentos por impurezas ionizadas e por fônons ópticos polares são de principal importância nas amostras utilizadas neste trabalho. Em suma, nosso trabalho tem por essência avaliar o comportamento da mobilidade Hall em função da temperatura.

O capítulo 2 traça alguns objetivos básicos a serem cumpridos ao final deste trabalho. O capítulo 3 tem como função apresentar conceitos físicos bastante elementares, mas essenciais para o entendimento de semicondutores e de heteroestruturas de materiais semicondutores. Apresenta também, das características físicas dos semicondutores InAs e GaAs, aquelas que consideramos de grande importância nesse trabalho. O capítulo 4 aborda as propriedades de transporte em materiais semicondutores, dando especial importância aos fenômenos de espalhamento. O capítulo 5 descreve as técnicas, procedimentos experimentais e equipamentos utilizados na caracterização elétrica. O capítulo 6 apresenta, de forma gráfica ou sob forma de tabelas, os resultados obtidos nos experimentos. Apresenta também discussões acerca dos resultados obtidos, buscando possíveis interpretações físicas dos fenômenos observados experimentalmente. O capítulo 7 apresenta as principais conclusões do trabalho e aponta perspectivas futuras do grupo para esta linha de pesquisa. Ao final encontram-se as referências utilizadas na elaboração do trabalho.

## Capítulo 2 - Objetivos

O intuito deste trabalho é registrar e compreender alguns fenômenos relacionados com o transporte de portadores de carga elétrica em heteroestruturas de InAs/GaAs contendo pontos quânticos [7,20]. Ao avaliar os resultados de experimentos de caracterização Hall com variação da temperatura em amostras contendo este tipo de heteroestruturas, verifica-se que nenhuma das teorias de espalhamento é capaz de explicar, de forma independente, o comportamento físico das propriedades de transporte de portadores em uma faixa extensa de temperaturas, indicando a ocorrência de uma combinação de mecanismos de espalhamento. Esta proposta é reforçada se considerado que, em certas faixas localizadas de temperatura, alguns dos modelos apresentam resultados bastante aproximados dos experimentais, porém com uma dependência da temperatura ligeiramente diferente daquela observada. Assim, o trabalho baseou-se nas intenções básicas listadas a seguir:

- Registrar a presença de possíveis influências dos pontos quânticos sobre as propriedades de transporte de cargas do material, apontando efeitos elétricos característicos a essas estruturas.
- Identificar, pela análise da mobilidade Hall e com base nos modelos de espalhamento propostos nas referências, os mecanismos de espalhamento mais importantes nas amostras de InAs/GaAs, bem como as respectivas faixas de temperatura de atuação.
- Combinar os modelos existentes de forma a obter uma equação que represente, da melhor maneira possível, para cada amostra, a mobilidade Hall em toda a faixa de temperaturas estudada e traçar considerações acerca da qualidade deste modelo com base nos resultados experimentais.
- Registrar e analisar, pelo uso desta equação de cálculo da mobilidade Hall [7,10], algumas das características físicas mais importantes das superredes de InAs/GaAs relacionadas ao transporte de cargas elétricas.

## Capítulo 3 – Princípios Teóricos de Materiais Semicondutores

### 3.1 – Conceito de Material Semicondutor

#### 3.1.1 – *Bandas de Energia em Cristais*

Uma grande parte dos materiais utilizados na construção de dispositivos eletrônicos é formada por estruturas cristalinas ou cristais <sup>[3,4]</sup>. É caso dos semicondutores, que são normalmente sólidos e constituídos por redes cristalinas com uma grande quantidade de átomos. Portanto, para uma correta interpretação das características destes materiais é necessário compreender como os átomos interagem entre si.

Um elétron num átomo isolado tem seus estados quânticos caracterizados por possuir níveis de energia discretos e quantizados. Por outro lado, em um cristal com um grande número de átomos, os elétrons estão sujeitos à interação com os átomos vizinhos <sup>[3]</sup>. Consideremos inicialmente um sistema composto por 2 átomos separados por uma distância muito maior que o raio de cada um deles. Pode-se afirmar que neste sistema todos os níveis eletrônicos são duplamente degenerados <sup>[19]</sup>, pois para cada nível de energia há duas funções de onda distintas, ou seja, pode haver 2 elétrons com níveis de energia idênticos. Quando estes átomos estão muito próximos, de tal forma que haja sobreposição de suas funções de onda, a interação entre eles não mais poderá ser desprezada. Segundo o modelo de Feynman, ocorrerá um acoplamento das funções de onda dos elétrons dos dois átomos, resultando numa divisão em 2 estados ligeiramente diferentes (para cada nível de energia) que correspondem às funções de onda simétrica e anti-simétrica. Este raciocínio pode ser estendido para um sistema composto por  $n$  átomos. Neste caso, para cada nível discreto dos  $n$  átomos surgem  $n$  níveis de energia ligeiramente diferentes.

Em um cristal, com uma grande quantidade de átomos muito próximos, da ordem de  $10^{22}$ , os níveis discretos dos vários átomos sofrem acoplamentos, resultando em faixas ou bandas de energias <sup>[3]</sup> de estados permitidos praticamente contínuas, conforme ilustrado na figura 3.1.

Estas bandas correspondem às soluções possíveis para a equação de Schrödinger para diferentes distâncias entre átomos.

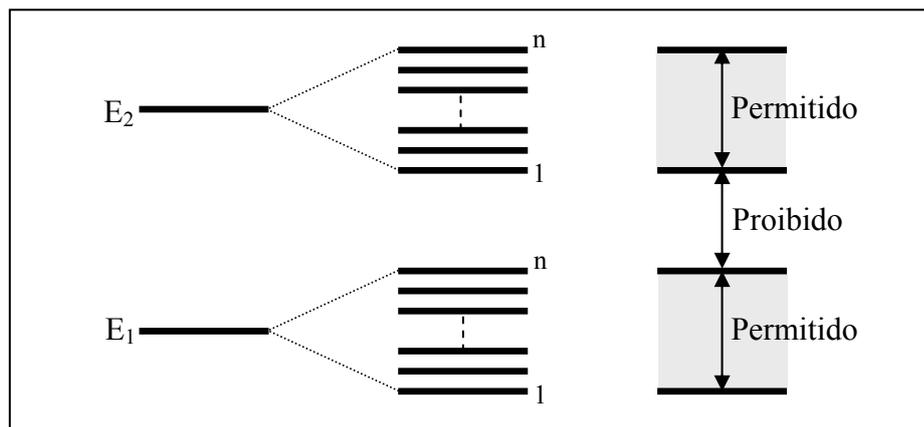


Figura 3.1 - Transformação dos estados discretos de átomos em bandas de energia <sup>[21]</sup>.

A figura 3.2 ilustra a variação da energia dos estados eletrônicos em função da separação interatômica para um sistema com muitos átomos de Na (Sódio). Bandas adjacentes podem estar separadas por regiões (faixas) de energias proibidas aos elétrons e, portanto, sem estados eletrônicos permitidos. Essas regiões são muito conhecidas como *band gaps* (do inglês) e, neste trabalho, serão denominadas *faixas proibidas de energia*. A largura das faixas proibidas de energia pode variar bastante dependendo dos tipos de elementos químicos que compõem o material. Em alguns casos pode ser nula ou mesmo negativa, ou seja, podem ocorrer sobreposições entre bandas.

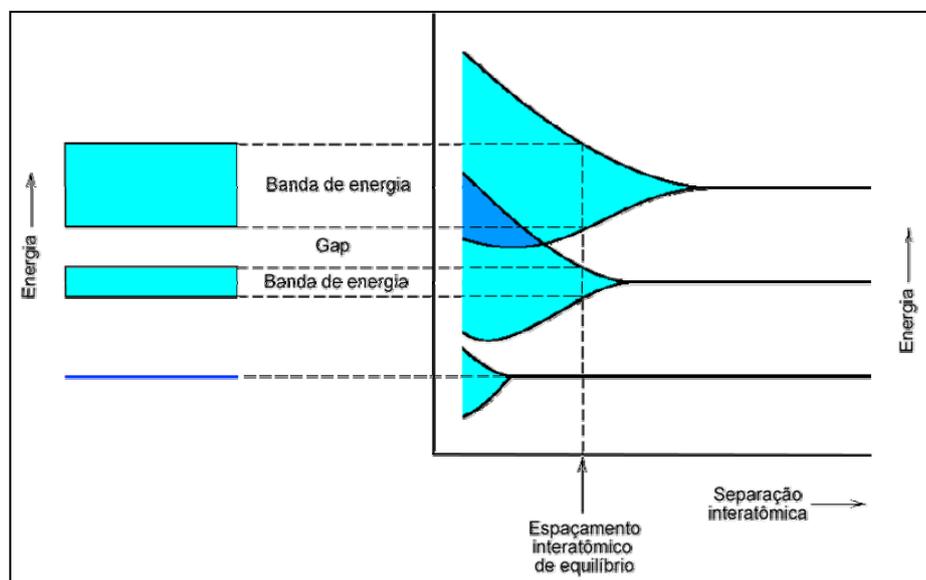


Figura 3.2 - Estrutura de bandas de energia em função da distância entre átomos.

A classificação do material quanto a sua capacidade de transportar cargas elétricas está relacionada com os últimos níveis de energia ocupados pelos portadores com os mesmos no estado fundamental, ou seja, com as características da última banda de energia ocupada (denominada banda de valência) sem ocorrência de

excitações externas. De forma a garantir a ausência de estados excitados, considera-se também um caso hipotético com o cristal à 0K.

Nos materiais metálicos <sup>[3,4]</sup> a última banda normalmente encontra-se semipreenchida. Neste caso, a abundância de estados eletrônicos disponíveis no interior da banda faz com que os portadores necessitem de pouquíssima energia para serem excitados para os níveis eletrônicos vizinhos, pois a energia de ligação no estado fundamental é muito pequena. Por isso, no estado excitado os portadores podem ser considerados praticamente “livres”, sendo capazes de atender prontamente a possíveis excitações externas e se deslocar pelo material através dos estados eletrônicos disponíveis. A banda de energia que comporta os estados excitados é denominada banda de condução. Portanto, em um metal a zona proibida de energia é nula, pois o fundo (limite inferior) da banda de condução é coincidente com o topo (limite superior) da banda de valência. Devido a esta característica, os materiais metálicos apresentam alta condutividade.

Por outro lado, num cristal isolante ou semicondutor <sup>[3, 4]</sup>, a banda de valência encontra-se totalmente preenchida, ou seja, à 0K não existem estados eletrônicos disponíveis no interior da última banda e uma zona proibida de energia não nula separa os estados fundamentais dos excitados. A ocupação dos estados excitados por portadores está condicionada ao recebimento de energia suficiente para que eles transponham a zona proibida de energia. Neste caso, quanto maior a largura da zona proibida de energia, maior a dificuldade que os portadores têm para realizar transições entre a banda de valência e a banda de condução sob uma excitação externa, e menor a condutividade do material. Para efeito de classificação, pode-se adotar o seguinte critério arbitrário <sup>[3, 9]</sup>: Quando a largura da zona proibida de energia tem um valor elevado ( $>2\text{eV}$ ) o material é considerado isolante, pois os portadores precisam ganhar muita energia para ocupar estados excitados e quando for baixo ( $<2\text{eV}$ ) o material será um semicondutor.

Assim, os materiais podem ser classificados como condutores (se a última banda estiver parcialmente preenchida), semicondutores (se a penúltima banda estiver cheia e a zona proibida de energia for pequena) ou como isolantes (se a penúltima banda estiver cheia e a zona proibida de energia for elevada) <sup>[3, 9, 11]</sup>. A figura 3.3 apresenta tal situação, onde a região hachurada representa os níveis eletrônicos ocupados no estado fundamental. Portanto, uma das características

fundamentais dos materiais semicondutores é a de apresentar propriedades de condução elétrica intermediárias entre as dos isolantes e dos metais. A grandeza física que melhor apresenta tal característica é a condutividade, que também pode ser representada pelo seu inverso, a resistividade.

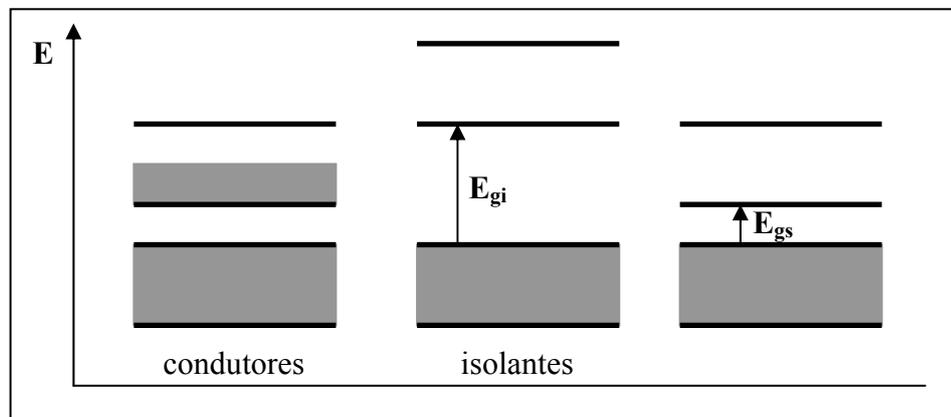


Figura 3.3 - Comparação simplificada das bandas de energia de metais, isolantes e semicondutores.

### 3.1.2 – Impurezas em Materiais Semicondutores

Os semicondutores intrínsecos <sup>[4]</sup> são caracterizados pela ausência de impurezas. Um cristal semiconductor puro à temperatura de 0K apresenta todos os estados eletrônicos da banda de valência ocupados e nenhum elétron ocupando estados da banda de condução, ou seja, todas as ligações entre átomos vizinhos estão completas e, conseqüentemente, o material comporta-se como um isolante. Há vários processos para transferir portadores entre as bandas de valência e de condução. O processo mais comum é a excitação térmica <sup>[21]</sup>, pela qual um certo número de elétrons do topo da banda de valência passa a ocupar os primeiros níveis da banda de condução quando  $T > 0K$ . Quando um elétron é excitado para a banda de condução, ele deixa um nível de energia desocupado na banda de valência. Esse estado de energia é conhecido como buraco (ou lacuna) e tem características de transporte elétrico similares às de um elétron na banda de condução, porém comportando-se como um portador de carga positiva.

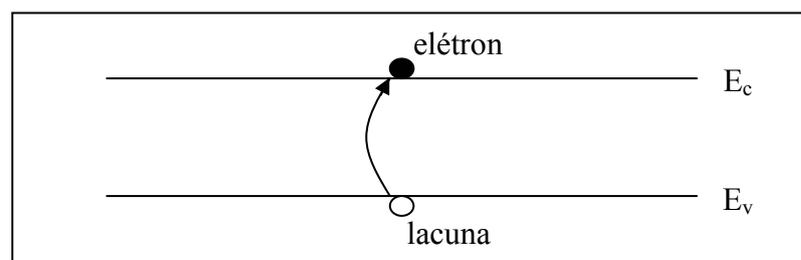


Figura 3.4 - Formação de um par elétron-lacuna por excitação.

Nos semicondutores intrínsecos, o número de elétrons livres e de lacunas sempre será igual, já que os portadores são gerados aos pares. Esta quantidade é denominada concentração intrínseca de portadores <sup>[3,4]</sup>:

$$n_i = n = p \quad (3.1)$$

$n$  e  $p$  são as concentrações de elétrons e lacunas no material, respectivamente.

Semicondutores intrínsecos possuem uma condutividade baixa e muito dependente da temperatura. Por esse motivo, na fabricação de dispositivos eletrônicos normalmente são utilizados semicondutores com certa concentração de impurezas, colocadas propositalmente e de forma controlada no cristal. Esse processo é conhecido como dopagem <sup>[3]</sup>.

Semicondutores que possuem impurezas são denominados semicondutores extrínsecos <sup>[4]</sup>, independentemente da natureza da natureza das impurezas. Na prática, costuma-se denominar semicondutor extrínseco àquele “dopado” com impurezas. Impurezas são átomos diferentes daqueles que deveriam compor a estrutura cristalina do material e que ocupam posições cristalográficas, gerando níveis de energia espúrios. As impurezas de maior interesse são aquelas que geram níveis de energia no interior da zona proibida de energia.

Impurezas doadoras são aquelas que, por possuírem um elétron de valência a mais que os átomos do constituinte principal do cristal, doam elétrons para a banda de condução. Semicondutores dopados com impurezas doadoras possuem maior concentração de elétrons do que de buracos e por isso são denominados semicondutores do tipo n.

Por outro lado, impurezas que possuem um elétron de valência a menos que os átomos do constituinte principal do cristal são denominadas aceitadoras. Neste caso, surge uma lacuna na banda de valência em função da ausência de um elétron para completar a ligação covalente <sup>[9]</sup>. Semicondutores dopados com impurezas aceitadoras são denominados semicondutores do tipo p porque possuem maior concentração de lacunas do que de elétrons.

### 3.1.2.1 - Níveis de energia de impurezas

Em materiais semicondutores com impurezas inseridas por meio de dopagem, ou seja, intencionalmente, os níveis espúrios advindos das impurezas normalmente

são próximos das bandas de condução e de valência, de forma que até mesmo uma pequena energia térmica seja suficiente para provocar sua excitação. São os chamados níveis rasos. Na figura 3.5(a), após receber uma pequena energia, o elétron do nível espúrio é promovido à banda de condução e passa a contribuir para o transporte de cargas no material como um portador de carga negativa. Por outro lado, na figura 3.5(b), sob as mesmas condições, um elétron é excitado da banda de valência para o nível espúrio, gerando uma lacuna na banda de valência. Esta lacuna contribui para os fenômenos de transporte de carga, comportando-se como um portador de carga positiva. Em semicondutores com impurezas doadoras e aceitadoras ocorre o fenômeno denominado compensação, pelo qual as impurezas presentes em maior concentração serão dominantes e compensarão aquelas de menor concentração.

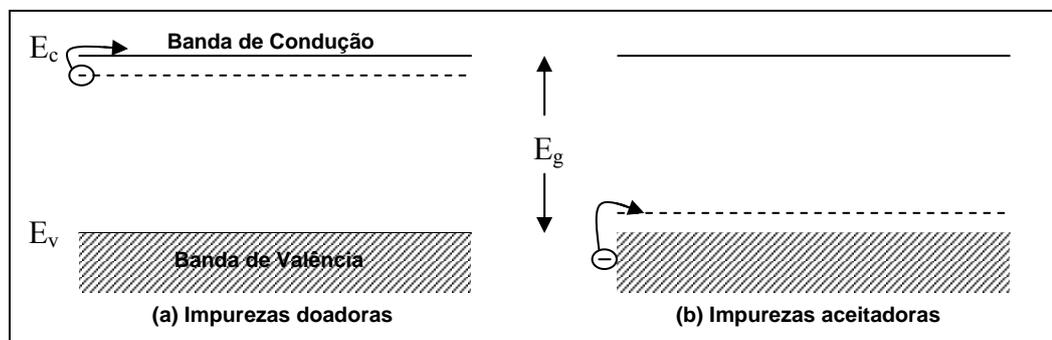


Figura 3.5 – Níveis de impurezas inseridas por dopagem [3].

As impurezas descritas acima recebem especial atenção neste trabalho, pois terão importância fundamental quando do estudo dos mecanismos de espalhamento de portadores em materiais semicondutores [12]. São defeitos pontuais extrínsecos, ou seja, são defeitos a nível atômico e são compostos por elementos estranhos no material do cristal. Quanto ao seu posicionamento, as impurezas podem ser de dois tipos básicos:

**Impurezas substitucionais**, correspondentes à presença de átomos estranhos ocupando posições de outros átomos da rede;

**Impurezas intersticiais**, correspondentes à presença de átomos estranhos ocupando posições da rede onde não deveria haver átomos.

#### *Defeitos intrínsecos em cristais* [22, 23]

Além dos níveis espúrios provenientes de impurezas, normalmente ocorrem níveis de energia no interior da zona proibida de energia, oriundos de defeitos na

rede cristalina do material e denominados defeitos intrínsecos. Estes defeitos podem ser inibidos ou incentivados alterando-se as condições termodinâmicas durante o crescimento do cristal semiconductor. Dentre os principais defeitos intrínsecos, podemos destacar <sup>[22]</sup>:

- **Vacância:** É a ausência de um átomo da rede cristalina. É gerado à temperaturas maiores que 0K, ou seja, é um defeito gerado termodinamicamente e sua concentração aumenta exponencialmente com a temperatura;
- **Defeitos auto-intersticiais:** São átomos do próprio material que compõe a rede ocupando posições onde não deveria haver átomos;
- **Par de Frenkel:** Corresponde à formação de um par vacância/auto-intersticial devido à efeitos termodinâmicos;
- **Anti-sítio:** É o defeito caracterizado pela inversão de posições de átomos da rede em semicondutores compostos, como o caso dos semicondutores InAs e GaAs. Neste caso, um de anti-sítio seria a troca das posições de um átomo de In com um átomo As no InAs.
- **Discordâncias:** Os defeitos em linha, chamados de discordâncias, são defeitos que causam distorção de rede cristalina em torno de uma linha e caracterizam-se por envolver um plano extra de átomos. Estas distorções podem ser formadas durante a solidificação de cristais, em deformações plásticas de sólidos cristalinos ou como consequência de uma alta concentração de vacâncias. Os três principais tipos de defeitos em linha são: Discordâncias em cunha, discordâncias em hélice e discordâncias mistas. A figura 3.6 ilustra discordâncias em hélice (a) e em cunha (b).

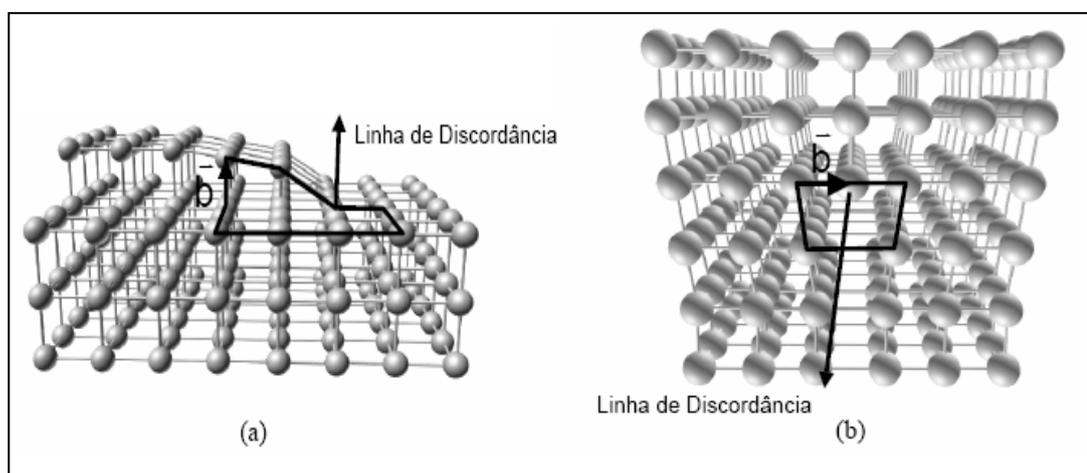


Figura 3.6 - Tipos de discordâncias <sup>[55]</sup>.

### 3.2 – Movimento de elétrons em uma rede cristalina

Em geral, os modelos de elétrons livres ignoram a interação do elétron com a rede cristalina. Este aspecto passa a ser considerado utilizando modelos que incluem uma variação periódica no potencial da rede cristalina levando em conta algumas aproximações. Dentre elas pode-se destacar:

Considera-se que os núcleos dos átomos são fixos e ocupam posições bem definidas no cristal;

Considera-se uma situação de transporte de apenas 1 partícula, onde todas as demais integram os íons que formam o cristal.

A figura 3.7 ilustra o perfil de potencial resultante de tais aproximações para um sólido cristalino em apenas uma dimensão. Neste caso,  $a$  representa a distância interatômica.

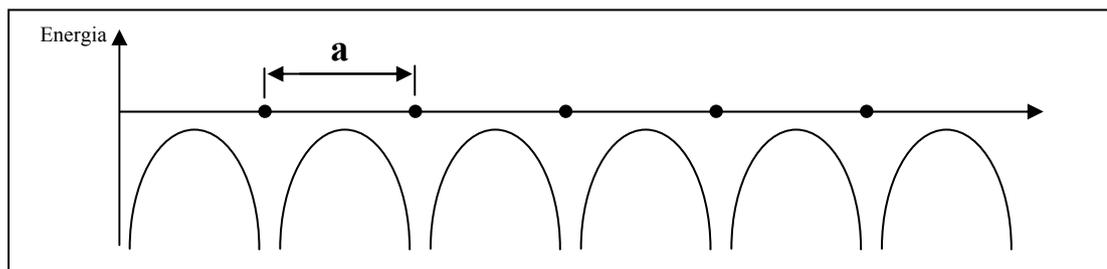


Figura 3.7 – Potencial periódico de um sistema unidimensional <sup>[3, 11]</sup>.

Este potencial periódico conduz a soluções da equação de Schrödinger que formam bandas. As autofunções de uma partícula livre sob um potencial periódico unidimensional têm a seguinte forma:

$$\psi_k(x) = u_k(x) \cdot e^{ikx} \quad (3.2)$$

sendo  $k$  o vetor de onda associado à partícula e “ $x$ ” sua posição ao longo do eixo unidimensional. A periodicidade do cristal requer que:

$$u_k(x) = u_k(x + a) = u_k(x + na) \quad (3.3)$$

onde  $n$  é um número inteiro. Portanto, segundo o teorema de Bloch, a função  $u_k(x)$  tem periodicidade igual à do potencial cristalino. Assim, o efeito do potencial periódico é o de fazer com que as autofunções de uma partícula livre apresentem amplitude variável e de mesmo período que a rede cristalina, ou seja, é o de modular periodicamente a amplitude das autofunções de uma partícula livre. A equação 3.2 pode ser também estendida para o caso de um cristal tridimensional, que resulta em:

$$\psi_k(\mathbf{r}) = u_k(\mathbf{r}).e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (3.4)$$

onde  $\mathbf{r}$  é o vetor posição da partícula. A respectiva solução para a equação de Schrödinger dependente do tempo é uma onda plana:

$$\psi_k(\mathbf{r}, t) = u_k(\mathbf{r}).e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}.e^{-i\omega t} = u_k(\mathbf{r}).e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \quad (3.5)$$

onde o fator  $u_k(\mathbf{r})$  descreve a modulação e o fator exponencial representa uma onda de comprimento de onda  $\lambda = 2\pi/k$  que se desloca no sentido  $+\mathbf{r}$  (para  $k > 0$ ) ou no sentido  $-\mathbf{r}$  (para  $k < 0$ ).

### 3.3 – Massa efetiva

No estudo das propriedades de transporte de materiais semicondutores é de fundamental importância compreender como o elétron se comporta num sólido cristalino, conforme descrito anteriormente, e sob a ação de um campo elétrico. Nesse aspecto, é muito conveniente introduzir o conceito de massa efetiva, útil na descrição do movimento dos portadores de carga num sólido cristalino e proveniente de uma combinação da solução da equação de Schrödinger com as equações de movimento de Newton. Pode-se descrever o movimento do elétron em termos de um grupo de ondas viajantes como aquela apresentada na equação 3.5. Este pacote de onda se propaga com velocidade de grupo dada por <sup>[22, 24]</sup>:

$$\mathbf{v}_g = \frac{\partial \omega(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = \text{grad}_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) = \vec{\nabla}_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) \quad (3.6)$$

ou seja, a velocidade de grupo corresponde ao gradiente da velocidade angular  $\omega(\mathbf{k})$  com respeito ao vetor de onda  $\mathbf{k}$ , do espaço recíproco.

Sendo a energia do elétron dada por  $E = \hbar\omega$ , então pode-se escrever a seguinte relação:

$$\vec{\nabla}_{\mathbf{k}} E = \hbar \mathbf{v}_g \quad (3.7)$$

Se, por exemplo, através de um campo elétrico, o elétron for submetido a uma força  $\mathbf{F}$ , sua energia vai variar da quantidade  $dE$  em um trecho  $d\mathbf{r}$ , onde  $dE = \mathbf{F}d\mathbf{r}$ . Dessa forma, podemos relacionar a velocidade de grupo com a força através de:

$$\mathbf{F}.d\mathbf{r} = \hbar \mathbf{v}_g d\mathbf{k} \quad (3.8)$$

mas  $d\mathbf{r} = \mathbf{v}_g dt$ , logo:

$$\mathbf{F} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} \quad (3.9)$$

Esta equação pode ser comparada à segunda lei de Newton. Por esse resultado percebe-se que o potencial periódico da rede não afeta a forma da equação de variação do momentum, mas sim a dependência da energia com o momentum, que consiste em alterar a massa do elétron. Assim, exprimimos a aceleração do elétron em função de  $E$  e de  $\mathbf{k}$  a partir da equação 3.7:

$$\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\bar{\nabla}_k \mathbf{E}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial \mathbf{k}^2} \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k^2 \mathbf{E} \frac{d\mathbf{k}}{dt} \quad (3.10)$$

Substituindo este resultado na equação 3.9, obtêm-se:

$$\mathbf{F} = \frac{\hbar^2}{\left( \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}^2} \right)} \mathbf{a} \quad (3.11)$$

Portanto, verificamos que num cristal e sob a ação de uma força  $\mathbf{F}$  o portador se comporta como uma partícula livre, porém com uma massa efetiva dada por:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left( \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}^2} \right)} \quad (3.12)$$

Os modelos de bandas de energia apresentados anteriormente não consideravam a periodicidade da rede cristalina apresentada na seção 3.2. A consequência importante desse tipo de abordagem para o caso de transporte de portadores é que eles são descritos no cristal por ondas, caracterizadas por um vetor de onda  $\mathbf{k}$  e uma energia  $E_k$ , onde:

$$E_k = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \quad (3.13)$$

De forma complementar, a consideração de um cristal hipotético unidimensional não leva em conta que a energia do portador não é função apenas do módulo de  $\mathbf{k}$ , mas também de sua direção. O desenvolvimento matemático para um cristal real tridimensional é mais complexo, porém os conceitos são similares àqueles apresentados para o caso unidimensional. As bandas de energia devem ser representadas para várias direções de  $\mathbf{k}$  no cristal e, normalmente, representa-se a energia em função de  $\mathbf{k}$  para as direções de maior simetria do cristal. A forma mais comum de representação das bandas de energia é no esquema de bandas reduzido à primeira zona de Brillouin <sup>[24]</sup>, em que as bandas no espaço recíproco são

transladadas para a primeira zona de Brillouin. Por este esquema é possível verificar claramente a inexistência de estados eletrônicos entre bandas e, por essa razão, essas regiões são chamadas de zonas proibidas de energia. A figura 8 apresenta uma parte dos diagramas de bandas em esquema de zona reduzida para 2 cristais reais de interesse tecnológico: Silício - Si (a) e Arseneto de Gálio - GaAs (b). As curvas representam os estados eletrônicos válidos determinados pela equação de Schrödinger independente do tempo.

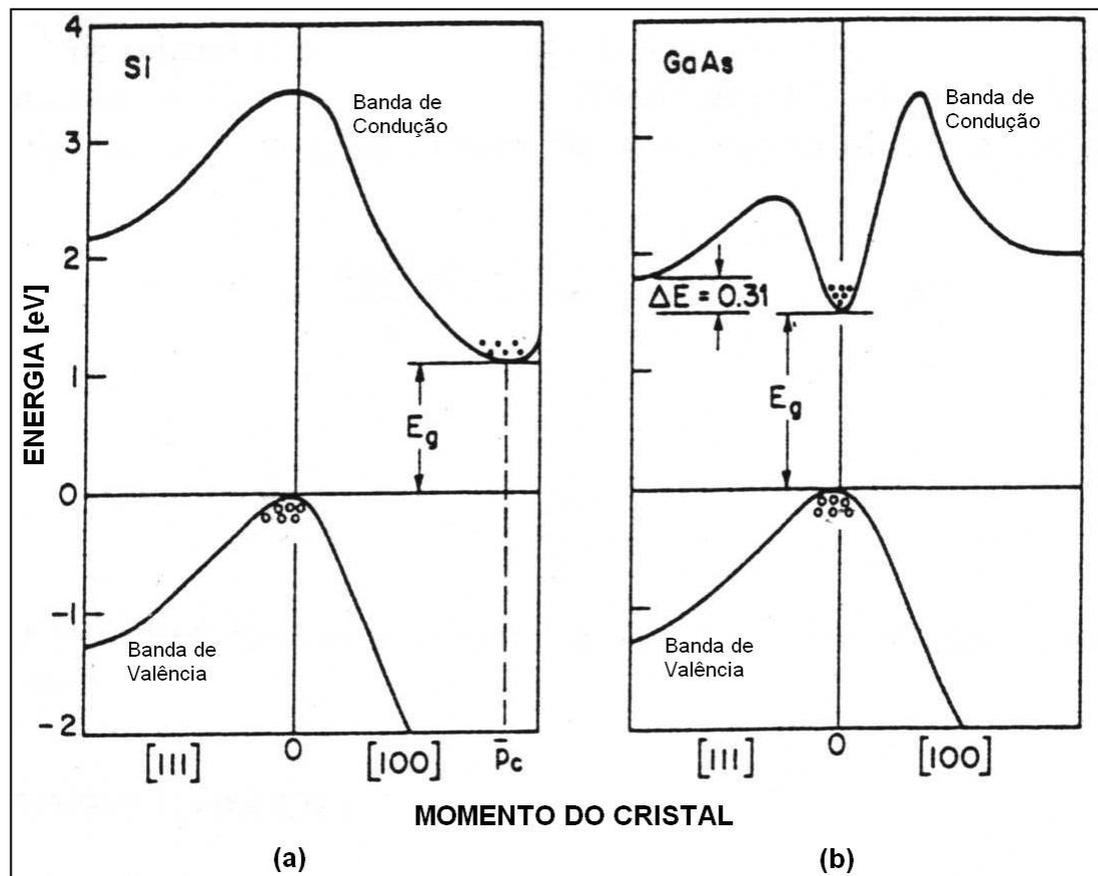


Figura 3.8 - Estruturas de bandas de cristais de Si e GaAs.  $E_g$  representa a largura da zona proibida <sup>[11]</sup>.

### 3.4 - Transições eletrônicas em estruturas de bandas de cristais reais <sup>[11]</sup>

Na escala de energia, o topo da banda de valência é tomado como referência ( $E=0$ ). No silício, o fundo da banda de condução está localizado a 1,12 eV do topo da banda de valência, ou seja, com um valor de zona proibida de energia  $E_g=1,12$ eV. Porém, é necessário observar que o fundo da banda de condução ocorre num vetor de onda  $k \neq 0$ , conforme a figura 3.8(a). Nesse caso, uma transição eletrônica entre o topo da banda de valência e o fundo da banda de condução envolve uma mudança de momentum do portador e, portanto, a participação de fônons. Uma das grandes

desvantagens das transições que envolvem fônons é a alta dissipação de energia sob forma de calor. Semicondutores que apresentam a estrutura de bandas com essa característica são classificados como semicondutores de gap indireto. Então, em semicondutores de gap indireto, é possível ocorrer uma transição através da zona proibida de energia com emissão ou absorção de um fóton desde que acompanhada da emissão ou absorção de um fônon, conforme a figura 3.9(a). Além do silício, há outros semicondutores de gap indireto, a exemplo do germânio, semicondutor muito utilizado na indústria eletrônica, que apresenta uma zona proibida de energia de 0,66eV.

Por outro lado, no GaAs, semicondutor em que o valor da zona proibida de energia é de  $E_g=1,43\text{eV}$ , o fundo da banda de condução e o topo da banda de valência ocorrem para um mesmo valor de  $k = 0$ , conforme a figura 3.8(b). Portanto, não há participação de fônons em uma eventual transição entre as bandas de condução e de valência. Semicondutores que apresentam esta característica em sua estrutura de bandas são classificados como semicondutores de gap direto. Assim, em semicondutores de gap direto, as transições eletrônicas só envolvem fótons, pois não precisam de fônons para efetivar a transição, conforme ilustrado na figura 3.9(b).

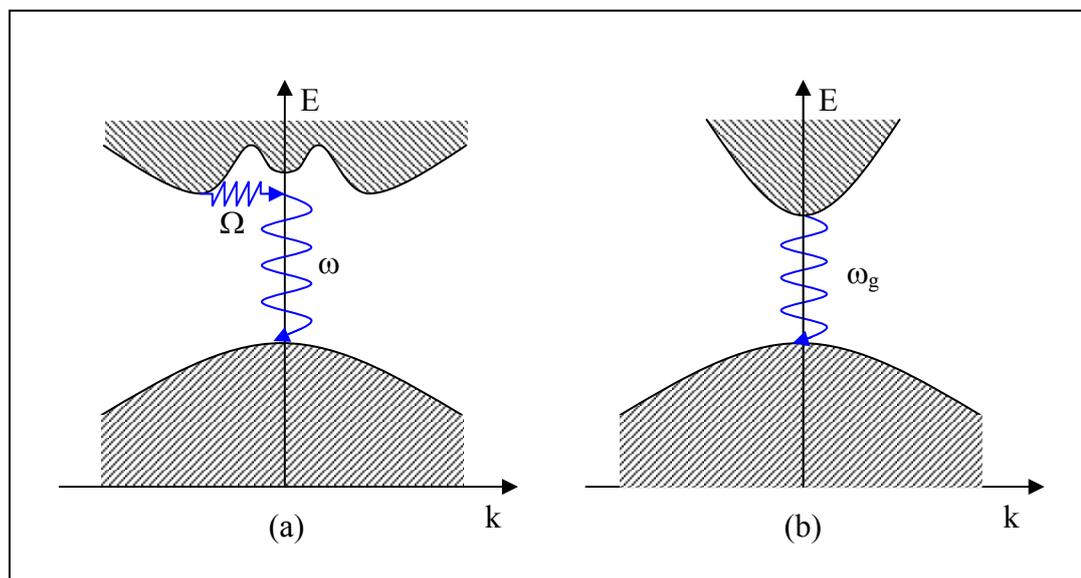


Figura 3.9 - Transições entre banda de valência e banda de condução em (a) um semicondutor de gap indireto e em (b) um semicondutor de gap direto <sup>[11]</sup>.

Os valores citados de largura de zona proibida de energia consideram o semicondutor à temperatura de 300K e, na prática, são dependentes da temperatura em todos os semicondutores. As propriedades de condução em semicondutores são

fortemente afetadas pela quantidade de elétrons na banda de condução e, portanto, pelo valor da largura da zona proibida de energia; porém, não são muito afetadas pelo formato das bandas. As propriedades ópticas, no entanto, têm forte dependência do formato das bandas de energia. Semicondutores de gap direto, como o GaAs, são muito utilizados em dispositivos ópticos. Isto ocorre porque os portadores possuem uma probabilidade de transição muito maior que a de semicondutores de gap indireto, pois as transições só envolvem fótons, resultando também em uma eficiência energética muito superior.

### 3.5 - Massa efetiva de elétrons e buracos considerando estruturas de bandas de cristais reais <sup>[9,11]</sup>

A massa efetiva para elétrons definida na seção 3.3 comumente refere-se a presença de elétrons localizados em torno do fundo da banda de condução. Assim, considera-se que todos os elétrons possuem a mesma massa efetiva obtida por:

$$m_n^* = \frac{\hbar^2}{\left( \frac{\partial^2 E}{\partial k_{me}^2} \right)} \quad (3.14)$$

onde  $k_{me}$  é a posição do mínimo da banda de condução no espaço recíproco. Da mesma maneira, podemos expressar a massa efetiva de lacunas em torno do topo da banda de valência como:

$$m_p^* = -\frac{\hbar^2}{\left( \frac{\partial^2 E}{\partial k_{mv}^2} \right)} \quad (3.15)$$

onde  $k_{mv}$  é a posição do máximo da banda de valência no espaço recíproco. É importante verificar que no topo da banda de valência ( $\partial^2 E / \partial k_{mv}^2$ ) é negativo, pois a curvatura da função  $E(\mathbf{k})$  é voltada para baixo, de forma que a massa efetiva de buracos é positiva. As curvaturas das bandas de condução e de valência não são iguais e, portanto, as massas efetivas de elétrons e de buracos são diferentes. Há também a possibilidade de, em certos cristais, se ter mais de uma banda de valência e/ou de condução. Estas também podem variar de acordo com a direção de  $\mathbf{k}$ , indicando a existência de várias massas efetivas de elétrons e de buracos. Na seção seguinte será visto, pelas figuras 3.11 e 3.12, que tanto o InAs quanto o GaAs possuem duas bandas de valência com  $k = 0$ .

### 3.6 - Características básicas do InAs e do GaAs

Os compostos GaAs e InAs são semicondutores do grupo III-V e possuem a estrutura cristalina zinc blende, a mesma do diamante, como ilustrado na figura 10. A base é formada pelo átomo de um dos elementos na posição 000 e por um átomo de outro elemento na posição  $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ . A estrutura pode ser interpretada como sendo formada por duas redes cúbicas de faces centradas deslocadas na direção da diagonal do cubo em  $\frac{1}{4}$  de seu comprimento, uma contendo átomos de As e outra contendo átomos de In ou Ga, para InAs ou GaAs respectivamente. Os respectivos parâmetros de rede de InAs e GaAs são 6,058Å e 5,653Å.

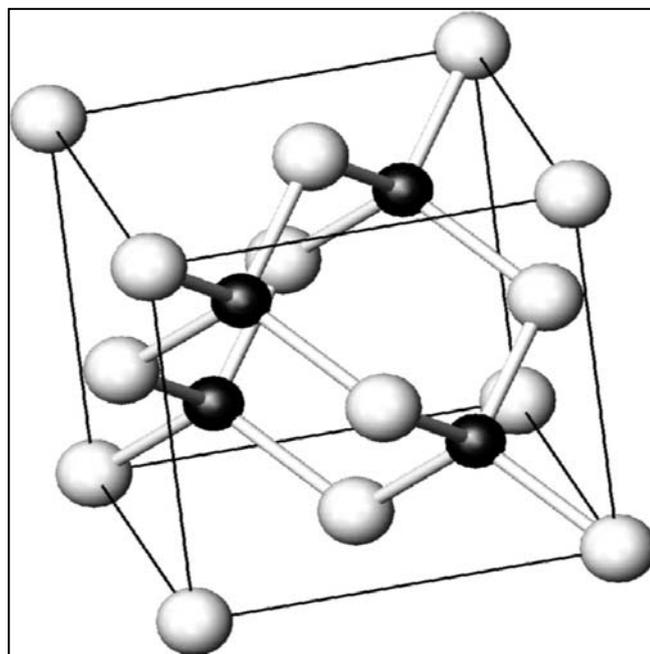


Figura 3.10 - Estrutura das redes cristalinas de GaAs e de InAs.

A estrutura de bandas completa do GaAs <sup>[56]</sup>, determinada experimentalmente é ilustrada na figura 3.11. Dentre as posições circuladas, que representam os pontos com maior probabilidade de transição, pode-se observar que o mínimo da banda de condução e o máximo da banda de valência encontram-se na Primeira Zona de Brillouin e ocorrem para um mesmo valor de vetor de onda, na posição  $\Gamma(000)$ , confirmando o fato do GaAs ser um semicondutor de gap direto.

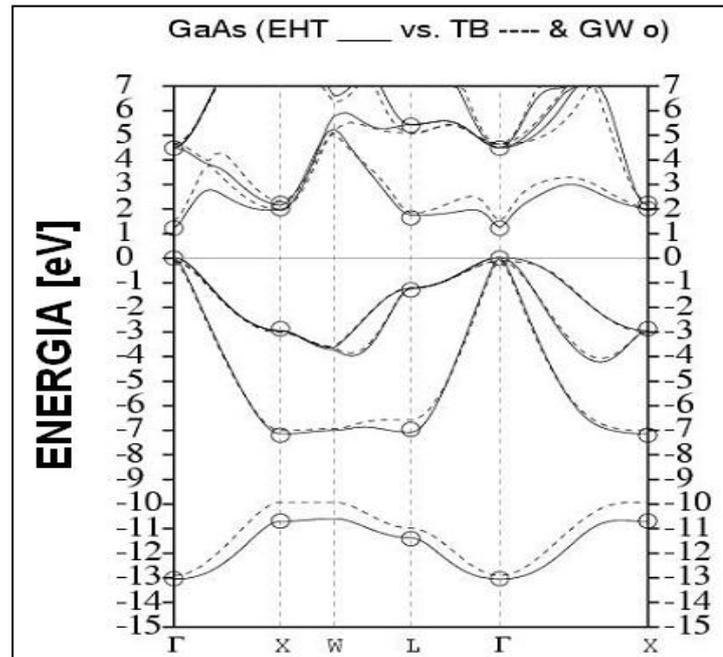


Figura 3.11 – Estrutura de bandas completa para o GaAs.

Conforme mencionado anteriormente, em  $\Gamma(000)$  verificamos duas bandas de valência. Na banda com curvatura mais acentuada, os buracos possuem menor massa efetiva e são chamados de buracos leves, enquanto os da outra banda são chamados de buracos pesados. Verifica-se que o mesmo ocorre para o InAs<sup>[57]</sup> (fig. 3.12), que também é um semiconductor de gap direto, com mínima zona proibida de energia em  $\Gamma(000)$ . As massas efetivas do InAs e do GaAs adotadas neste trabalho são  $0,025m_0$  e  $0,067m_0$ , respectivamente, onde  $m_0 = 9,1 \times 10^{-31} \text{kg}$  é a massa de repouso do elétron.

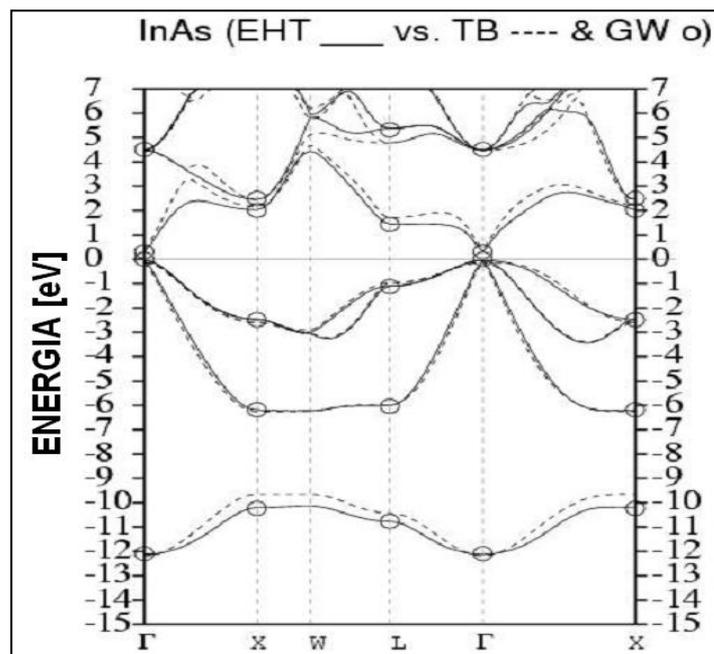


Figura 3.12 – Estrutura de bandas completa do InAs.

Segundo Thurmond <sup>[25]</sup> e D.L. Rode <sup>[26]</sup>, as larguras de zona proibida de energia do InAs e do GaAs para a posição  $\Gamma(000)$  são variáveis com a temperatura e se comportam conforme os modelos abaixo:

$$\begin{array}{c} \text{InAs} \\ E_g = 0,42 - 0,69 \cdot 10^{-4} \cdot T \end{array} \quad (3.16)$$

$$\begin{array}{c} \text{GaAs} \\ E_g = 1,519 - \frac{5,405 \cdot 10^{-4}}{T + 204} T^2 \end{array} \quad (3.17)$$

sendo  $T$  a temperatura fornecida em K e  $E_g$  os valores de largura de zona proibida de energia do material em eV.

Além dos valores de  $E_g$ , neste trabalho é necessário o conhecimento de alguns parâmetros físicos básicos destes dois semicondutores. Todos os parâmetros são fornecidos para a temperatura de 300K <sup>[11, 22, 26, 27, 28, 57]</sup>. Neste caso, considera-se que a variação térmica do experimento não tem influência relevante sobre os valores fornecidos.

#### Para o InAs:

*Afinidade eletrônica*

$$e\chi = 4,9 \text{ eV}$$

*Potencial de deformação acústica*

$$\varepsilon_A = 11,5 \text{ eV}$$

Velocidade de fônons acústicos longitudinais

$$u_l = 5,24 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$$

Velocidade de fônons acústicos transversais

$$u_t = 3,07 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$$

Espessura efetiva do gás bidimensional de elétrons

$$b = 2Z_0 = 1 \text{ ML}$$

onde  $Z_0$  é a distância da interface à função de onda do elétron. No caso de uma superrede, pode-se considerar um poço de potencial quadrado e  $Z_0$  sendo representado pela metade da largura do poço. Assim, o ajuste da equação de cálculo do tempo de relaxação para uma superrede considera que a espessura efetiva do gás bidimensional de elétrons é igual à espessura das camadas de InAs da superrede.

Constante dielétrica estática (à baixa frequência)

$$\varepsilon_s = 14,54$$

Constante dielétrica à alta frequência

$$\varepsilon_\infty = 12,25$$

Temperatura de Debye

$$\theta_{(\text{InAs})} = 337\text{K}$$

Frequência de fônons ópticos longitudinais

$$\omega_l = 4,34 \cdot 10^3 \text{ s}^{-1}$$

### 3.7 – Heteroestruturas de Materiais Semicondutores

As junções de materiais semicondutores mais utilizadas na indústria eletrônica são as homojunções <sup>[3]</sup>. As homojunções caracterizam-se por serem construídas à partir de um mesmo material semicondutor, apresentando eventual diferença apenas nas dopagens dos semicondutores que formam a junção. Dessa forma, não apresentam descontinuidades no diagrama de bandas de energia, pois a largura de zona proibida de energia tem o mesmo valor ambos os lados da junção. Por outro lado, ao crescermos (por MBE, por exemplo) um semicondutor de um determinado material sobre um outro semicondutor intrinsecamente diferente, como as amostras com múltiplas camadas de arseneto de índio (InAs) sobre arseneto de gálio (GaAs) utilizadas neste trabalho, obtemos uma heterojunção. Junções formadas por metais e materiais semicondutores também são heterojunções e são muito utilizadas na fabricação de dispositivos. O comportamento do material numa heterojunção depende fortemente de sua função de trabalho  $W_0 = e\phi_s$  que, nos metais, representa a mínima energia necessária para que um elétron vença as forças de atração internas e seja “arrancado” do material. Nos semicondutores, assim como nos metais, o valor da função de trabalho é obtido pela diferença entre a energia do elétron no vácuo  $E_0$  (longe do material) e o nível de Fermi. Porém, como nos semicondutores não há elétrons no nível de Fermi, a energia necessária para arrancá-los do material é obtida pela diferença entre o nível do vácuo e o fundo da banda de condução, diferença denominada afinidade eletrônica do material <sup>[3]</sup>:

$$E_0 - E_c = e\chi \quad (3.18)$$

A figura 3.13 apresenta um diagrama que ilustra as grandezas citadas anteriormente, para o caso de um semicondutor.

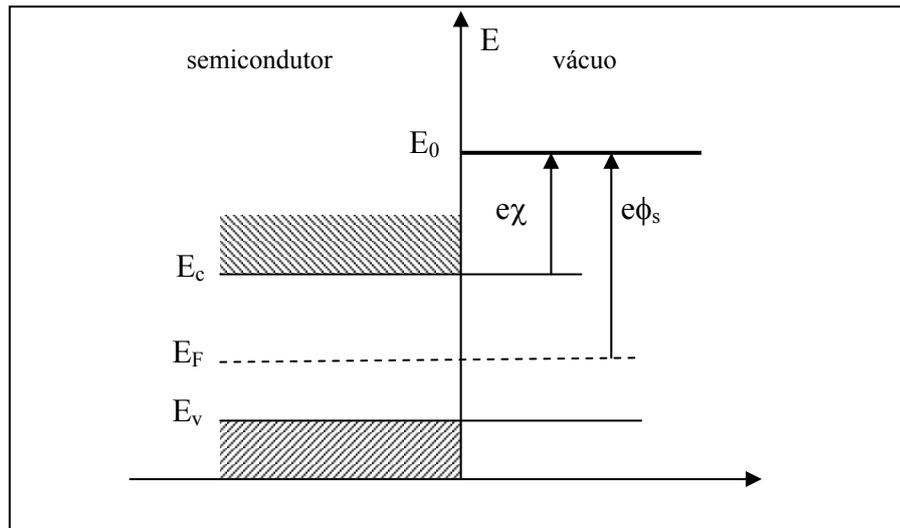


Figura 3.13 – Afinidade eletrônica e função de trabalho para um semicondutor <sup>[3, 11]</sup>.

### 3.7.1 - Heterojunções de semicondutores

Quando dois materiais semicondutores intrinsecamente diferentes são colocados em contato direto, ocorre transferência de carga de um lado para outro da junção devido à diferença entre os potenciais eletroquímicos dos dois materiais. A transferência ocorrerá de forma a igualar os potenciais eletroquímicos, e então o sentido do movimento das cargas dependerá da relação entre as funções de trabalho dos materiais. Dessa forma, ocorrerá uma descontinuidade de energia nas bandas de condução e/ou de valência (normalmente em ambas), devido à diferença entre os valores de zona proibida de energia, de função de trabalho e afinidade eletrônica dos dois lados da junção, resultando em uma estrutura de bandas na interface conforme a ilustrada na figura 3.14.

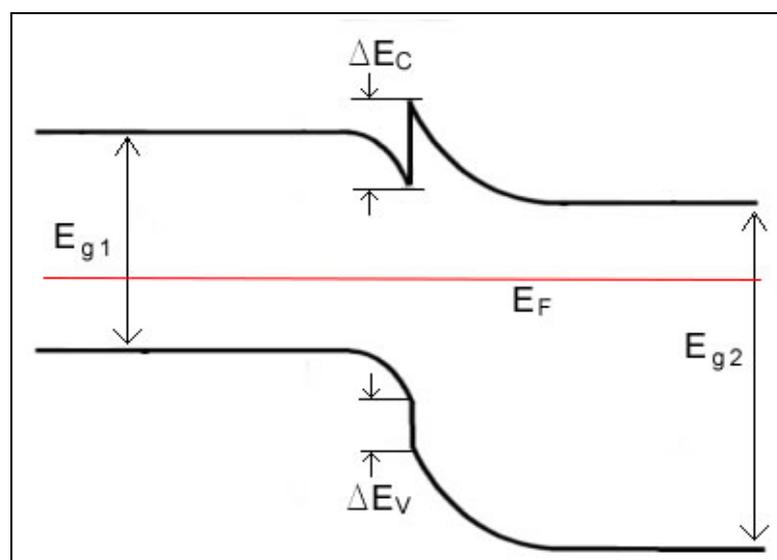


Figura 3.14 - Estrutura de bandas de uma heterojunção na região da interface <sup>[3, 11]</sup>.

As discontinuidades na região de interface entre os dois semicondutores são tais que  $E_{g2} - E_{g1} = \Delta E_c + \Delta E_v$ , onde  $E_{g2}$  e  $E_{g1}$  são as larguras da maior e da menor zona proibida de energia, respectivamente.  $\Delta E_c$  é a discontinuidade entre as bandas de condução e  $\Delta E_v$  é a discontinuidade entre as bandas de valência.

Denominam-se heteroestruturas as estruturas formadas com base em heterojunções. Um exemplo típico de heteroestruturas é o das superredes. Superredes são estruturas caracterizadas pela repetição de várias camadas e, portanto, várias heterojunções entre semicondutores. As amostras utilizadas neste trabalho formam superredes pela repetição de camadas de InAs e GaAs, conforme a figura 3.15.

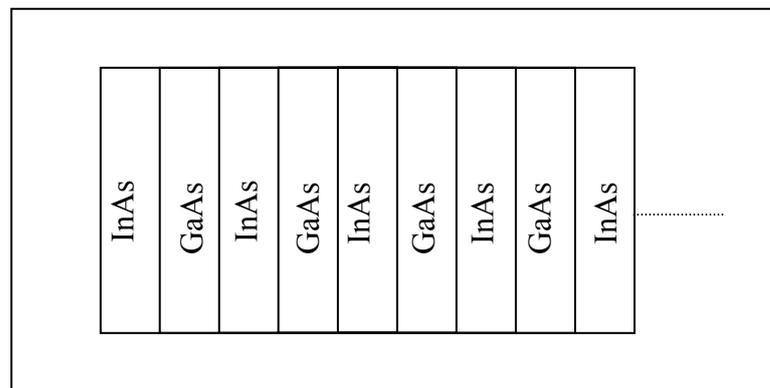


Figura 3.15 – Superrede de InAs e GaAs.

O respectivo perfil das bandas de condução e de valência comporta-se como uma seqüência de repetições da estrutura de bandas de uma heterojunção, ilustrado na figura 3.16. É importante observar que, devido ao potencial mais baixo da banda de condução do InAs, teremos um comportamento dos portadores como um gás bidimensional de elétrons, ou seja, uma estrutura 2D, na qual os portadores têm comportamento livre nos planos de InAs e com o confinamento descrito por um poço de potencial aproximadamente quadrado. As propriedades eletrônicas de portadores confinados dependem de características físicas do poço como largura e profundidade. A profundidade é determinada pela diferença entre as bandas de condução dos dois materiais e a largura pode ser controlada durante o crescimento do material (camadas). Estes conceitos de heterojunções e heteroestruturas são fundamentais na construção de estruturas de baixa dimensionalidade, descritas brevemente na seção seguinte.

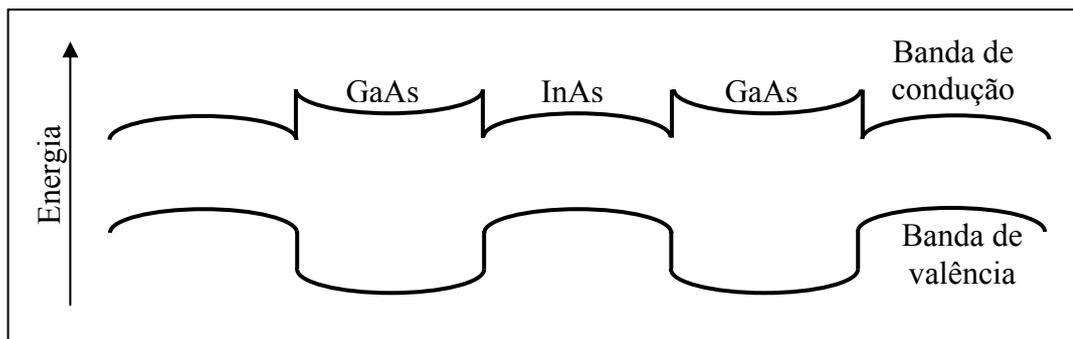


Figura 3.16 – Perfil das bandas de condução e de valência em uma superrede de InAs e GaAs <sup>[3]</sup>.

### 3.8 – Estruturas de baixa dimensionalidade

A nanotecnologia, como o próprio nome informa, ocupa-se do estudo de materiais empregados na fabricação de estruturas com dimensões na faixa de 1 a 100nm. Muitas dessas estruturas pertencem ao grupo conhecido como estruturas de baixa dimensionalidade (2D – 0D) <sup>[1]</sup>. A dimensionalidade refere-se ao número de direções em que os portadores do material podem mover-se livremente. Uma estrutura 3D, por exemplo, é aquela em que os portadores eletrônicos são livres em todas as três direções espaciais. Por outro lado, é possível fabricar estruturas em que os portadores apresentem certo grau de confinamento, por exemplo, através da utilização de heterojunções e da conseqüente formação de poços de potencial como os da figura 3.16. Se o movimento dos portadores em um sólido é limitado a uma região de dimensões da ordem do comprimento de onda de de Broglie (ou do livre caminho médio, se este for menor) serão observados efeitos de quantização. O comprimento de onda de de Broglie depende da massa efetiva do portador  $m^*$  e da temperatura, como segue <sup>[4, 9]</sup>:

$$\lambda_B = \frac{h}{p'} = \frac{h}{\sqrt{3m^*k_B T}} \quad (3.19)$$

Os efeitos de quantização podem ser pronunciados mesmo em estruturas de 10 a 100 vezes maiores que a constante de rede. No sistema InAs/GaAs o potencial típico de confinamento de elétrons é de 0,9eV, que é o valor da descontinuidade entre as bandas de condução. Em um poço quântico desse sistema o comprimento de onda de de Broglie associado é de aproximadamente 8nm, calculado à partir da equação 3.19, e é um valor bastante razoável se comparado à dimensões típicas das estruturas em questão neste trabalho (da ordem de 50 nm), permitindo a observação de pelo menos um nível discreto.

Assim, se for crescida uma heteroestrutura, como aquela da figura 3.15, com camadas finas de espessura comparável a  $\lambda_B$ , o movimento dos portadores estará confinado aos planos do poço e neste poderão ser observados efeitos de quantização. Neste caso cria-se uma estrutura 2D, também conhecida como poço quântico. Aumentando o grau de confinamento espacial para duas dimensões, os portadores poderão se comportar como portadores livres em apenas uma direção, resultando em uma estrutura 1D, conhecida como fio quântico. Finalmente, quando o material é espacialmente confinado com relação às 3 direções espaciais, forma-se uma estrutura 0D chamada de ponto quântico. Essa projeção de estruturas de baixa dimensionalidade, bem como as respectivas densidades de estados eletrônicos relacionadas aos diferentes efeitos de quantização em cada uma dessas estruturas, são ilustradas na figura 3.17.

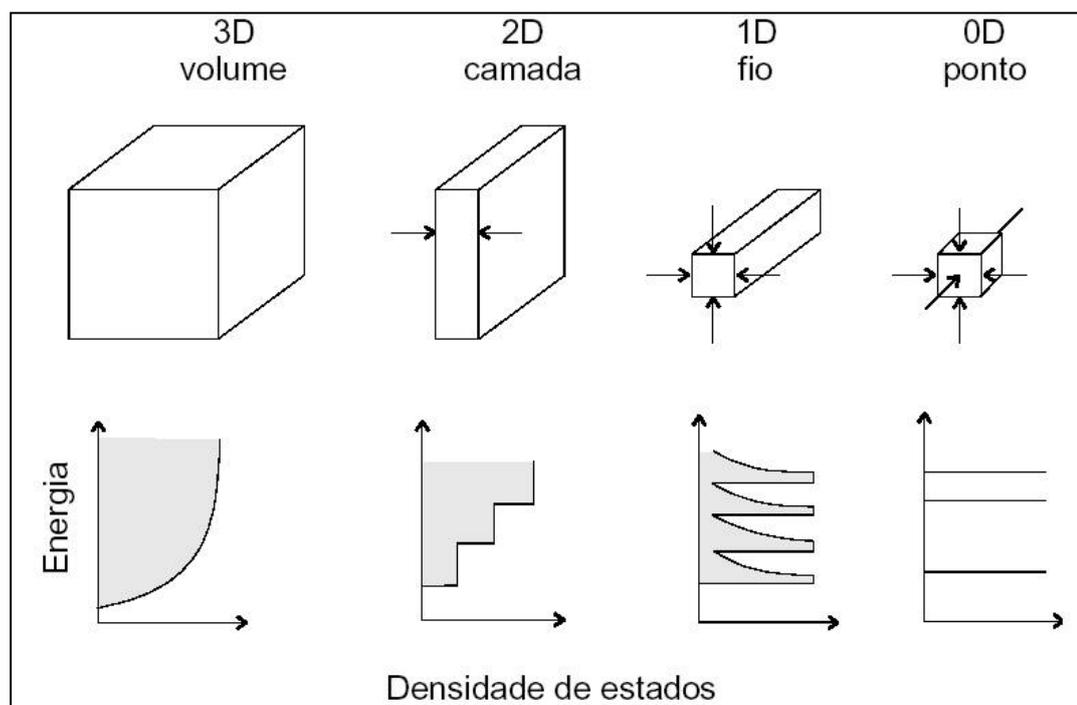


Figura 3.17 - Confinamento e densidade de estados em estruturas de baixa dimensionalidade <sup>[2]</sup>.

### 3.8.1 – Os pontos quânticos

Conforme a descrição feita na seção anterior, pontos quânticos são estruturas zero dimensionais (0D) <sup>[1]</sup>, ou seja, estruturas que apresentam portadores confinados nas três dimensões espaciais devido à atuação de um poço de potencial tridimensional. A palavra ponto indica uma porção muito pequena do espaço a ser ocupada por portadores, mas, apesar disso, os pontos quânticos podem possuir até alguns milhares de átomos reais com elétrons associados. A maior parte dos elétrons

que compõem os pontos quânticos está fortemente ligada aos átomos que formam sua estrutura e apenas alguns podem ser considerados elétrons livres. As características de quantização relacionadas aos elétrons confinados fazem com que os pontos quânticos tenham comportamento semelhante ao de átomos, apresentando níveis discretos conforme exposto na figura 3.17. Assim, muitas vezes os pontos quânticos são tratados como átomos artificiais gigantes. A grande vantagem destes átomos artificiais é que com a possibilidade de controle de suas dimensões pela atuação nos parâmetros de crescimento da estrutura, pode-se controlar a forma do potencial de confinamento e, conseqüentemente, as propriedades dos estados discretos. Em relação aos fenômenos de condução de portadores, os pontos quânticos comportam-se como impurezas do material, pois ocasionam deformações no potencial da rede, porém apresentam dimensões muito maiores que as das impurezas convencionais. A figura 3.18 exibe uma microscopia de força atômica (AFM) de uma amostra que contém pontos quânticos auto-gerados de diferentes tamanhos. Os picos em cor amarela na microscopia representam regiões de maior densidade eletrônica, confirmando a atuação dos pontos quânticos no confinamento de portadores.

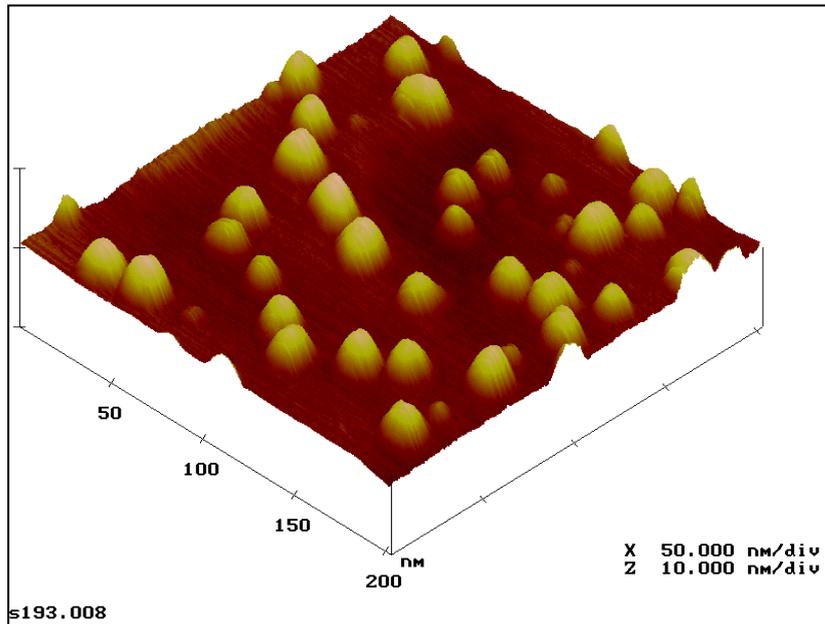


Fig. 3.18 - AFM ilustrando o confinamento de portadores em pontos quânticos auto-gerados.

A compreensão dos fenômenos físicos relacionados a esse tipo de estrutura é importante para a fabricação e otimização de novos dispositivos. Como exemplo, a presença de estados discretos torna os pontos quânticos bons candidatos à fabricação de portas (“*gates*”) quânticas para experimentos de computação quântica.

Apresentam também grande potencialidade para a fabricação de dispositivos ópticos. As pesquisas mais recentes nesta área estão bastante concentradas no modelamento dos níveis eletrônicos e na compreensão da dinâmica dos portadores, que foi o enfoque principal do estudo descrito neste trabalho.

Segundo a forma de construção, há dois tipos básicos de pontos quânticos: Os pontos quânticos artificiais e pontos quânticos autogerados.

- *Pontos quânticos artificiais*: São construídos por meio de recursos de nanotecnologia que permitem formação de estruturas com material semicondutor confinado em uma pequena região da amostra. A figura 3.19 ilustra as características físicas de uma amostra sendo preparada para a formação de pontos quânticos artificiais. Nas regiões com pequenos buracos cilíndricos será depositado o material semicondutor que irá formar o ponto quântico. O principal aspecto deste tipo de construção é a vantajosa uniformidade no tamanho e, conseqüentemente, nas características eletrônicas dos pontos quânticos construídos. Porém, isto ocorre em função de um processo dispendioso, devido à exigência de dimensões da ordem de poucos nanômetros.

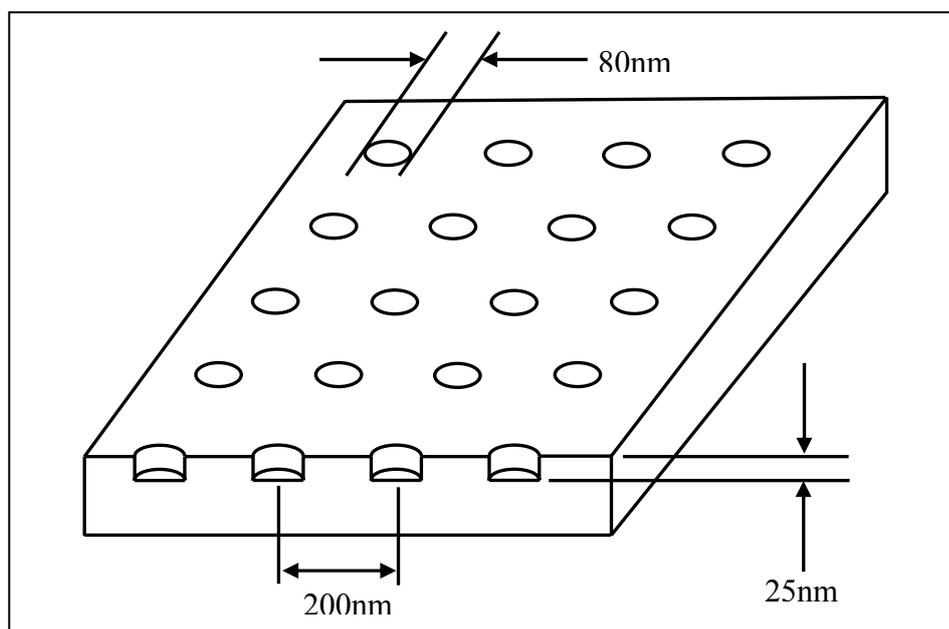


Figura 3.19 - Preparação de amostra para fabricação de pontos quânticos artificiais.

- *Pontos Quânticos auto-gerados*: A forma mais utilizada para fabricação de pontos quânticos é a da auto-geração. Quando uma camada epitaxial (crescida por MBE, por exemplo) tem um parâmetro de rede consideravelmente diferente daquele do substrato, assim como no caso do InAs sobre GaAs, a camada em crescimento é forçada a assumir o mesmo parâmetro de rede do material do substrato. A energia

potencial das ligações químicas da camada epitaxial não é mínima porque o parâmetro de rede não é aquele natural. Dessa forma, surgem tensões mecânicas na região da interface, que aumentam conforme aumenta o número de camadas epitaxiais crescidas, até uma espessura limite em que as camadas epitaxiais não podem mais conter essas tensões. Quando isso acontece, os átomos das camadas recém depositadas tendem a se deslocar e formar aglomerados tridimensionais de formato piramidal. Essas pequenas “ilhas” são os chamados pontos quânticos auto-gerados e, próximo da região da interface, possuem estrutura cristalina com o mesmo parâmetro de rede do substrato variando até seu valor natural (do InAs) no interior do ponto quântico. A figura 3.20 exibe uma espectroscopia eletrônica de transmissão (TEM) de um ponto quântico auto-gerado da amostra BH9833, crescida juntamente com as utilizadas neste trabalho <sup>[5]</sup>.

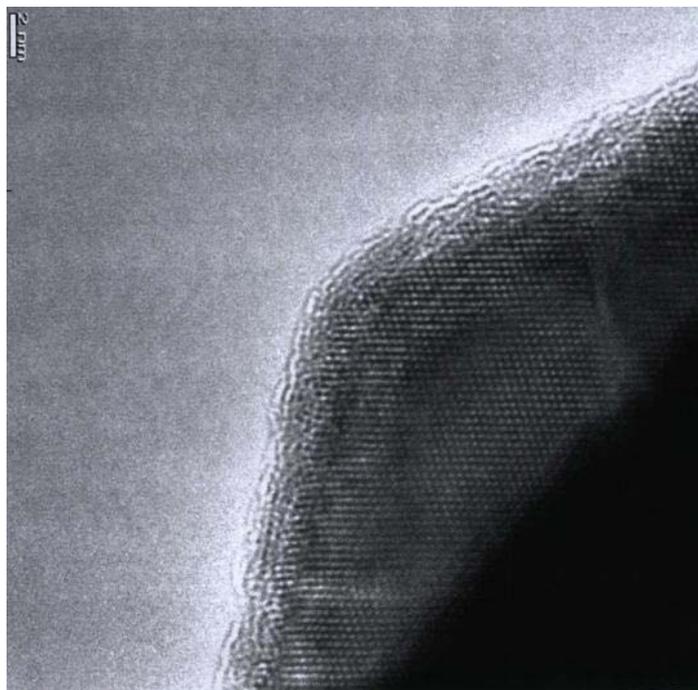


Figura 3.20 - TEM de um ponto quântico contido na amostra BH9833 <sup>[5]</sup>.

O método de crescimento adotado nas amostras deste trabalho é tal que as camadas alternadas de InAs e GaAs da superrede são crescidas sobre outras em que já existem pontos quânticos e, dessa forma, os novos pontos quânticos tendem a se formar na mesma orientação daqueles das camadas anteriores. Este método de crescimento é conhecido como Stranski-Kastranov <sup>[1]</sup> e a estrutura formada por múltiplas camadas de material semiconductor é denominada superrede <sup>[1]</sup>. É importante observar que, para que esse processo ocorra, existe a necessidade do

crescimento de camadas bastante finas, da ordem de poucos átomos, conforme já mencionado anteriormente. Outro aspecto importante é que, com a ocorrência desse alinhamento, os pontos quânticos das camadas superiores tendem a ser maiores e, conseqüentemente, as deformações na rede e no seu potencial se estendem por uma região maior, porém essas deformações são menos abruptas. A figura 3.21 exibe um corte vertical de uma superrede, onde o material de cor mais escura forma pontos quânticos alinhados, como os de InAs nas superredes de GaAs/InAs/GaAs.

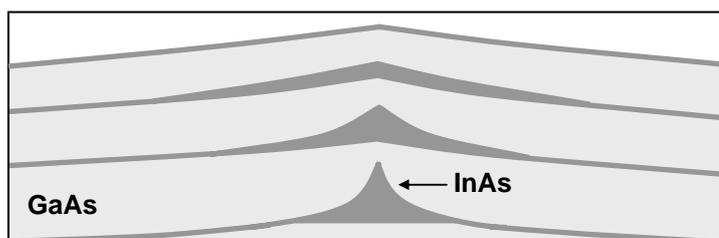


Figura 3.21 – Superrede com pontos quânticos de InAs verticalmente alinhados.

Assim, nas camadas inferiores dessas superredes, os portadores são submetidos a perturbações mais curtas e mais intensas. A figura 3.22 mostra uma outra espectroscopia eletrônica de transmissão da amostra BH9833, onde podem ser visualizadas claramente as várias camadas do “empilhamento” da superrede. As camadas escuras e mais finas são formadas por InAs, enquanto as demais, de cor cinza, são as de GaAs. É importante observar a presença de pontos quânticos auto gerados, identificados na figura como sendo os pequenos aglomerados de InAs (regiões mais escuras), e a tendência de alinhamento vertical desse pontos quânticos.

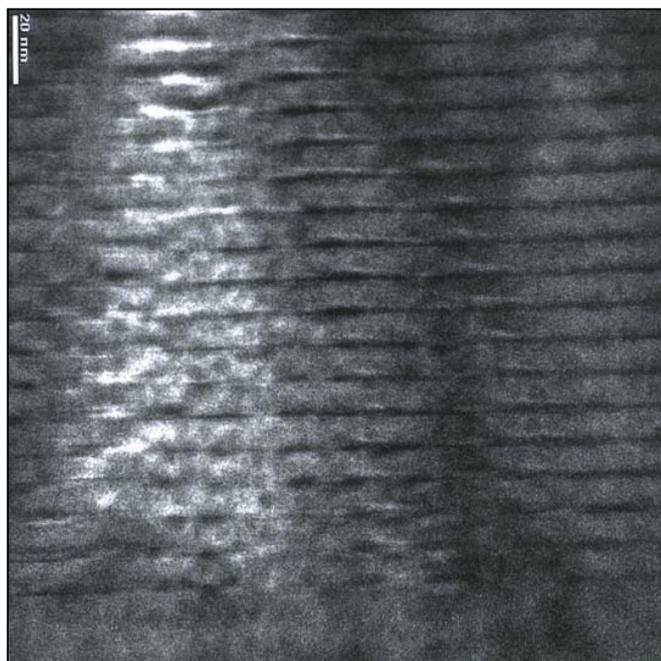


Figura 3.22 - TEM de uma das amostras com superredes de InAs/GaAs [5].

## Capítulo 4 - Mecanismos de espalhamento de portadores em heteroestruturas de InAs/GaAs

No estudo das propriedades de transporte de portadores em materiais semicondutores devemos considerar que, na prática, os dispositivos fabricados com estes materiais são normalmente utilizados fora das condições de equilíbrio, como por exemplo, com a passagem de uma corrente elétrica ou recebendo potência luminosa, energia térmica, etc. Quando expostos a um estímulo externo, mesmo sob certas condições de equilíbrio térmico, os portadores de um semicondutor podem exercer determinados comportamentos dinâmicos. Estes comportamentos são o movimento de deriva, difusão, geração e recombinação, emissão termiônica, tunelamento e avalanche. O estudo das propriedades de transporte de portadores realizado neste trabalho dá atenção especial ao movimento de deriva, fenômeno de grande importância na compreensão dos mecanismos de espalhamento de portadores em materiais semicondutores.

### 4.1 - Movimento de Deriva <sup>[11]</sup>

O tratamento matemático adequado para este fenômeno envolve a combinação de resultados clássicos com conceitos quânticos, de forma similar àquela da seção 3.3. Ao aplicar um campo elétrico externo no material cristalino, os elétrons sofrem os efeitos desse estímulo superposto ao potencial periódico da rede. Este último resulta na massa efetiva discutida na seção 3.3 e, através das equações 3.11 e 3.12, a aceleração do elétron é obtida por:

$$\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}_g}{dt} = \frac{-e}{m^*} \boldsymbol{\varepsilon} \quad (4.1)$$

Esta relação mostra que num cristal perfeito, sob a ação de um campo elétrico externo constante  $\boldsymbol{\varepsilon}$ , os portadores são submetidos a uma aceleração constante  $\mathbf{a}$  e, conseqüentemente, sua velocidade de grupo aumenta à uma taxa constante, tal que  $\mathbf{v}_g = \mathbf{a} * t$ . É necessário observar também que, mesmo na ausência de campo elétrico, os portadores podem ter uma velocidade constante e não-nula, pois no estado estacionário, os portadores livres são descritos por ondas planas como a da equação 3.5. Porém, além da exigência de ausência de campo externo, o estado estacionário só aconteceria em um cristal perfeito à 0K. Em cristais reais, as perturbações no potencial periódico devido à presença de impurezas e outros defeitos ou ainda,

devido à agitação térmica dos íons que compõem o cristal, fazem com que os portadores permaneçam no estado estacionário apenas durante certo intervalo de tempo e então sofram colisões que produzem seu espalhamento, dando início a outro estado estacionário. Estes processos são similares aos de colisões entre partículas. O movimento dos portadores devido à agitação térmica pode ser considerado aleatório de forma que, num período relativamente longo e com ausência de campo elétrico aplicado, o movimento dos portadores apresenta velocidade média nula em função da sucessão de eventos de espalhamento. Esta situação é ilustrada na figura 4.1(a).

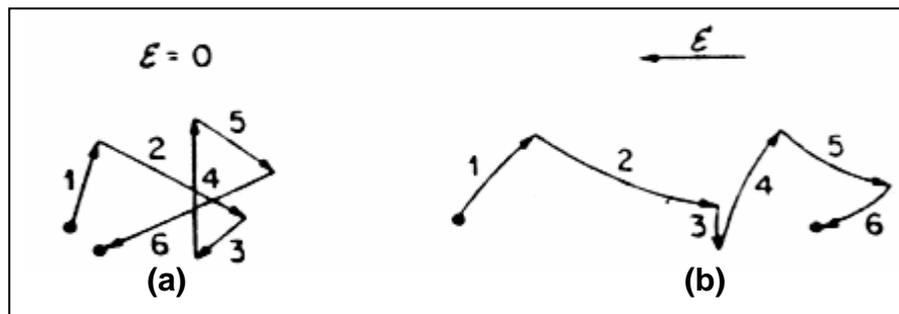


Figura 4.1 - Caminho de um elétron em um semicondutor. (a) Movimento térmico; (b) Movimento combinado devido ao movimento térmico e o campo elétrico aplicado. <sup>[11]</sup>

Deriva é o movimento dos portadores sob a ação de um campo elétrico  $\mathcal{E}$  aplicado no material semicondutor. Conforme a teoria do eletromagnetismo, os portadores livres sofrerão a ação de uma força de módulo  $|\mathbf{F}| = |e\mathcal{E}|$ , respondendo de forma a neutralizar o campo externo. Os portadores livres de carga positiva (buracos) movimentam-se no mesmo sentido do campo e os portadores de carga negativa (elétrons) movimentam-se no sentido contrário. Assim, uma velocidade adicional, denominada *velocidade de deriva*,  $v_d$ , é imposta ao movimento dos portadores. A figura 4.1(b) representa a combinação da velocidade da velocidade térmica com a velocidade de deriva, proveniente da aplicação de um campo externo.

#### 4.1.1 – Mobilidade <sup>[9]</sup>

Consideremos a situação de um elétron na banda de condução com velocidade considerada inicialmente nula e sujeito a um campo elétrico  $\mathcal{E}$ . Nessa análise, admite-se a massa efetiva desse elétron como sendo isotrópica e escolhe-se um eixo de referência  $z$  paralelo à  $\mathcal{E}$ . De acordo com a segunda lei de Newton para esse cristal, o elétron move-se na direção  $\hat{z}$ , no sentido oposto ao campo e com movimento uniformemente acelerado durante o tempo  $t_1$ , quando ocorre um evento

de espalhamento. Admite-se também que, após a colisão, a velocidade é (em média) outra vez igual à zero. Durante um certo tempo  $t_2$  após o primeiro espalhamento, o movimento é novamente uniformemente acelerado e no instante  $t_1+t_2$  ocorre um segundo evento de espalhamento. Este ciclo se repete para cada intervalo de tempo aleatório  $t_i$ , conforme representado na figura 4.2. No caso de lacunas, o tratamento é similar, porém a velocidade do portador tem o mesmo sentido do campo elétrico.

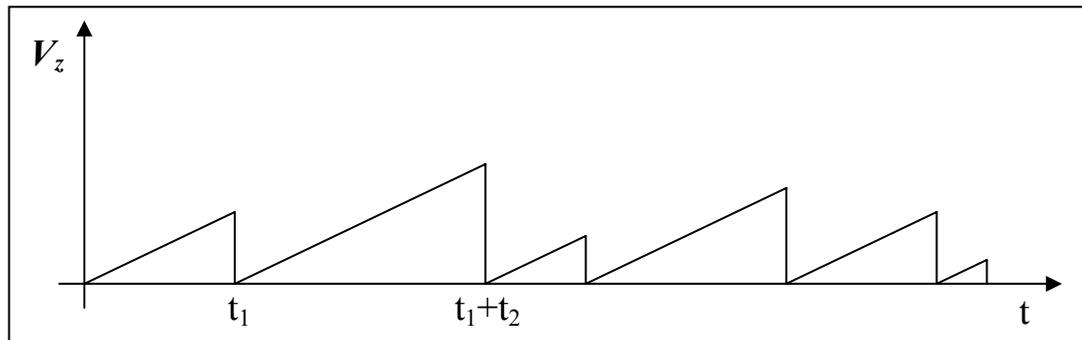


Figura 4.2 - Ação de deriva em um cristal sujeito a eventos de espalhamento <sup>[21]</sup>.

Considera-se que após cada espalhamento a velocidade é novamente nula, então todo o momento ganho através do campo é perdido para a rede. Dessa forma, considerando o movimento do portador durante um tempo suficientemente longo, ou um conjunto com muitos portadores, pode-se escrever:

$$\vec{v}_d m^* = \hbar \mathbf{k} = \pm e \tau_c \boldsymbol{\varepsilon} \quad (4.2)$$

onde  $m^*$  é a massa efetiva do portador e  $\tau_c$  é o *tempo livre médio*, grandeza que informa o tempo médio entre a ocorrência de colisões. Então, a velocidade de deriva é fornecida por:

$$\vec{v}_d = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*} = \pm \left( \frac{e \tau_c}{m^*} \right) \boldsymbol{\varepsilon} = \pm \boldsymbol{\mu} \boldsymbol{\varepsilon} \quad (4.3)$$

O termo entre parênteses, denominado *mobilidade elétrica*, é uma grandeza que quantifica a capacidade dos portadores de carga do material em responder a uma excitação proveniente de um campo elétrico. A mobilidade é de essencial importância no estudo das propriedades de transporte em materiais semicondutores e, por esse motivo, foi o foco principal da pesquisa registrada nesse trabalho. Na equação 4.3 a velocidade de deriva será positiva quando os portadores de carga forem lacunas, e negativa quando forem elétrons. Portanto, o emprego de um sinal negativo na equação 4.3 considera portadores de carga negativa, elétrons, cuja mobilidade é representada por  $\mu_n$ . No caso de lacunas a expressão é similar, porém

com exclusão do sinal negativo e emprego de uma mobilidade  $\mu_p$  para portadores de carga positiva, conforme segue:

$$\mu_n = \frac{e\tau_c}{m_n^*} \quad (4.4) \quad \mu_p = \frac{e\tau_c}{m_p^*} \quad (4.5)$$

A mobilidade dos elétrons é sempre superior a dos buracos, e ambas apresentam forte dependência da temperatura e da concentração impurezas e outros defeitos no material, que constituem obstáculos ao movimento dos portadores, perturbando o potencial periódico da estrutura cristalina.

#### 4.1.2 - Condutividade e resistividade <sup>[9, 11]</sup>

Na prática, a mobilidade não pode ser obtida diretamente na caracterização elétrica, mas como função de outros parâmetros elétricos importantes para o material. Condutividade e resistividade são grandezas elétricas inerentes ao material, facilmente obtidas por meio de técnicas simples de caracterização elétrica e quantificam sua capacidade de transportar cargas elétricas. Com a aplicação de um campo elétrico  $\mathcal{E}$  num semicondutor as densidades de corrente de elétrons  $J_n$  e de buracos  $J_p$  que fluem no semicondutor são, respectivamente, dadas por:

$$J_n = -env_n = en\mu_n\mathcal{E} \quad (4.6) \quad J_p = epv_p = ep\mu_p\mathcal{E} \quad (4.7)$$

Desse modo, a densidade de corrente total no material semicondutor é:

$$J = J_n + J_p = (en\mu_n + ep\mu_p)\mathcal{E} \quad (4.8)$$

onde  $n$  e  $p$  são as concentrações de elétrons e lacunas, respectivamente. O termo entre parênteses na equação 4.8 é denominado *condutividade elétrica*  $\sigma$ , então:

$$\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p) \quad (4.9)$$

A resistividade neste material semicondutor é definida como:

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{e(\mu_n n + \mu_p p)} \quad (4.10)$$

## 4.2 – Experimento Hall na caracterização de materiais semicondutores

O experimento escolhido para realização do registro das características elétricas citadas anteriormente foi o de efeito Hall utilizando o método de van der Pauw, de forma a simplificar o experimento pela utilização de amostras com geometria arbitrária. Os conceitos envolvidos nessa técnica são apresentados por DC Look <sup>[10]</sup>. Registra-se aqui uma breve descrição dos procedimentos e expressões

adotadas na obtenção dos parâmetros elétricos citados anteriormente. A caracterização pode ser separada em duas fases:

Na primeira, realizada sem campo magnético, o experimento fornece a resistividade Hall. Utilizando uma fonte de corrente, faz-se passar uma corrente elétrica através de 2 pontos adjacentes da amostra e mede-se a diferença de potencial através dos outros 2, conforme a figura 4.3(a). Este procedimento é repetido, alternando-se a posição dos eletrodos em relação aos pontos de caracterização e a polaridade da corrente, completando 8 medidas.

Na segunda fase, em que se faz necessário aplicar um campo magnético à amostra, o procedimento é similar, porém com os eletrodos dos equipamentos posicionados de forma alternada, conforme a figura 4.3(b). Na realização do experimento, muda-se a posição dos eletrodos, a polaridade da corrente e a polaridade do campo magnético, totalizando 8 medidas. Este procedimento fornece o Fator Hall que, combinado à resistividade Hall, permite calcular as demais grandezas físicas relacionadas a esta caracterização: Tensão Hall, mobilidade e concentração de portadores.

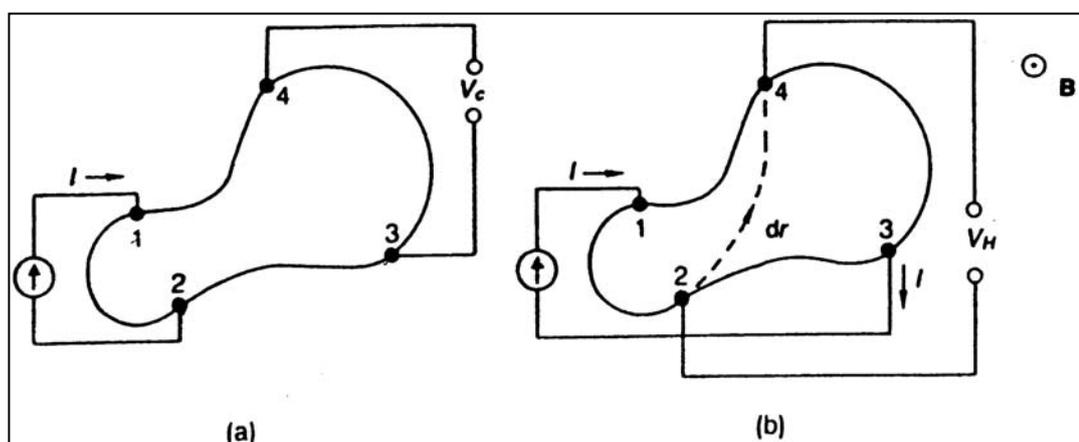


Figura 4.3 - Amostra de formato arbitrário para medidas de efeito Hall pelo método de van der Pauw.

(a) resistividade; (b) fator Hall <sup>[10]</sup>.

#### 4.2.1 - Características básicas do experimento Hall <sup>[10]</sup>

Na determinação (cálculo) das características de transporte de portadores utiliza-se a seguinte notação:  $R_{ij,kl} = V_{kl}/I_{ij}$ , onde  $V_{kl}$  representa a tensão medida pelo multímetro com entrada positiva ligada ao contato k da amostra e entrada negativa ligada ao contato l, e  $I_{ij}$  a corrente aplicada com saída positiva ligada ao contato i e

negativa ligada ao contato  $j$ . Os índices  $i, j, k$  e  $l$  representam os contatos 1, 2, 3 e 4 da amostra. Assim, pode-se calcular a resistividade Hall por:

$$\rho = \frac{\pi \cdot d}{\ln 2} \frac{1}{8} \left[ (R_{21,34} + R_{12,34} + R_{32,41} + R_{23,41}) f_A + (R_{43,12} + R_{34,12} + R_{14,23} + R_{41,23}) f_B \right] \quad (4.11)$$

onde os fatores  $f_A$  e  $f_B$  são correções a erros originados da geometria da amostra e podem ser determinados pela resolução equação transcendental a seguir:

$$\frac{Q-1}{Q+1} = \frac{f}{\ln 2} \arccos h \left\{ \frac{1}{2} \exp \left[ \frac{\ln 2}{f} \right] \right\} \quad (4.12)$$

Um procedimento analítico para a solução da equação 4.12 envolve uma resolução numérica do sistema abaixo:

$$f = \frac{\ln \left( \frac{1}{4} \right)}{\ln \left( \frac{1}{2} + \alpha \right) + \ln \left( \frac{1}{2} - \alpha \right)} \quad (4.13)$$

onde  $\alpha$  pode ser determinado por:

$$Q = \frac{\ln \left( \frac{1}{2} - \alpha \right)}{\ln \left( \frac{1}{2} + \alpha \right)} \quad (4.14)$$

$$\text{sendo: } Q_A = \frac{R_{21,34} + R_{12,34}}{R_{32,41} + R_{23,41}} \quad (4.15) \quad \text{e} \quad Q_B = \frac{R_{43,12} + R_{34,12}}{R_{14,23} + R_{41,23}} \quad (4.16)$$

Os fatores  $Q_A$  e  $Q_B$ , aplicados na equação 4.14, fornecerão os respectivos fatores  $f_A$  e  $f_B$ .

Para obtenção das demais características de transporte, provenientes dos dados da segunda fase da caracterização Hall, deve-se realizar os cálculos das grandezas a seguir:

Fator Hall:

$$R_H = \frac{d}{B} \frac{1}{8} \left[ R_{31,42} (+B) - R_{13,42} (+B) + R_{42,13} (+B) - R_{24,13} (+B) \right. \\ \left. + R_{13,42} (-B) - R_{31,42} (-B) + R_{24,13} (-B) - R_{42,13} (-B) \right] \quad (4.17)$$

Tensão Hall:

$$V_H = \frac{R_H \cdot i \cdot B}{d} \quad (4.18)$$

Mobilidade dos portadores:

$$\mu = \frac{R_H}{\rho} \quad (4.19)$$

Concentração de Portadores:

$$n = \frac{1}{R_H \cdot e} \quad (4.20)$$

### 4.3 - Mecanismos de espalhamento em materiais semicondutores

A maioria dos trabalhos que tratam de fenômenos de espalhamento de portadores em materiais semicondutores propõe modelos que visam explicar, para cada tipo de amostra, a dependência da mobilidade Hall em função da temperatura. A quantidade significativa de modelos deve-se, em geral, à grande variedade de estruturas e às diferentes condições de crescimento de amostras. Dessa forma, a variação nas concentrações dos defeitos das redes cristalinas levaria a uma susceptibilidade maior ou menor a cada um dos mecanismos de espalhamento, explicando os diferentes comportamentos da mobilidade Hall com relação à temperatura. Nota-se que, na maioria dos casos, a mobilidade apresenta valores menores que os previstos pelos modelos de forma independente e com dependência da temperatura diferente daquelas propostas. Isto sugere a presença de mecanismos de espalhamento atuando de forma combinada. A abordagem realizada aqui consiste em verificar a validade dos modelos existentes na descrição do comportamento da mobilidade Hall para superredes de InAs/GaAs contendo pontos quânticos de InAs.

#### 4.3.1 – Aproximação do tempo de relaxação

Pelas equações 4.4 e 4.5 verifica-se que a mobilidade é diretamente proporcional ao *tempo livre médio*  $\tau_c$  <sup>[11]</sup>, que representa, na média, a influência dos diferentes espalhamentos sofridos pelos portadores de carga no material semiconductor. Portanto, para examinar os processos de transporte de portadores de carga e, conseqüentemente, de energia elétrica em amostras semiconductoras, pode-se utilizar a aproximação do tempo de relaxação. Nesta aproximação, supõe-se que

pode ser definido, para cada um dos diferentes processos de espalhamento, um tempo de relaxação de momentum,  $\tau_m$ , tal que:

$$\tau_m = \tau_o . x^r \quad (4.21)$$

onde  $x$  é a energia cinética do elétron em unidades de  $k_B T$ ,

$$x = \frac{E - E_c}{k_B T} \quad (4.22)$$

$\tau_o$  e o expoente  $r$  são independentes da energia. As expressões acima são válidas apenas se considerado o caso de espalhamento em bandas parabólicas.

### 4.3.2 - Potenciais de espalhamento

O cálculo dos tempos de relaxação e, conseqüentemente, das mobilidades limitadas pelos diversos mecanismos de espalhamento leva em consideração as perturbações ocorridas no potencial periódico da rede cristalina, em função da presença de impurezas ou outros defeitos. Portanto, os mecanismos de espalhamento podem ser descritos através de perturbações de potencial  $\Delta U(\mathbf{r})$ . Dentre outras causas de espalhamento em materiais semicondutores, pode-se destacar:

#### 4.3.2.1 - Impurezas ionizadas <sup>[12,19]</sup>

Uma das principais fontes de espalhamento em semicondutores é a ação das impurezas ionizadas. O espalhamento por impurezas ionizadas é caracterizado por uma interação elétrica entre a carga da impureza e a carga do portador livre. Para um íon com carga  $Ze$ , a perturbação no potencial de um cristal perfeito é simplesmente a energia coulombiana dada por:

$$\Delta U(\mathbf{r}) = \frac{\pm Ze^2}{4\pi\epsilon_S r^2} \quad (4.23)$$

onde  $r$  é a distância entre o íon e o portador de carga e  $\epsilon_S$  é a permissividade estática do material. Usa-se o sinal positivo quando o íon e o portador de carga têm a mesma polaridade e o sinal negativo quando têm polaridades opostas. A trajetória dos portadores de carga quando espalhados por uma impureza ionizada são hiperbólicas, com o íon localizado no ponto focal, conforme a figura 4.4.

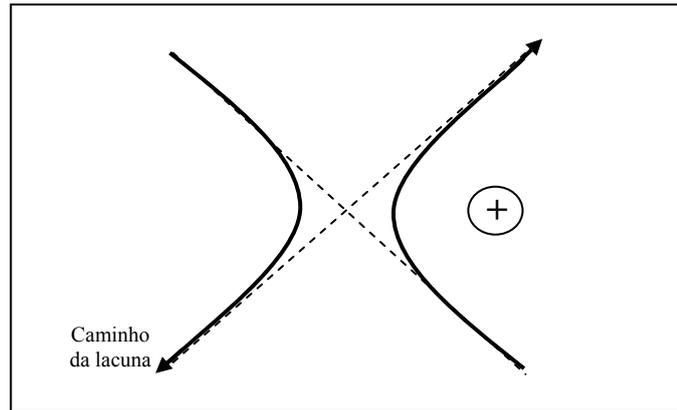


Figura 4.4 - Trajetória de elétrons e lacunas no espalhamento por impurezas ionizadas.

#### 4.3.2.2 - Impurezas neutras <sup>[19]</sup>

O potencial de espalhamento para uma impureza neutra, ou seja, não ionizada, é muito baixo se comparado ao das impurezas ionizadas, porém mais complexo. Análises empíricas de espalhamento por átomos de hidrogênio indicam que o espalhamento por impurezas neutras pode ser representado por uma *seção de choque de espalhamento diferencial*.

$$\sigma_x = \frac{20r_B}{k_B} \quad (4.24)$$

onde  $r_B$  é o raio de Bohr da impureza no estado fundamental.

Conforme será visto adiante, essa seção de choque é aproximadamente equivalente a um potencial de espalhamento:

$$\Delta U(r) = \frac{\hbar^2}{m^*} \left( \frac{r_B}{r^5} \right)^{1/2} \quad (4.25)$$

#### 4.3.2.3 - Fônons acústicos <sup>[16,19]</sup>

Os fônons de modo acústico em um cristal podem espalhar portadores por dois diferentes processos:

##### a) Espalhamento acústico por deformação de potencial

A distância entre átomos e, conseqüentemente, o tamanho da célula unitária são fortemente afetados pelos fônons acústicos longitudinais e pouco afetados pelos fônons acústicos transversais. Os fônons acústicos longitudinais produzem uma modulação nas regiões extremas das bandas de condução e de valência que causa perturbações no potencial periódico da rede, produzindo o denominado espalhamento

acústico por deformação de potencial. As máximas deformações produzidas por fônons acústicos longitudinais na célula unitária, ocorrem nas regiões em que o gradiente da amplitude de deslocamento dos átomos é máximo e onde, portanto, a tensão é máxima. Assim, o potencial de espalhamento associado à componente longitudinal dos fônons acústicos é proporcional à tensão e estimado por:

$$\Delta U = \varepsilon_A \nabla \mathbf{u} \quad (4.26)$$

onde o potencial de deformação,  $\varepsilon_A$ , em unidades de energia, é uma constante de proporcionalidade entre o potencial de espalhamento e a tensão.

### **b) Espalhamento piezoelétrico**

Em alguns semicondutores com 2 ou mais átomos por célula unitária, a atuação dos fônons não provoca inversão da simetria do cristal. Nestes cristais a tensão, causada predominantemente por fônons acústicos longitudinais, polariza os íons e produz campos elétricos internos. O espalhamento associado a estes campos elétricos é denominado espalhamento piezoelétrico. Seu potencial de espalhamento em termos do deslocamento e da tensão é, respectivamente:

$$\Delta U = \frac{-qe_{pz}}{\varepsilon_s} \mathbf{u} = \frac{iqe_{pz}}{\varepsilon_s q_s} \nabla \mathbf{u} \quad (4.27)$$

onde a constante piezoelétrica,  $e_{pz}$ , é fornecida em  $\text{C/m}^2$ ,  $\varepsilon_s$  é a permissividade estática relativa do material semicondutor e  $q_s$  é o vetor de onda do fônon acústico.

#### **4.3.2.4 - Fônons ópticos** <sup>[13, 19]</sup>

Os fônons ópticos também apresentam dois processos de espalhamento independentes:

### **a) Espalhamento óptico por deformação de potencial**

Similar ao espalhamento por deformação de potencial acústico. As expansões e contrações da célula unitária são, em grande parte, provenientes da atuação dos fônons ópticos longitudinais. A principal diferença deste tipo de espalhamento com relação ao acústico é que, na vibração, os átomos da célula unitária se movimentam uns contra os outros. Por isso, é necessário considerar o deslocamento relativo entre átomos no interior da célula unitária. Então, o potencial de espalhamento devido à

modulação dos extremos das bandas de condução e de valência deve ser proporcional ao deslocamento relativo.

$$\Delta U = D\delta\mathbf{u} \quad (4.28)$$

$$\delta\mathbf{u} = \mathbf{a}\delta u = \mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2 \quad (4.29)$$

onde  $\delta\mathbf{u}$  é o vetor de deslocamento relativo,  $\mathbf{a}$  é a direção do deslocamento e  $D$  é o potencial de deformação constante em unidades de energia por unidade de comprimento.

### b) Espalhamento por fônons ópticos polares

O espalhamento por fônons ópticos polares deve-se ao campo elétrico causado pela polarização dos íons da célula unitária, principalmente pela componente longitudinal. O potencial de espalhamento é dependente do deslocamento relativo entre íons na célula unitária, como segue:

$$\Delta U = \frac{iqe^*}{\Theta \varepsilon_\infty q_s} \delta\mathbf{u} \quad (4.30)$$

onde  $e^*$  é a carga iônica efetiva,  $\Theta$  é o volume célula unitária e  $\varepsilon_\infty$  é a constante dielétrica à alta frequência.

### 4.3.3 – Estados degenerados e não-degenerados <sup>[19]</sup>

#### 4.3.3.1 - Estatística de estados degenerados

Em temperaturas maiores que 0K os semicondutores degenerados têm seu potencial eletroquímico próximo ao fundo da banda de condução, logo abaixo do nível doador (tipo n), ou próximo da banda de valência, logo acima do nível aceitador (tipo p). Para estes semicondutores, a aproximação clássica de Maxwell-Boltzmann não é válida e a estatística de Fermi-Dirac é requerida <sup>[19]</sup>.

#### 4.3.3.2 - Estatística de estados não-degenerados

Em semicondutores não-degenerados, o potencial eletroquímico está um pouco afastado dos extremos das bandas de condução e de valência. Esta consideração pode ser expressa através da seguinte regra:

$$E_F > E_v + 4k_B T \quad (4.31) \quad \text{ou} \quad E_F < E_c - 4k_B T \quad (4.32)$$

Assim, por exemplo, os elétrons da banda de condução têm probabilidade de ocupação muito menor que 1 e, nestes casos, a estatística de Maxwell-Boltzmann pode ser utilizada na descrição destes estados.

#### 4.3.4 – Cálculo dos tempos de relaxação de momentum <sup>[19]</sup>

Neste trabalho, o caminho para o cálculo dos tempos de relaxação com base nos potenciais de espalhamento considera que se tem um grupo de semicondutores não degenerados. Portanto, utiliza-se da equação de Boltzmann, que fornece a taxa de variação temporal da função de distribuição de elétrons sob a influência de uma força interna ou de uma força externa aplicada ao semicondutor <sup>[19]</sup>:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \nabla_{\mathbf{k}} f - v \nabla_{\mathbf{k}} f + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_c \quad (4.33)$$

O primeiro termo da equação considera as mudanças na função de distribuição devido à atuação de forças e o segundo termo, as mudanças devido a gradientes de concentração de portadores no material. A aproximação dos tempos de relaxação do momentum supõe que a equação de Boltzmann pode ser avaliada quando o terceiro termo, referente às colisões e, conseqüentemente, aos espalhamentos, pode ser colocado na seguinte forma:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_c = \frac{-(f - f_o)}{\tau_m} \quad (4.34)$$

onde o tempo de relaxação de momentum  $\tau_m$  representa uma relaxação exponencial da função de distribuição em relação ao valor de equilíbrio  $f_o$ . A aproximação que envolve o termo de colisão da equação de Boltzmann, e que é expressa na equação 4.34, é feita assumindo que o espalhamento de um elétron por um íon pode ser considerado aproximadamente independente de todos os outros íons. Esta aproximação é válida para pequenas perturbações da função de distribuição. Assume-se, então, que a taxa temporal de variação da função de distribuição devido às colisões pode ser descrita através de um tempo de relaxação de momentum  $\tau_m$ . Dessa forma, segundo o procedimento e as considerações descritas por CM Wolfe et al <sup>[19]</sup>, é possível associar um tempo de relaxação de momentum a cada mecanismo de espalhamento a partir das deformações causadas no potencial periódico do cristal.

O cálculo do tempo de relaxação de momentum pode envolver uma combinação de abordagens quântica e clássica. Na abordagem quântica, considera-se

um sistema de coordenadas esféricas no espaço recíproco e um elétron com vetor de onda  $\mathbf{k}$  sendo espalhado para um estado com vetor de onda  $\mathbf{k}'$  por um campo de força arbitrário  $\mathbf{G}$ . Considera também, dentre outros aspectos importantes, uma taxa de espalhamentos representada por um elemento de matriz  $H_{kk'}$ , calculado à partir dos potenciais de espalhamento, e as relações definidas para semicondutores não degenerados. A abordagem quântica define que, nos casos de impurezas ionizadas e de fônons acústicos, processos de espalhamento que podem ser considerados, segundo uma boa aproximação, como sendo elásticos. Nesse caso, os tempos de relaxação de momentum podem ser obtidos com base na equação abaixo:

$$\frac{1}{\tau_m} = \frac{N_s V m^* 2v}{2\pi\hbar^4} \int_0^\pi |H_{kk'}|^2 \sin\theta(1 - \cos\theta) d\theta \quad (4.35)$$

onde o cálculo da matriz de elementos de espalhamento de elétrons de um determinado potencial de espalhamento é feito usando:

$$H_{kk'} = \frac{1}{N} \int_V \psi_k^* \Delta V \psi_{k'} d\mathbf{r} \quad (4.36)$$

No caso de espalhamentos por fônons ópticos, no entanto, a energia dos fônons é comparável à energia térmica dos portadores, resultando em processos de espalhamento caracteristicamente inelásticos.

O tratamento clássico do tempo de relaxação de momentum é bastante simples. Para uma concentração  $N_s/V$  de centros de espalhamento por unidade de volume com seção de choque de espalhamento,  $\sigma_m$ , o tempo livre médio entre colisões para um elétron com velocidade  $v$  é:

$$\tau_m = \frac{V}{N_s v \sigma_m} \quad (4.37)$$

A seção de choque de espalhamento é determinada considerando um centro de espalhamento com seção de choque diferencial,  $\sigma(\theta)$ , na origem do sistema de coordenadas esféricas citado anteriormente. Nesse caso, a dependência do ângulo  $\theta$  varia de acordo com os diferentes tipos de espalhamento. Um elétron espalhado por um centro de espalhamento dentro do ângulo sólido  $(\theta, \phi)$  perde, relativamente,  $(1 - \cos\theta)$  de seu momento inicial na direção incidente. Levando em conta todos os possíveis ângulos de ocorrência de espalhamento, têm-se:

$$\sigma_m = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \sigma(\theta) \sin\theta(1 - \cos\theta) d\theta d\phi \quad (4.38)$$

Usando as equações 4.37 e 4.38, o tempo de relaxação de momentum pode ser calculado por:

$$\frac{1}{\tau_m} = \frac{2\pi N_s v}{V} \int_0^\pi \sigma(\theta) \sin \theta (1 - \cos \theta) d\theta \quad (4.39)$$

Que equivale à equação quântica 4.35. Assim, uma vez que as integrais clássica e quântica expressas pelas equações 4.35 e 4.39 possuem a mesma dependência angular, pode-se obter uma relação entre a seção de choque de espalhamento e a matriz de elementos para um determinado processo de espalhamento.

$$\sigma(\theta) = \left( \frac{Vm^*}{2\pi\hbar^2} |H_{kk'}| \right)^2 \quad (4.40)$$

Segundo esse resultado é possível afirmar que uma seção de choque de espalhamento é equivalente a um potencial de espalhamento que é considerado através da matriz  $H_{kk'}$ .

O *tempo livre médio* correspondente ao espalhamento total pode ser calculado considerando uma combinação dos diferentes tempos de relaxação de momentum,

$$\frac{1}{\tau_c} = \sum_i \frac{1}{\tau_{mi}} \quad (4.41)$$

Isso conduz a uma expressão similar em termos das mobilidades, limitadas pelos diferentes mecanismos de espalhamento:

$$\frac{1}{\mu_t} = \sum_i \frac{1}{\mu_i} \quad (4.42)$$

que é conhecida como regra de Matthiessen <sup>[29]</sup>.

São fornecidos, a seguir, os tempos de relaxação de momentum para cada um dos mecanismos de espalhamento definidos na seção 4.3, calculados à partir dos respectivos potenciais de espalhamento e com o auxílio das expressões 4.35 e 4.39. Estes tempos de relaxação são válidos para amostras em que os portadores tenham comportamento tridimensional, ou seja, amostras em que os efeitos de confinamento de portadores não sejam relevantes.

#### 4.3.4.1 - Espalhamento por impurezas ionizadas

O tempo de relaxação referente à mobilidade limitada por impurezas ionizadas pode ser calculado pela expressão de Brooks-Herring <sup>[19, 30]</sup>, como segue:

$$\tau_{mii} = \frac{0,414 \cdot \varepsilon_s^2 \cdot T^{3/2}}{Z^2 N_{ii} g(n^*, T, x)} \left( \frac{m^*}{m} \right)^{1/2} \quad (4.43)$$

$$g(n^*, T, x) = \ln(1+b) - \frac{b}{(1+b)} \quad (4.44)$$

$$b = 4,31 \times 10^{13} \frac{\varepsilon_s \cdot T^2}{n^*} \left( \frac{m^*}{m} \right) x \quad (4.45)$$

$N_{ii}$  é um parâmetro ajustável que fornece a concentração de impurezas ionizadas em  $\text{cm}^{-3}$ ;  $T$  é a temperatura da amostra em K;  $Z$  é o estado de carga da impureza, considerado com sendo igual a 1;  $n^*$  é a concentração de blindagens, que foi considerada igual à concentração de portadores e  $x$  é adotado como sendo 3.

#### 4.3.4.2 - Espalhamento por impurezas neutras<sup>[19]</sup>

$$\tau_{in} = \frac{8,16 \times 10^6}{\varepsilon_s N_N} \left( \frac{m^*}{m} \right)^2 \quad (4.46)$$

$N_n$  é a concentração de impurezas neutras em  $\text{cm}^{-3}$  e  $\varepsilon_s$  é a permissividade estática relativa do material semiconductor.

#### 4.3.4.3 - Espalhamento por fônons acústicos<sup>[16, 19]</sup>

##### a) Espalhamento acústico por deformação de potencial

$$\tau_m = \frac{2,40 \times 10^{-20} C_l}{\varepsilon_A^2 T^{3/2}} \left( \frac{m}{m^*} \right)^{3/2} \quad (4.47)$$

$\varepsilon_A$  é o potencial de deformação para fônons acústicos em eV e  $C_l$  é a constante elástica longitudinal média em dinas/cm<sup>2</sup> e pode ser obtida por<sup>[19]</sup>:

$$C_l = \frac{1}{5} (3C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}) \quad (4.48)$$

##### b) Espalhamento piezoelétrico

$$\tau_{mp} = \frac{9,54 \times 10^{-8}}{h_{14}^2 \left( \frac{3}{C_l} + \frac{4}{C_t} \right) T^{1/2} \theta} \left( \frac{m}{m^*} \right)^{1/2} \quad (4.49)$$

$h_{14}$  é a constante piezoelétrica em V/cm e  $C_t$  é constante elástica transversal média em dinas/cm<sup>2</sup>, obtida por:

$$C_t = \frac{1}{5} (C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (4.50)$$

#### 4.3.4.4 - Espalhamento por fônons ópticos <sup>[19]</sup>

##### a) Espalhamento óptico por deformação de potencial

$$\tau_{mdp} = \frac{4,83 \times 10^{-20} C_i \left[ \exp\left(\frac{\theta}{T}\right) - 1 \right] \left( \frac{m}{m^*} \right)^{1/2}}{\varepsilon_A^2 T^{1/2} \theta} \quad (4.51)$$

onde  $\theta$  é a temperatura de Debye <sup>[4, 22]</sup>.

##### b) Espalhamento por fônons ópticos polares <sup>[13, 19]</sup>

O tempo de relaxação para fônons polares ópticos em compostos semicondutores do grupo III-V é obtido conforme o trabalho de A Fortini, D Diguët e J Lugand <sup>[13]</sup>, que assume a estatística de estados degenerados e uma banda de condução com formato aproximadamente esférico. Nessa análise, o termo que considera a parte fora do equilíbrio da função de distribuição e a mobilidade Hall dependente da temperatura são obtidos com uma resolução numérica da equação de Boltzmann. A análise é válida para a faixa de temperatura de 78,3K a 1761,6K.

$$\tau_{mpo} = \frac{9,61 \times 10^{-15} \varepsilon_S \varepsilon_\infty \left[ \exp\left(\frac{\theta}{T}\right) - 1 \right] \left( \frac{m}{m^*} \right)^{1/2}}{[\varepsilon_S - \varepsilon_\infty] \theta^{1/2} \left( \frac{\theta}{T} \right)} \quad (4.52)$$

$\varepsilon_S$  e  $\varepsilon_\infty$  são, respectivamente, a permissividade relativa estática e permeabilidade relativa à alta frequência. A resolução da integral é obtida de forma numérica e possui valores tabelados para a faixa de temperatura de 78,3K a 1761,6K. Portanto, não será possível mensurar a contribuição da participação dos fônons ópticos polares à baixa temperatura. Acredita-se, porém, que sua contribuição para a limitação da mobilidade total é desprezível em relação a outros mecanismos nessa faixa de temperatura.

#### 4.3.5 - Mecanismos de espalhamento de portadores em heteroestruturas de InAs/GaAs

Concluiu-se após análise de outros trabalhos <sup>[12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19]</sup> que, dos mecanismos citados acima, somente quatro têm importância relevante para as amostras estudadas, por serem os mais atuantes na limitação da mobilidade elétrica nas faixas de temperatura estudadas neste trabalho: Os espalhamentos por impurezas ionizadas, por fônons ópticos polares, acústico por deformação de potencial e

acústico piezoelétrico. Portanto, a análise dos espalhamentos será realizada com foco nestes quatro mecanismos.

Todas as expressões para o cálculo do tempo de relaxação de momentum mostradas anteriormente consideram uma situação com amostras em que os portadores possuem comportamento dinâmico tridimensional (3D), ou seja, os efeitos das regiões de confinamento de elétrons não são considerados. Porém, no caso de heteroestruturas, estes efeitos muitas vezes não podem ser desprezados. Em amostras com superredes de InAs/GaAs, devido ao potencial da banda de condução mais baixo no InAs, os portadores devem ser considerados como um gás de elétrons com comportamento bidimensional (2D) <sup>[1]</sup> no plano de InAs. Neste trabalho considerou-se que os mecanismos de espalhamento por fônons ópticos polares e impurezas ionizadas em amostras com comportamento 2D são semelhantes aqueles verificados em amostras 3D. Assim, as equações 4.43 e 4.52 foram utilizadas como uma aproximação para a descrição do comportamento das curvas de mobilidade em função da temperatura em amostras 2D, pois acreditamos que tais espalhamentos ocorrem preponderantemente no interior dos planos de InAs, onde se localizam as ilhas. Por outro lado, não é possível desprezar o comportamento bidimensional no caso de fônons acústicos, exigindo uma abordagem mais específica para estes casos.

K Lee et al <sup>[16]</sup> propõe modelos para o cálculo dos tempos de relaxação de momentum com espalhamentos acústicos, considerando heteroestruturas com apenas uma interface de semicondutores A/B e a estatística dos estados degenerados para gases bidimensionais de elétrons. Considera um confinamento bidimensional por meio de um poço de potencial aproximadamente triangular, conforme a figura 4.5(a). Como as amostras utilizadas são formadas por superredes, deve-se realizar a mesma análise efetuando correções que forneçam resultados equivalentes para poços de potencial quadrado. Este ajuste é realizado através da adaptação de um dos parâmetros do cálculo do tempo de relaxação e não traz mudanças relevantes à análise do fenômeno. A figura 4.5(b) ilustra o perfil da banda de condução para uma superrede, onde o poço de potencial pode ser considerado quadrado. É importante observar, em ambos os casos, que a concentração de estados eletrônicos próximos à interface é maior que no restante do poço, devido ao potencial mais baixo.

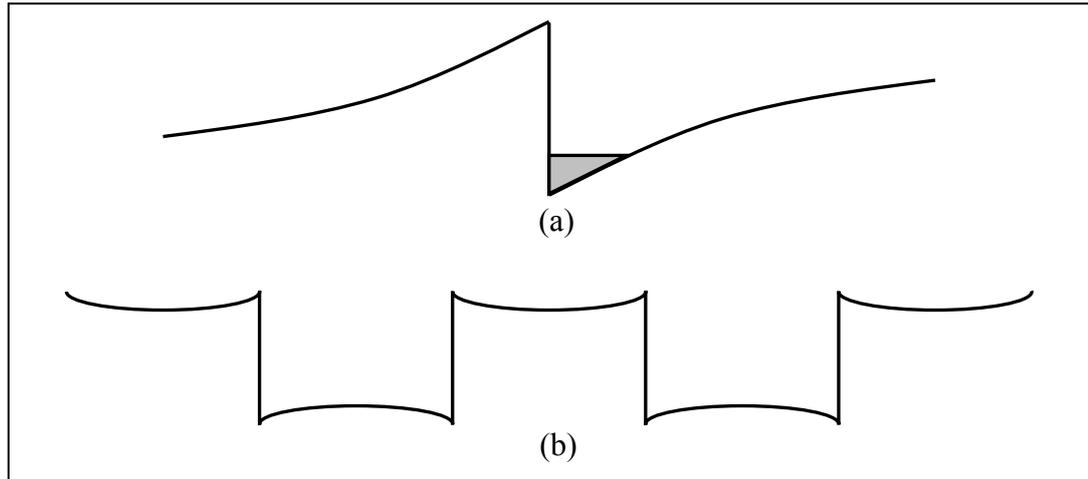


Figura 4.5 - Perfil da banda de condução em uma heteroestrutura com apenas uma heterojunção (a) e potencial aproximadamente triangular e em uma superrede (b) considerando um potencial quadrado.

#### 4.3.5.1 - Espalhamento acústico por potencial de deformação <sup>[15, 16, 18, 19]</sup>

Considera que a baixas temperaturas o espalhamento é elástico, já que a energia de Fermi é muito maior que a energia dos fônons e define o tempo de relaxação  $\tau_A$  devido ao espalhamento acústico por potencial de deformação:

$$\tau_A = \frac{(\hbar^3 \rho b u_l^2) I_A(\gamma_l)}{e_A^2 m k T} \quad (4.53)$$

$I_A(\gamma_l)$  é calculado pela integral a seguir:

$$I_A(\gamma_l) = \frac{2\gamma_l}{\pi} \int_0^{\pi/2} \left( \frac{2}{e^{\gamma_l \sin \theta} - 1} \right) \sin^3 \theta d\theta \quad (4.54)$$

$$\gamma_l = \frac{2\hbar u_l q_F}{kT} \quad (4.55) \quad e \quad q_F = (2\pi n)^{1/2} \quad (4.56)$$

- $u_l$  é a velocidade dos fônons acústicos longitudinais
- $e_A$  é o potencial de deformação acústica do material.
- $\rho$  é a massa específica.
- $b$  é a espessura efetiva do gás bidimensional de elétrons.
- $n$  é a concentração 2D de portadores na interface.

Observação:  $u_l$ ,  $e_A$  e  $\rho$  são parâmetros do material onde os portadores sofrerão confinamento, neste caso, o InAs.

#### 4.3.5.2 - Espalhamento acústico piezoelétrico <sup>[15, 16, 18, 19]</sup>

De forma similar à realizada para os espalhamentos por potencial de deformação acústica, foi definida a relação para o cálculo do tempo de relaxação relativo a fônons acústicos piezoelétricos para um gás bidimensional:

$$\tau_{PE} = \frac{\tau_A \cdot \pi \cdot q \cdot e_A}{b \cdot e \cdot h_{14}^2 \left[ \frac{9}{32} + \frac{13}{32} \left( \frac{u_l}{u_t} \right)^2 \frac{I_A(\gamma_t)}{I_A(\gamma_l)} \right]} \quad (4.57)$$

- $\tau_A$  é o tempo de relaxação do espalhamento por potencial de deformação de fônons acústicos, calculado através da equação 4.53.
- $q$  é o vetor de onda bidimensional calculado por  $q = (2\pi n)^{1/2}$  e  $n$  a concentração bidimensional de portadores em  $\text{cm}^{-2}$ .
- $h_{14}$  é a constante piezoelétrica do InAs.
- $u_l$  e  $u_t$  são, respectivamente, as velocidades longitudinal e transversal dos fônons acústicos, ou componente longitudinal e componente transversal da velocidade do som neste material.
- $I_A(\gamma)$  é o valor da integral  $I_A(\gamma)$  (equação 4.54) calculado utilizando a velocidade transversal  $u_t$  ao invés da longitudinal  $u_l$ .

Neste trabalho  $u_l$ ,  $h_{14}$ ,  $u_l$  e  $u_t$  são parâmetros referentes ao InAs <sup>[56]</sup>. Os valores destas e de outras constantes intrínsecas utilizadas no trabalho são mostradas no capítulo 6, quando são efetivamente necessárias para a realização dos cálculos de determinação da mobilidade elétrica.

## Capítulo 5 - Materiais e métodos

### 5.1 - Técnicas de crescimento por epitaxia

As aplicações tecnológicas de materiais semicondutores exigem que estes apresentem algumas características especiais relacionadas com determinados fenômenos físicos. Neste aspecto, o notável sucesso da pesquisa científica na área de semicondutores deve-se principalmente ao desenvolvimento de avançadas técnicas de fabricação. Dentre os principais métodos de fabricação de dispositivos pode-se destacar a epitaxia como um dos mais empregados no desenvolvimento de novas estruturas de materiais semicondutores.

Epitaxia é o método utilizado para o crescimento de cristais, através da deposição de camadas atômicas, em arranjo cristalino, sobre um substrato cristalino, seguindo a mesma estrutura e mesma orientação cristalográfica deste. Portanto, nesta técnica o material depositado deve ter características moleculares semelhantes às do substrato para poder acompanhar seu plano de cristalização. Quanto à natureza do material depositado, pode-se dividir a epitaxia em 2 grupos: A homoepitaxia e a heteroepitaxia.

Na homoepitaxia, o crescimento é realizado com o mesmo material do substrato, independente da dopagem do substrato e a da camada a ser crescida. Um bom exemplo é o de crescer uma camada de silício sobre um substrato também de silício.

Na heteroepitaxia, a camada crescida tem uma composição diferente daquela do substrato, porém ambas apresentarão mesma orientação e mesma estrutura cristalográfica. Um exemplo típico de estruturas heteroepitaxiais é o das amostras utilizadas neste trabalho, onde temos alternância de camadas de InAs e GaAs depositadas sobre um substrato de GaAs semi-isolante. A figura 5.1 ilustra estes exemplos.

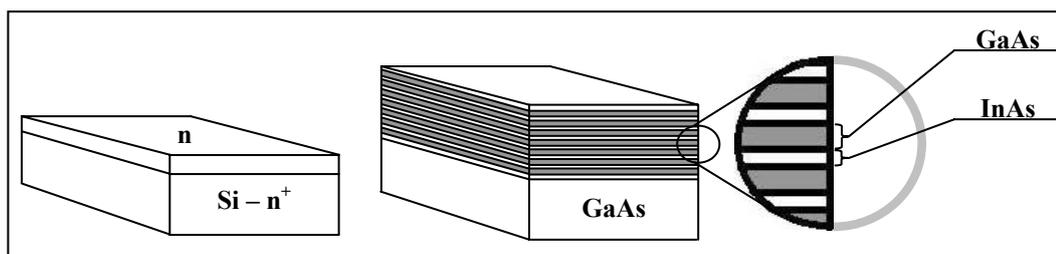


Figura 5.1 – (a) Estrutura homoepitaxial composta por uma camada de Si tipo n sobre um substrato tipo n<sup>+</sup>. (b) Estrutura heteroepitaxial composta por uma superrede de InAs/GaAs.

Dependendo da forma de transportar o material a crescer desde a fonte até o substrato, os processos epitaxiais podem se enquadrar em 3 tipos: (a) epitaxia de fase líquida, (b) epitaxia de fase gasosa e (c) epitaxia de feixe molecular. Hoje em dia, todos estes processos são utilizados para o crescimento dos mais diversos dispositivos e estruturas semicondutoras. Uma breve análise de cada um deles é realizada a seguir:

### **5.1.1 - LPE (Liquid Phase Epitaxy) – Epitaxia de Fase Líquida**

Trata-se de uma técnica antiga, bastante desenvolvida e que permite obter com grande repetitividade, filmes cristalinos com parâmetro de rede “casado” com o do substrato. Pode fornecer excelentes camadas com espessuras relativamente grandes, maiores que 5000Å. O crescimento ocorre pela precipitação de uma solução saturada de material semicondutor em um substrato. O solvente da solução é normalmente um dos componentes do composto a ser depositado. O Índio (In), por exemplo, é utilizado como solvente para crescimento de InAs. Conforme a solução é resfriada sua saturação aumenta e quando atingida a supersaturação insere-se um cristal (ou substrato) que serve de matriz para o crescimento epitaxial.

### **5.1.2 - VPE (Vapour Phase Epitaxy) – Epitaxia de Fase Gasosa**

É a técnica de crescimento epitaxial mais utilizada em tecnologia de Si. Neste caso, utiliza-se VPE tipo homoepitaxial para a fabricação de CI's tipo bipolares e CMOS, onde normalmente deseja-se obter camadas de dopagem menor que a do substrato. O processo VPE é realizado em um reator específico com uma câmara de processo, onde as lâminas de substrato são posicionadas sobre um susceptor (suporte de lâminas) com temperatura controlada. O material a ser depositado é parte de um composto gasoso que é introduzido no forno em que as lâminas se encontram. A superfície da lâmina age como catalisador para a diálise do gás. Pelo menos um dos subprodutos da diálise é sólido e depositado sobre a lâmina. A deposição ocorre a taxas de até 1µm/minuto.

### **5.1.3 - MBE (Molecular Beam Epitaxy)**

MBE (Epitaxia de Feixe Molecular) é uma técnica que utiliza uma câmara de Ultra Alto Vácuo (da ordem de  $10^{-10}$  torr) para aumentar o percurso médio sem colisões das moléculas e impedir que impurezas indesejáveis sejam incluídas no material. Dentro da câmara é colocado um substrato que é aquecido conforme o tipo de estrutura cristalina a ser formada. As substâncias componentes do cristal a crescer

são aquecidas controladamente em fontes individuais, que são constituídas por recipientes (células de efusão). As fontes são distribuídas ao longo da superfície interna da câmara de crescimento, que geralmente tem formato esférico ou cilíndrico, de maneira que os feixes moleculares provenientes das fontes converjam para a parte central da câmara de crescimento. Cada fonte possui uma pequena abertura voltada para o substrato, sendo o acesso das substâncias à câmara MBE controlado por obturadores localizados sobre estas aberturas. O vapor da substância sob pressão no interior da célula é ejetado no vácuo através da abertura, produzindo um feixe atômico ou molecular que incide sobre o substrato. As partículas evaporadas nas células alcançam o substrato e são adsorvidas por este. A deposição ocorre de forma lenta, controlada a uma taxa que pode variar dentro de amplos limites a partir de poucas moléculas/minuto. Esta taxa é precisamente controlada pela atuação dos obturadores e pelo ajuste da temperatura de cada fonte (das taxas de evaporação das substâncias). Assim, é possível obter filmes cristalinos de altíssima qualidade e pureza com espessuras que podem variar de alguns angstroms ( $1\text{\AA}=10^{-10}\text{m}$ ) a dezenas de microns ( $1\mu\text{m} = 10^{-6}\text{m}$ ).

Com o MBE podem-se obter camadas epitaxiais com interfaces e perfis de dopagens ultra-abruptas apresentando melhor definição que as outras técnicas, por operar na faixa de temperaturas de  $500 - 800^{\circ}\text{C}$  e com taxas de crescimento inferiores a  $1\mu\text{m/h}$ . É uma técnica de grande interesse científico, porém é muito cara e pouco empregada na indústria. O sistema MBE é representado nas figuras 5.2 e 5.3, a seguir:

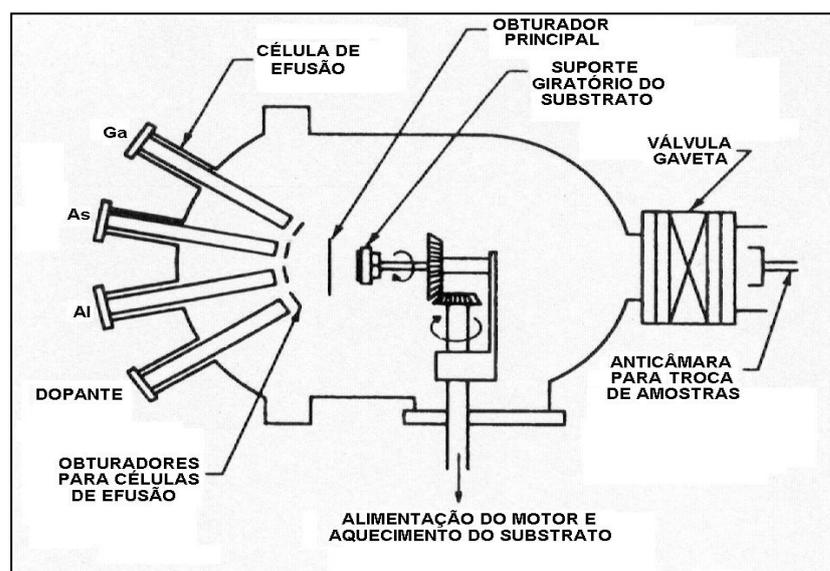


Figura 5.2 - Configuração de uma câmara MBE similar à utilizada pelo DF-ICEx-UFMG <sup>[58]</sup>.



Figura 5.3 - Sistema Riber MBE utilizado pelo DF-ICEX-UFMG no crescimento das amostras <sup>[5]</sup>.

## 5.2 - Crescimento das amostras

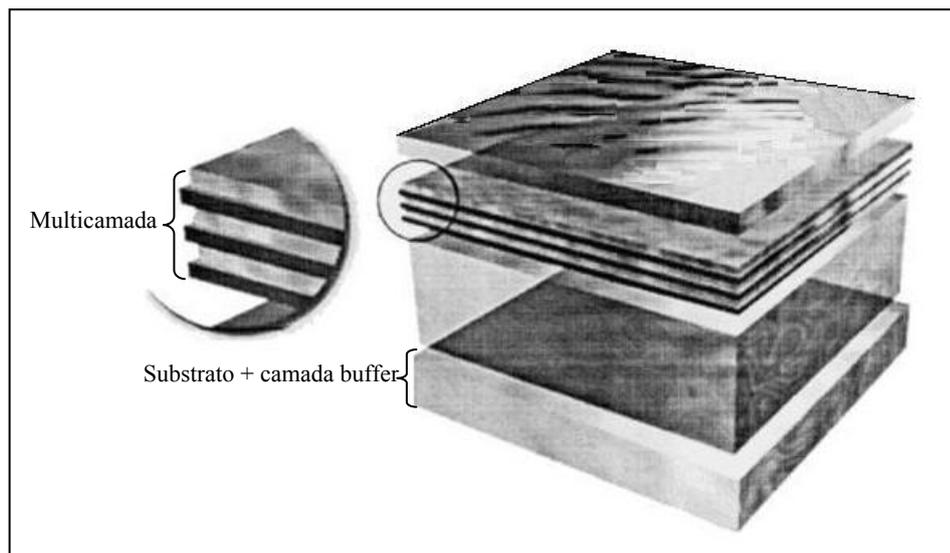
Neste trabalho foram utilizadas 6 amostras de superredes com diferentes características. Conforme descrito no capítulo 3 (seção 3.8.1), pode ocorrer a formação de pontos quânticos nestas superredes, inclusive com alinhamento dos pontos quânticos de multicamadas adjacentes. As propriedades elétricas dos pontos quânticos dependem profundamente de suas dimensões e geometria, que são definidas pelos parâmetros utilizados no crescimento (temperatura, espessura das camadas e quantidade de multicamadas do empilhamento). Além disso, as condições de crescimento das amostras influenciam diretamente nos tipos e concentrações de outros defeitos no material resultante.

Foram crescidos 2 grupos de amostras contendo multicamadas alternadas de InAs/GaAs utilizando um sistema MBE Riber 2300 (figura 5.3) da UFMG (DF - ICEX). O crescimento das amostras seguiu o procedimento padrão realizado por de A.G. Oliveira *et al* <sup>[31]</sup> e descrito no trabalho de J.C. Gonzalez <sup>[5]</sup>. No primeiro grupo (BH9821, BH9822 e BH9823) variou-se o número de períodos da multicamada e manteve-se fixa a quantidade de InAs em cada camada. No segundo grupo de amostras (BH9826, BH9831 e BH9803) cresceram-se 50 períodos da multicamada e variou-se a quantidade de InAs para cada amostra.

O crescimento de todas as amostras terminou em uma camada de InAs visando realizar medidas *ex-situ* de AFM <sup>[5]</sup>. Na tabela 5.1 e figura 5.4 podem ser observadas, respectivamente, os principais parâmetros de crescimento e um diagrama estrutural das amostras utilizadas.

Tabela 5.1 - Características de crescimento das amostras utilizadas.

Amostra	Temperatura de crescimento (°C)	Nº de períodos da multicamada	Cobertura de InAs (ML)	Espaçador de GaAs (ML)
BH9821	500	0	1,9	-
BH9822	520	5	1,9	30
BH9823	510	10	1,9	30
BH9826	510	50	1,9	30
BH9831	500	50	2,3	40
BH9903	510	50	1,35	40

Figura 5.4 - Estrutura básica das amostras contendo pontos quânticos <sup>[32]</sup>.

### 5.3 - Preparação das amostras para a caracterização elétrica

Após o crescimento por epitaxia (via MBE), as amostras foram submetidas a um processo de preparação para possibilitar posterior execução das medidas elétricas. Este processo consistiu em separar partes menores do material, preparar os contatos elétricos necessários e fixar as amostras ao sistema de caracterização. Portanto, para que cada amostra estivesse pronta para a caracterização elétrica, foi necessário cumprir as seguintes etapas:

#### 5.3.1 - Clivagem

As amostras foram crescidas sobre substratos relativamente grandes para que possibilitem a divisão em partes menores e a obtenção de uma quantidade satisfatória de amostras a serem utilizadas nas diferentes caracterizações. Portanto, nos experimentos descritos, foram utilizados pequenos pedaços das amostras originais. Clivagem é o processo utilizado para dividir as amostras originalmente crescidas pela técnica de MBE em pedaços, ou seja, em amostras menores. Neste caso, como cada

amostra foi crescida sobre um substrato (cristal) de GaAs com orientação (100) para o plano de superfície, basta pressionar uma das extremidades deste plano de forma normal com um bisturi ou outra ferramenta cortante de lâmina fina, paralelamente a um dos lados do cristal, para que se obtenham tiras (placas) do material. Dependendo do tamanho das placas obtidas pode-se efetuar nova clivagem, de forma a obter pequenos pedaços retangulares sobre os quais serão preparados os contatos elétricos.

### 5.3.2 - Deposição e difusão de contatos

Depois de separar pequenos pedaços de amostra pelo processo de clivagem, foram montados os contatos elétricos necessários à caracterização. As posições dos pontos de contato dependem somente do tipo de caracterização a realizar. O perfil dos contatos das amostras para cada tipo de caracterização é ilustrado na figura 5.5.

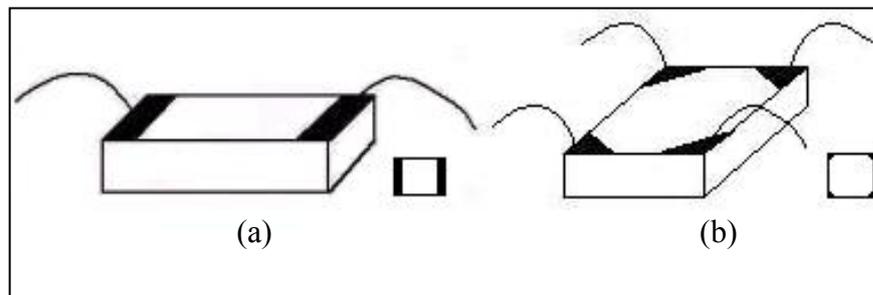


Figura 5.5 - (a) Amostra para caracterização a 2 pontos e (b) Amostra para caracterização a 4 pontos.

Em caracterizações elétricas de materiais semicondutores, as características dos contatos dependem muito da estrutura do material e do tipo de experimento a ser realizado. Em alguns casos, a exemplo de medidas de espectroscopia de impedância ou de capacitância, utilizam-se contatos Schottky, que são construídos por meio de técnicas de deposição e recursos de litografia. Porém, para os experimentos realizados neste trabalho, foram utilizados contatos ôhmicos, que podem ser obtidos pela difusão do metal do contato através da heteroestrutura de material semicondutor. A difusão de contatos faz-se necessária por 2 motivos básicos:

Para a obtenção de contatos ôhmicos deve-se evitar a formação de interfaces abruptas metal/semicondutor e, conseqüentemente, de barreiras de potencial (Schottky). Antes da realização dos experimentos foram efetuados testes para verificar a qualidade dos contatos obtidos, procurando verificar a presença de possíveis efeitos de contato nas amostras. Para tal, foram realizados experimentos  $I(V)$  com alternância na polaridade do campo e, no caso de amostras com 4 pontos, da combinação dos contatos;

- Deve-se ter acesso aos diversos níveis da multicamada. Cada amostra foi crescida sobre um substrato semi-isolante, portanto, só é possível realizar fixação de contatos sobre a superfície. Para a correta caracterização dos pontos quânticos, é necessário que cada contato tenha acesso aos diversos níveis da multicamada de InAs/GaAs da heteroestrutura e não somente à camada de InAs da superfície. A figura 5.6 ilustra a difusão de contatos em amostras com 4 pontos.

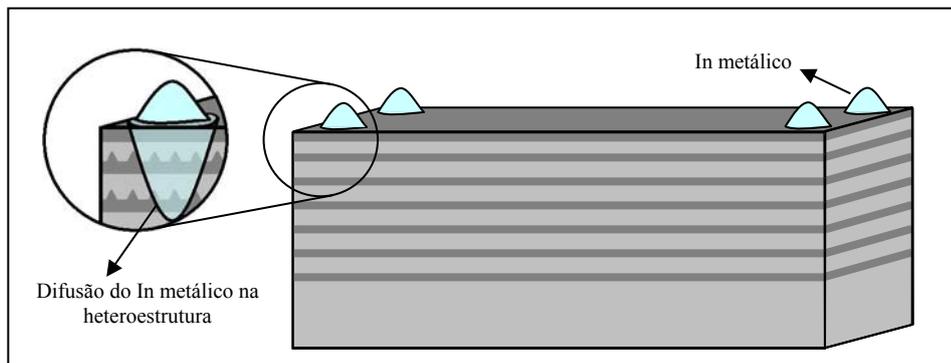


Figura 5.6 - Difusão de contatos em amostras com 4 contatos.

O metal utilizado nos contatos foi o In metálico. Inicialmente foi depositado sobre a amostra com a ajuda de um soldador especial com controle de temperatura e ponta de solda de In limpa e livre de metais de baixo ponto de fusão, componentes das soldas convencionais (estanho e chumbo). É importante observar que esta ponta é utilizada somente para esta finalidade e para este material (In metálico). A temperatura do soldador durante a deposição deve ser suficiente para tornar o In maleável, sem permitir a formação de óxido metálico nem sua difusão na amostra. Neste caso, o soldador foi regulado para operar entre 200°C e 250°C.

Após a deposição dos contatos, as amostras foram colocadas em cadinhos e levadas a um forno visando ativar o processo de difusão do In metálico através da amostra. No interior do forno estabeleceu-se uma atmosfera redutora, com 85% de N<sub>2</sub> e 15% de H<sub>2</sub>, a fim de evitar a oxidação dos contatos. A temperatura interna foi elevada com uma rampa de aquecimento de 20°C/min até alcançar 300°C e mantida nesta temperatura por 10 minutos. Posteriormente, resfriou-se o sistema com a mesma taxa.

### 5.3.3 - Soldagem dos eletrodos

Após o processo de difusão foram soldados eletrodos aos terminais construídos. Esses eletrodos são fios de ouro muito finos soldados com a mesma estação utilizada anteriormente na deposição de In sobre a amostra.

#### 5.3.4 - Fixação da amostra ao porta-amostra

Já com os respectivos eletrodos, cada amostra foi fixada a um porta-amostra de cobre que posteriormente foi acondicionado no criostato para realização das medidas elétricas. Os porta-amostras, bem como muitas das partes internas do criostato, são feitos de cobre devido à necessidade de um material de ótima condutividade térmica, que possibilite o resfriamento da amostra por contato térmico. Posteriormente, cada eletrodo soldado à amostra teve sua outra extremidade soldada a um dos terminais elétricos presentes no porta-amostra (figuras 5.7 e 5.8). Uma vez fixada ao porta-amostra, a amostra está pronta para a caracterização elétrica. Para isso, o conjunto porta-amostra / amostra deve ser acondicionado no criostato.

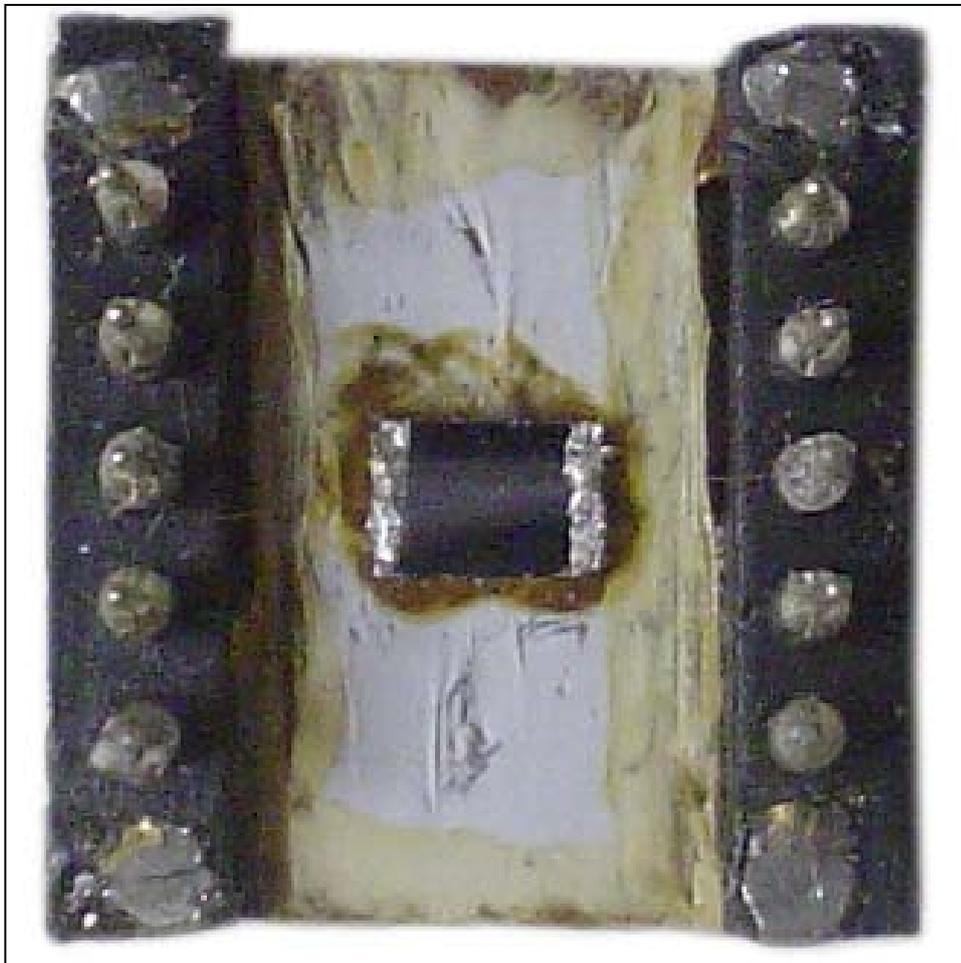


Figura 5.7 - Porta-amostra com uma das amostras utilizadas em caracterizações a 2 pontos.

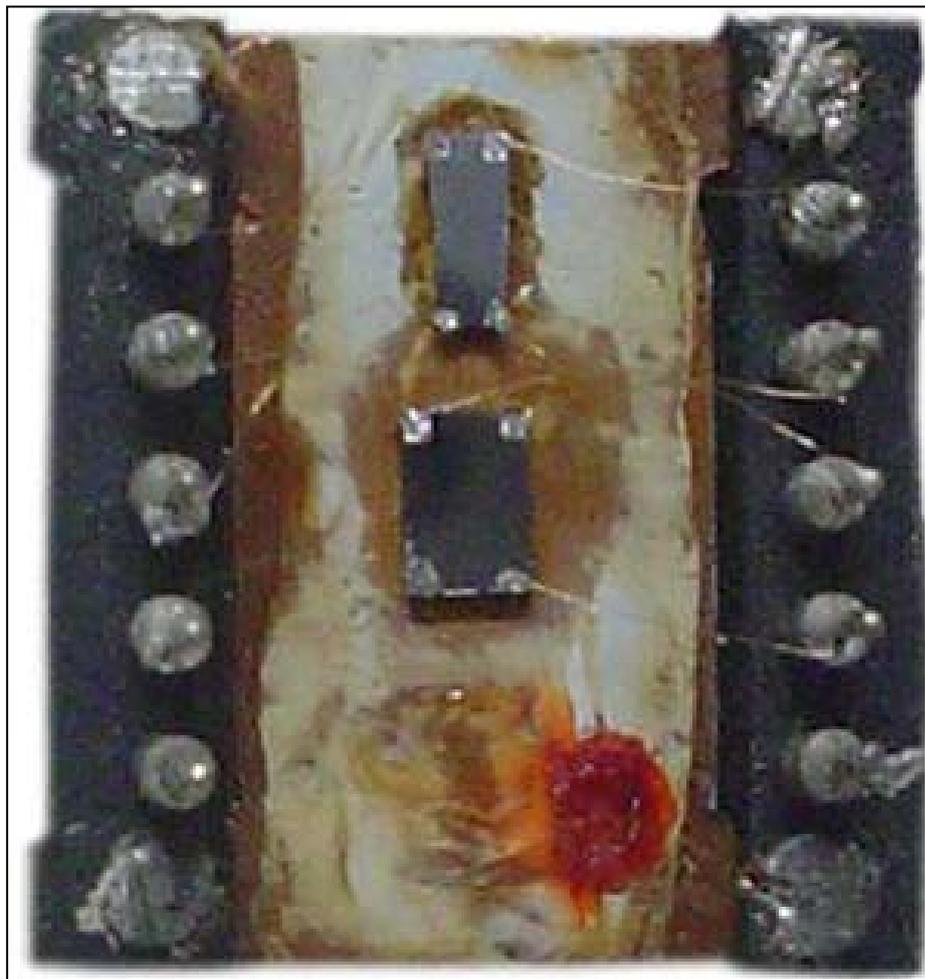


Figura 5.8 - Porta-amostra com amostras utilizadas para caracterização a 4 pontos.

## 5.4 - Técnicas de caracterização

Foram realizados dois tipos básicos de caracterização elétrica das amostras de material semiconductor com o intuito de verificar as propriedades de transporte de portadores do material:

### 5.4.1 Caracterização a dois pontos: $I(V)$ e $I(t)$

Na caracterização  $I(V)$  as amostras são submetidas a uma variação de temperatura de 290K até 5K e, em temperaturas previamente determinadas, registra-se o comportamento da corrente na amostra em função da diferença de potencial aplicada sobre a mesma. Durante o experimento a amostra é submetida à iluminação proveniente de um LED infravermelho instalado no porta-amostra. São utilizadas três diferentes condições de iluminação em função da corrente no LED: 0 (escuro), 5mA e 20mA. Este experimento tem como objetivo principal verificar a presença de determinados efeitos não lineares na condutividade das amostras que, normalmente, ocorrem em situações de altos campos elétricos aplicados. O principal desses efeitos é a condução diferencial negativa, ou seja, condições em que ocorra queda na corrente que atravessa a amostra para aumentos da diferença de potencial aplicada. A condução diferencial negativa eventualmente vem acompanhada por outro efeito bastante interessante: ocorrência de oscilações na condutividade do material. Portanto, para observar e analisar esse tipo de efeito realiza-se uma caracterização complementar à  $I(V)$ , registrando o comportamento  $I(t)$  da corrente em função do tempo como resposta à aplicação de uma excitação externa de tensão. Os valores de tensão, temperatura e iluminação para realização deste experimento são escolhidos a partir da caracterização  $I(V)$ , ou seja, nas temperaturas e iluminações em que ocorrerem oscilações escolhe-se uma tensão em que o material tenha apresentado comportamento não linear. Conforme descrito anteriormente, nas caracterizações  $I(V)$  e  $I(t)$  faz-se uso de amostras com dois contatos (figura 5.9), sendo importante registrar as dimensões que influenciam a resistência elétrica da amostra: (a) a distância  $d$  entre contatos e (b) a área  $A$  da seção transversal da amostra.

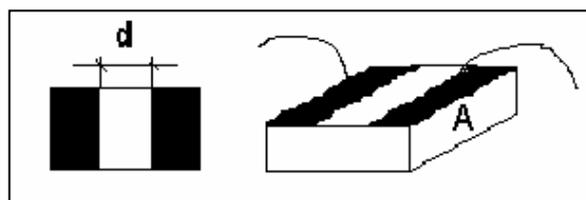


Figura 5.9 - Parâmetros físicos da amostras utilizadas na caracterização a dois pontos.

#### **5.4.2 Caracterização a 4 pontos pelo método de van der Pauw**

A técnica de caracterização  $I(V)$  fornece informações importantes sobre o comportamento elétrico do material, como a resistividade/condutividade elétrica do material, energia de ativação, dentre outras; mas pode apresentar imprecisões inevitáveis relacionadas ao formato das amostras, às dimensões e posicionamento dos contatos e à anisotropia das propriedades elétricas resultante da distribuição não-homogênea de defeitos e dopantes no material. Por este motivo, foi utilizada uma técnica mais apropriada para a caracterização das propriedades de transporte de portadores em materiais, principalmente aqueles de alta resistividade ( $\rho$ ): a caracterização a 4 pontos utilizando o método de van der Pauw, na qual são realizadas medidas de resistividade e, complementarmente, de efeito Hall em amostras com quatro contatos, como a da figura 5.5(b). A caracterização Hall permite obter duas propriedades muito importantes para a análise do transporte de cargas elétricas no material: mobilidade e concentração de portadores. Além disso, neste experimento pode-se utilizar amostras com geometria arbitrária. Embora tenham sido utilizadas amostras retangulares, não há exigências quanto a uma geometria específica para as amostras. Contudo, o tamanho excessivo dos contatos em relação ao da amostra é uma possível fonte de imprecisões nas medidas. D.C. Look <sup>[10]</sup> descreve em detalhes a influência do tamanho dos contatos em experimentos a 4 pontos utilizando amostras retangulares.

### **5.5 - Suporte físico para a caracterização elétrica**

O suporte físico (sistema de caracterização) utilizado na realização dos experimentos varia conforme o experimento a realizar. Portanto, para efetuar as medidas elétricas em geral dispõe-se de 6 grupos básicos de equipamentos: (a) sistema de criogenia/controle de temperatura, (b) sistema de campo magnético, (c) sistema de vácuo, (d) instrumentação de alta precisão, (e) acessórios para caracterização elétrica e (f) sistema computacional para controle de processos.

#### **5.5.1 Sistema de criogenia/controle de temperatura**

Tem por objetivo manter a temperatura da amostra em valores de interesse durante os experimentos. Utiliza He no estado líquido para realizar o resfriamento da amostra no interior do criostato. Este sistema é composto basicamente por:

5.5.1.1 - *Reservatório de He e tubo de transferência*: Compõem a parte necessária ao fornecimento do fluxo de He para o resfriamento da amostra. O reservatório de He possui capacidade de 100 litros e, devido ao seu isolamento térmico e à pressão atuante internamente, de 1 a 5 psi ( $7 \cdot 10^3$  a  $3,5 \cdot 10^4$  Pa) acima da pressão atmosférica, é capaz de manter o He no estado líquido e a uma temperatura de 4K, com taxa de evaporação em repouso de 1% ao dia. O He líquido é expulso do reservatório através do tubo de transferência devido à diferença de pressão entre o interior do reservatório e o meio externo. No tubo de transferência há uma região localizada entre o meio externo e a parte central do tubo onde, frequentemente, deve-se estabelecer vácuo, permitindo o acesso do fluxo de hélio ao criostato com acréscimos desprezíveis de temperatura. O fluxo de He para o interior do criostato pode ser controlado através de um sistema de válvulas ligado ao tubo de transferência. Todos estes componentes estão ilustrados na figura 5.10.



Figura 5.10 - Sistema de Criogenia: (a) tubo de transferência, (b) reservatório de He e (c) sistema de válvulas para controle do fluxo de He líquido.

5.5.1.2 - *Criostato*: Compartimento fechado onde se estabelece vácuo e onde o conjunto porta-amostras/amostra é fixado para a caracterização elétrica. No interior do criostato, o vácuo deve ser suficiente (da ordem de  $7 \cdot 10^{-3}$  Pa) para permitir que a temperatura atinja valores realmente muito baixos, da ordem de poucos Kelvin. O He líquido é transportado de forma isolada por tubulações através do tubo de transferência até o criostato, onde entra em um sistema (dedo frio de cobre) que permite sua circulação por meio de capilares até próximo da região em que se

encontra o conjunto porta-amostra/amostra, onde o resfriamento ocorre por meio do contato térmico da amostra com as partes metálicas (cobre) do porta-amostra e deste com a tubulação de cobre por onde passa o He. Pode-se encontrar, no interior do criostato, além das partes de fixação e resfriamento da amostra, um grupo de condutores que permitem acesso aos sinais elétricos provenientes da amostra durante a caracterização e que, portanto, são essenciais às medidas elétricas.

*5.5.1.3 - Controlador de temperatura:* Equipamento que, através de um cabo específico, é conectado a um aquecedor e a um par de sensores de temperatura existentes no interior do criostato, possibilitando a leitura e controle da temperatura interna deste. Sem seu auxílio os experimentos seriam extremamente demorados e economicamente inviáveis, pois o controle do fluxo de He resume-se a atuação manual sobre as válvulas de controle, impossibilitando um controle preciso da temperatura. Este equipamento faz uso de um controlador PID (Proporcional-Integral-Derivativo) para atuar sobre o aquecedor do criostato buscando manter a temperatura no valor alvo e funcionando, desta forma, como um instrumento complementar ao sistema de resfriamento a He líquido. Através de seu painel foi possível verificar as temperaturas lidas via sensores, bem como especificar a temperatura desejada para a amostra e os parâmetros PID a serem utilizados pelo controlador. Sempre que necessário é possível modificar tais parâmetros de forma a obter um controle mais adequado ao comportamento dinâmico da temperatura do sistema, que muda com o resfriamento.

*5.5.1.4 - Multímetro Keithley 2001 como leitor de temperatura:* Os dois sensores citados anteriormente se encontram instalados em diferentes posições do interior do criostato e por isso podem apresentar temperaturas um pouco diferentes. Procurando efetuar uma medida mais acurada, instalou-se um termopar numa posição muito próxima da amostra. Este termopar é ligado ao multímetro Keithley 2001 que, neste caso, é configurado para leituras de temperatura. Durante os experimentos adota-se esta como sendo a temperatura da amostra.

### 5.5.2 Sistema de Campo Magnético

É utilizado na realização de experimentos de efeito Hall, para fornecimento do campo magnético necessário a esta caracterização. O conjunto básico de equipamentos é composto por eletro-ímã e fonte inversora de corrente:

5.5.2.1 - *Eletro-ímã*: Responsável direto pelo fornecimento do campo magnético utilizado em experimentos de efeito Hall, o eletro-ímã possui uma região específica para fixação do criostato durante a realização deste experimento (figura 5.11), oferecendo boa estabilidade mecânica e, conseqüentemente, maior credibilidade às medidas realizadas com este equipamento. Devido a essa fixação eficiente, utiliza-se esta base de fixação para realização de outros experimentos, com o eletro-ímã desligado, como no caso da caracterização  $I(V)$  realizada neste trabalho. A intensidade do campo magnético fornecido pode chegar a 1,0T para a atual distância fixada de entre-polos, sendo proporcional a corrente fornecida pela fonte inversora de corrente. Devido às altas correntes circulando através de suas espiras e à dissipação de calor comum em sistemas magnéticos, é utilizado um sistema de resfriamento a água, composto por uma bomba mecânica, mangueiras e um filtro para partículas sólidas. Por medida de segurança, a fonte de corrente é programada a não fornecer corrente se não houver fluxo de água através do sistema de resfriamento.

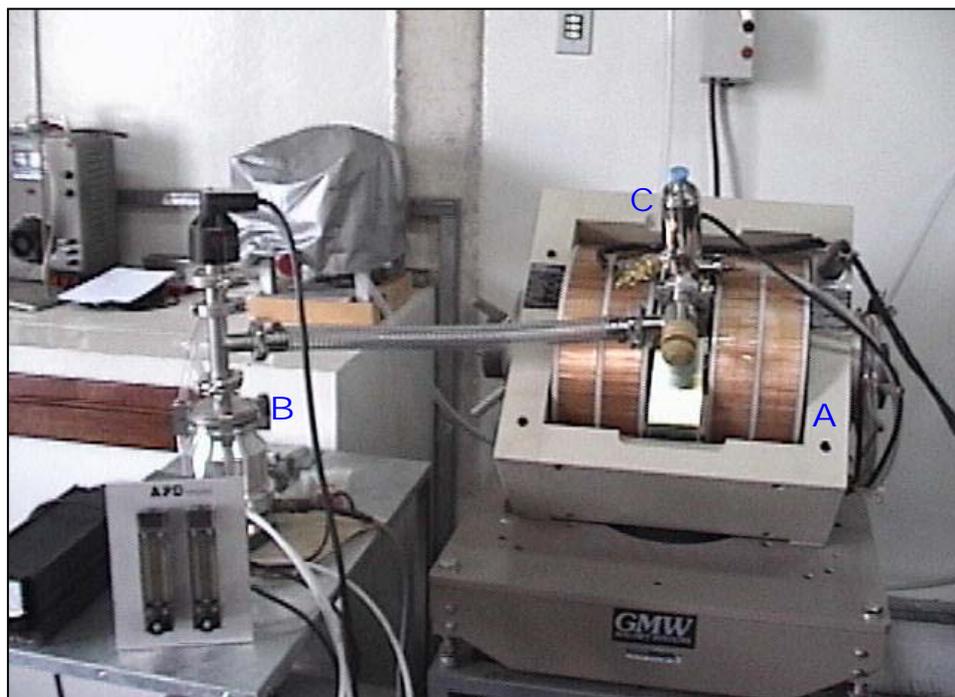


Figura 5.11 - (a) Eletro-ímã, (b) bomba de turbo vácuo e (c) criostato.

5.5.2.2 - *Fonte de Corrente*: Utilizada no fornecimento da corrente elétrica que permite o estabelecimento de campo magnético no eletro-ímã. A fonte de corrente utilizada tem capacidade de fornecimento de até 110A, porém, na prática o limite do conjunto é de 70A, valor correspondente ao maior campo magnético fornecido pelo eletro-ímã. Seu acionamento é realizado pela chave reversora de corrente, controlada por uma interface GPIB.

5.5.2.3 - *Chave reversora de corrente e interface controladora GPIB*: O acionamento e controle da fonte de corrente são realizados pelo sistema composto pela chave reversora de corrente e pela interface controladora GPIB. Este sistema tem a função de controlar a intensidade e o sentido da corrente a ser fornecida pela fonte de corrente. Ao possibilitar a inversão do sentido da corrente, garante a obtenção de uma rampa linear que passe por  $i=0$  quando o campo magnético for nulo ( $B=0T$ ). A automação da interface controladora GPIB é realizada através de programas desenvolvidos no software Labview 6.1, onde um modelo, construído com base na curva de calibração do eletro-ímã, indica a intensidade de corrente a ser fornecida para determinado valor de campo magnético.

### 5.5.3 *Sistema de vácuo*

Este sistema é responsável pelo estabelecimento de vácuo no interior do criostato, no tubo de transferência, na região de isolamento térmico do reservatório de He, etc. Utiliza-se um sistema de vácuo composto por duas bombas: Uma bomba mecânica convencional e uma bomba turbo molecular Alcatel ATP80. É capaz de estabelecer vácuo melhor que  $10^{-5}$  Torr, dependendo das características de vedação do criostato/câmara utilizada.

### 5.5.4 *Instrumentação de alta precisão*

5.5.4.1 - *Equipamento Keithley 237*: É um equipamento multifuncional capaz de fornecer e medir tensões e correntes elétricas. Fornece tensões de até 1100V e correntes de até 100mA, sendo limitado a 10mA para tensões maiores que 110V e possui resolução máxima de  $10fA$  ( $1fA=10^{-15}A$ ). O Keithley 237 foi utilizado em ambos os experimentos: Na caracterização  $I(V)$  é o único instrumento utilizado, configurado como fonte de tensão e realizando medidas da corrente. Nos experimentos a 4 pontos é utilizado exclusivamente como fonte de corrente.

5.5.4.2 - *Eletrômetro Keithley 6512*: É um equipamento capaz de realizar medidas de baixo sinal com alta precisão: tensão, corrente, resistência e carga. O Keithley

6512 foi utilizado na caracterização a 4 pontos para realizar medidas de tensão (diferença de potencial). (Inserir mais detalhes do Keithley 6512). Assim como o Keithley 237, este eletrômetro foi controlado por um sistema computacional (a ser descrito adiante) através da interface controladora GPIB.

### ***5.5.5 Acessórios para caracterização elétrica***

Além dos equipamentos citados acima, os sistemas para realização de caracterizações elétricas possuem ainda diversos acessórios necessários à realização de experimentos: cabos, resistores, adaptadores, etc. Dentre estes, pode-se citar 2 que merecem maior destaque pela sua considerável aplicabilidade nas caracterizações a 4 pontos:

*5.5.5.1 - Placa Comutadora:* Devido à grande quantidade de medidas a realizar neste experimento (16 para cada temperatura) desenvolveu-se um equipamento para automação das medidas de 4 pontos <sup>[33]</sup>. A placa comutadora é um sistema eletrônico composto basicamente por 16 relés eletromagnéticos e um circuito integrado CD4515 (multiplexador) que controla o chaveamento dos relés com base em dados binários enviados pelo computador através de sua porta paralela. Estes dados são enviados de acordo com a configuração da medida a realizar, ou seja, de acordo com a combinação física de contatos necessária a cada medição. O objetivo dessa comutação é interligar equipamentos e contatos em cada uma das medidas a realizar.

*5.5.5.2 - Dispositivo de comutação manual:* No caso da realização de experimentos com amostras que apresentem alta resistividade (alta resistência) não é indicado o uso da placa comutadora devido a possíveis problemas de isolamento dos relés. Neste caso, a influência da impedância do arranjo experimental na caracterização elétrica não seria desprezível em relação à amostra. Para solucionar tal problema pode-se utilizar um dispositivo de comutação manual que, embora torne a caracterização mais lenta, garante uma isolamento muito superior, além de ser bem simples.

### 5.5.6 *Sistema computacional para controle de processos*

A grande maioria dos equipamentos eletrônicos utilizados em laboratório permite controle automático na realização dos experimentos, sendo possível automatizar a maioria dos procedimentos, tornando-os mais rápidos, mais econômicos e menos susceptíveis a falhas provenientes do usuário. Este sistema é composto basicamente por um computador (figura 5.12) ao qual são ligados quase todos os equipamentos a controlar, por meio de interfaces GPIB. A interface GPIB pode ser ligada a equipamentos para controle e aquisição dos dados obtidos dos experimentos. Dispõe-se também de uma placa de aquisição de dados (DAQ) para leitura de sinais elétricos analógicos sendo ligada ao computador por meio de uma interface independente. A aquisição de dados e o controle dos equipamentos durante os experimentos são realizados utilizando programas elaborados na plataforma Labview 6.1, software que utiliza linguagem orientada ao objeto para realizar os procedimentos de controle. O Labview é uma linguagem de programação específica para sistemas de controle em ambientes de pesquisa. Permite elaborar tais sistemas sem a utilização de controladores específicos, pois é capaz de simulá-los através de rotinas de software. Muitos desses programas já vêm incluídos na biblioteca de opções do Labview. Um exemplo típico é o do controlador PID. Quase todos os equipamentos utilizados em nossos experimentos, nas caracterizações elétricas descritas, (Keithley 237, Eletrometro Keithley 6512, Eletro-ímã, etc.) são controlados por meio do Labview.

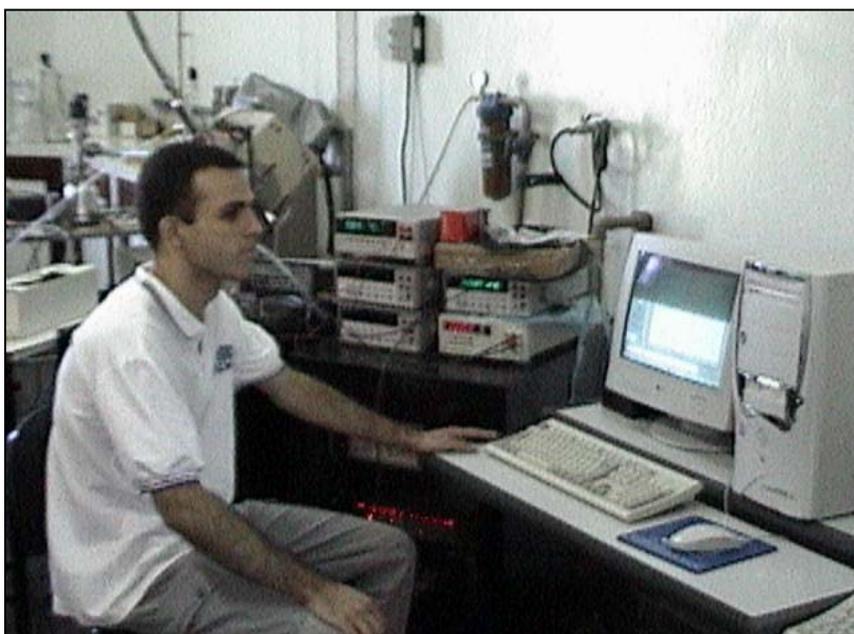


Figura 5.12 - Sistema computacional para realização de experimentos.

Nas caracterizações elétricas foram utilizados 2 grupos de programas desenvolvidos em Labview:

O primeiro grupo destina-se a realização da caracterização a dois pontos. No caso da caracterização  $I(V)$ , registra-se o comportamento da corrente que atravessa o material em função da tensão aplicada. O programa  $I(V)$  (figura 5.13) permite realizar a escolha dos limites e do passo na variação da tensão aplicada, do valor da resistência em série com o circuito, do limite máximo de corrente na amostra e da localização do arquivo de dados do experimento. Em alguns casos específicos, complementarmente à caracterização  $I(V)$  registra-se o comportamento  $I(t)$  da corrente em função do tempo em resposta à aplicação de uma excitação externa de tensão. O programa para realização do experimento  $I(t)$  é muito parecido ao usado para caracterização  $I(V)$ , porém considera o tempo como variável independente e uma excitação de tensão de valor constante. O valor desta tensão, da temperatura e da iluminação são escolhidos previamente a partir das caracterizações  $I(V)$ .

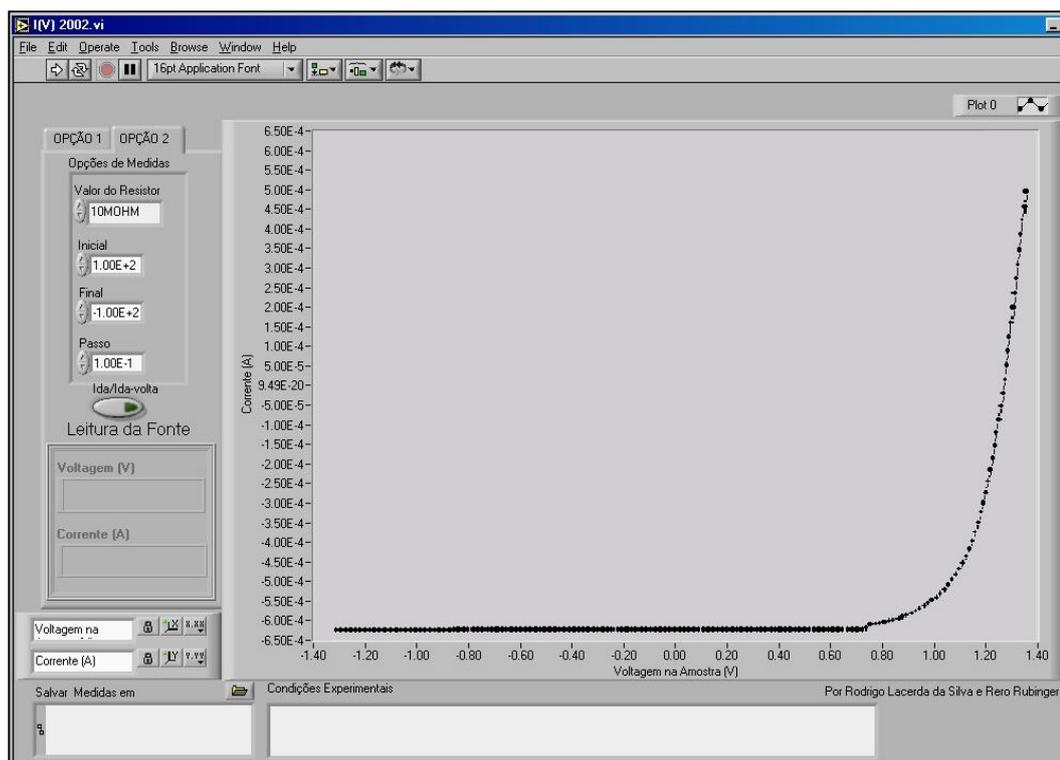


Figura 5.13 – Teste do programa utilizado para realização da caracterização  $I(V)$ .

• O segundo grupo é utilizado na realização da caracterização a 4 pontos pelo método de van der Pauw (resistividade e efeito Hall). O experimento realizado é descrito em detalhes neste trabalho, no capítulo 4 (seção 4.2). Este programa permite registrar/especificar a temperatura atual da amostra, a corrente que deve ser fornecida pelo Keithley 237, a espessura das camadas de interesse na amostra (aquelas sobre o substrato+buffer), a intensidade do campo magnético a ser aplicado pelo eletro-ímã e a localização do arquivo de dados com os resultados do experimento. Com base nessas informações, o software controla os equipamentos na realização do experimento e exibe, após o término da caracterização em cada temperatura, os valores calculados das grandezas de interesse. Assim, o usuário tem acesso direto aos resultados ao longo da realização do experimento e pode corrigir possíveis falhas. A tela principal deste programa é exibida na figura 5.14.

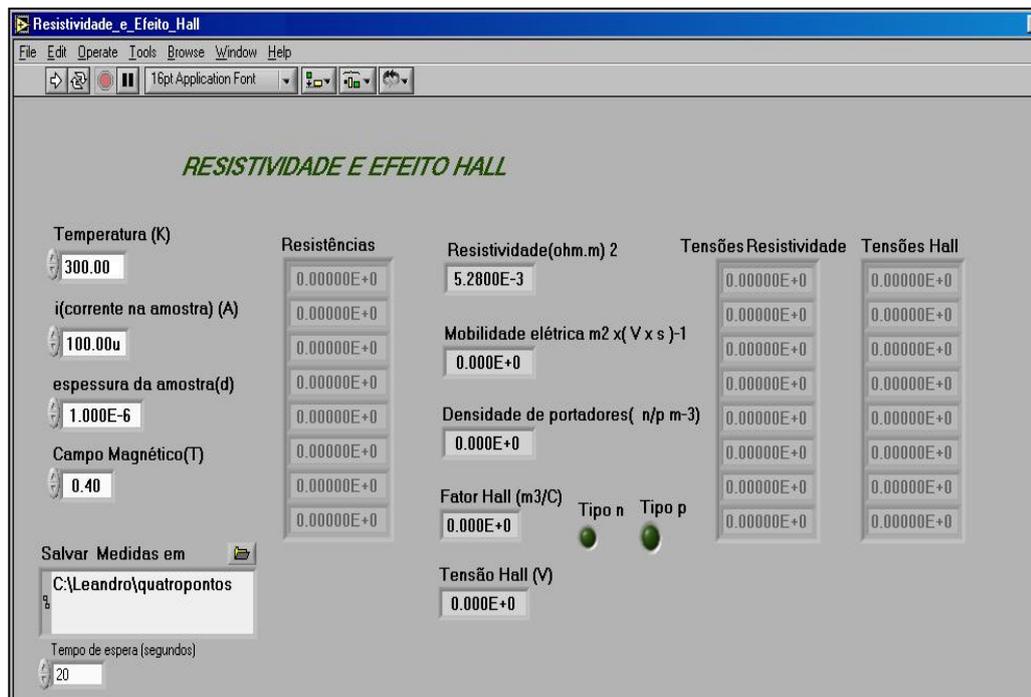


Figura 5.14 - Programa para realização da caracterização a 4 pontos.

## 5.6 - Configuração (montagem) dos experimentos

As figuras 5.15 e 5.16 apresentam de forma simplificada as configurações (montagens) experimentais utilizadas na realização de cada um dos experimentos.

### 5.6.1 - Caracterização a 2 pontos

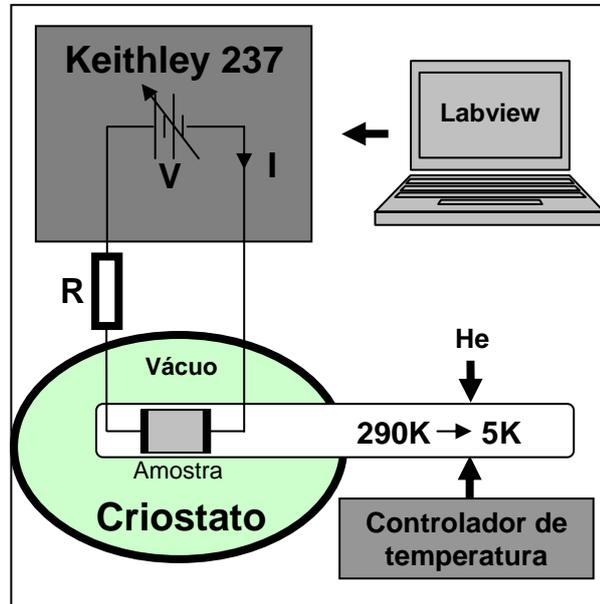


Figura 5.15 - Montagem experimental para experimentos a 2 pontos.

### 5.6.2 - Caracterização a 4 pontos

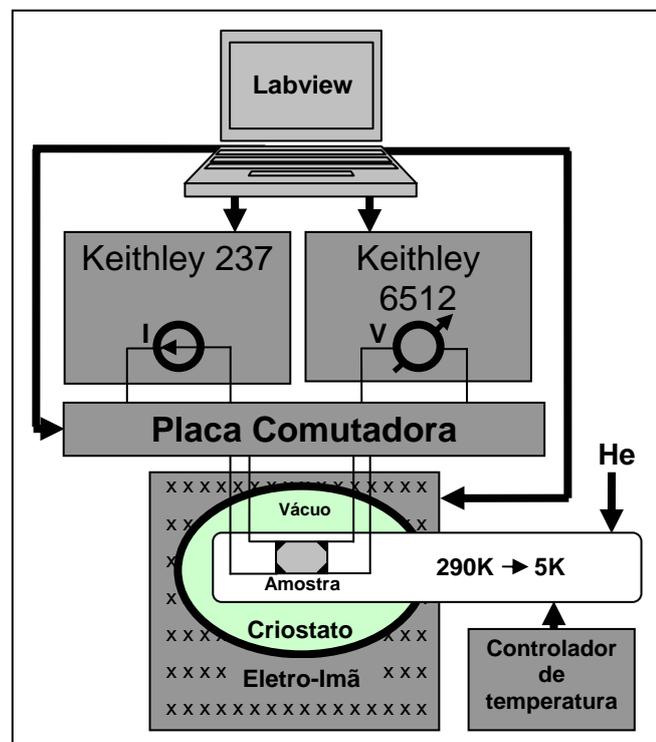


Figura 5.16 - Montagem experimental para experimentos a 4 pontos.

## Capítulo 6 - Resultados e Discussões

Conforme mencionado no capítulo anterior, foram realizadas caracterizações de 6 amostras fazendo uso dos experimentos de caracterização I(V) e de efeito Hall utilizando o método de van der Pauw. Os valores de temperatura mínima alcançada variaram um pouco a cada experimento realizado. Isto ocorreu devido principalmente a pequenas diferenças na intensidade do vácuo no interior do criostato em diferentes experimentos, pois quanto mais intenso o vácuo no interior do criostato, menores são as trocas de calor com o sistema e mais baixa é a temperatura que se pode alcançar, aproximando-se mais da temperatura do He líquido (4K). Nos experimentos mais demorados é mais difícil alcançar temperaturas muito baixas, pois mesmo com um sistema eficientemente isolado a intensidade do vácuo tende a “degradar” um pouco com o tempo. As diferenças entre as temperaturas mínimas obtidas não prejudicaram as análises a serem realizadas neste capítulo, pois os efeitos do mecanismo de espalhamento por impurezas ionizadas, que é o de maior importância nessa faixa de temperaturas, são facilmente identificados até a temperatura de 80K.

### 6.1 - Resultados da caracterização a 4 pontos

A partir deste experimento é possível, dentre outras análises, avaliar o comportamento, em função da temperatura, de 3 grandezas elétricas de grande interesse na pesquisa de estruturas semicondutoras: Resistividade, mobilidade dos portadores e concentração de portadores no material. Esses resultados são apresentados considerando o comportamento bidimensional dos portadores, ou seja, com unidades adequadas a essa interpretação. Resistividade e concentração de portadores serão analisadas apenas de forma qualitativa, servindo como grandezas auxiliares na interpretação do comportamento da mobilidade de portadores, que compõe o principal enfoque deste capítulo.

#### 6.1.1 - Resistividade

O comportamento da Resistividade Hall 2D das 6 amostras para diferentes temperaturas é ilustrado na figura 6.1. Levando em conta inicialmente os valores absolutos da resistividade observa-se uma variação de até 2 ordens de grandeza para temperaturas iguais. A tabela 6.1 apresenta alguns valores de pontos importantes para descrição das curvas de resistividade: A máxima e mínima temperaturas observadas em cada experimento,  $T_{\max}$  e  $T_{\min}$ ; os valores de resistividade registrados na máxima e na mínima temperatura registrada,  $\rho_{T_{\max}}$  e  $\rho_{T_{\min}}$ ; a mínima resistividade registrada

em cada experimento ( $\rho_{\min}$ ) e a temperatura de ocorrência desse valor de resistividade,  $T_{\rho_{\min}}$ .

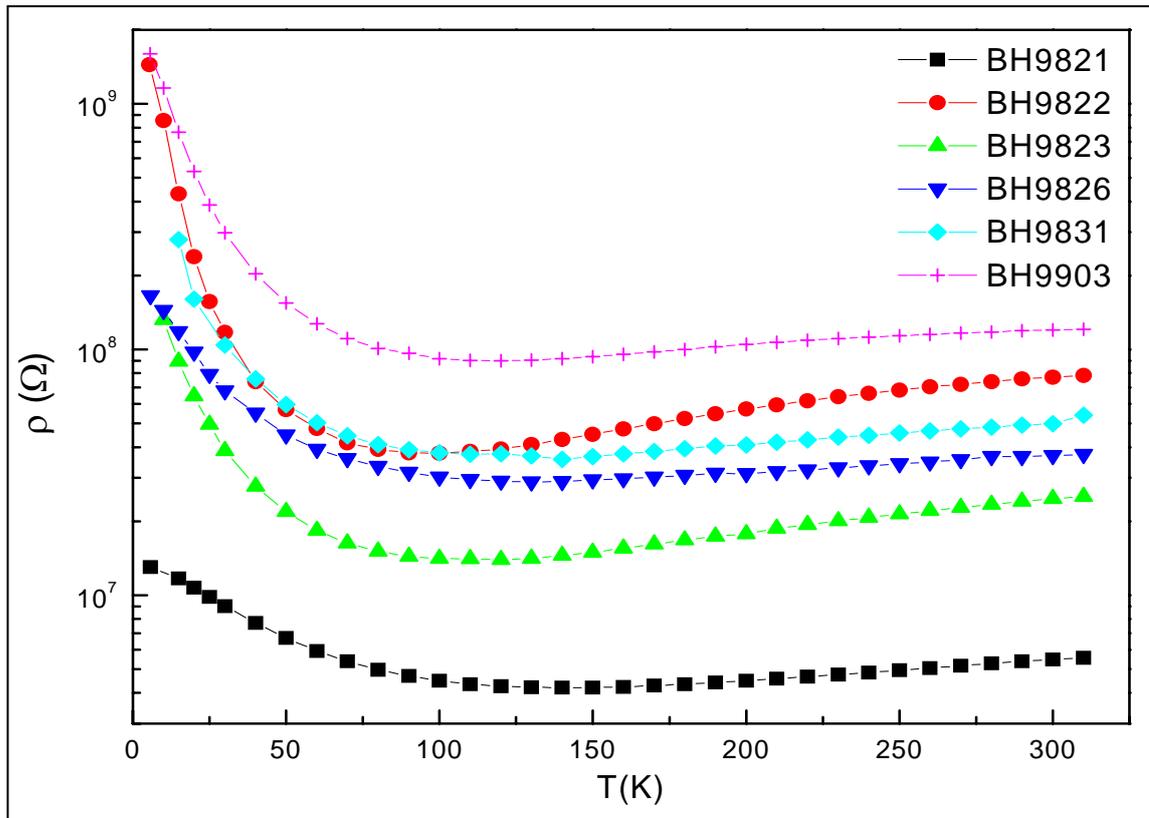


Figura 6.1 - Comportamento da resistividade 2D em com variação da temperatura.

Tabela 6.1 - Pontos característicos das curvas de resistividade.

Amostra	$T_{\min}/K$	$\rho_{T_{\max}}/\Omega$	$T_{\rho_{\min}}/K$	$\rho_{\min}/\Omega$	$T_{\max}/K$	$\rho_{T_{\max}}/\Omega$
BH9821	5,7	1,29E7	140	4,20E6	310	5,55E6
BH9822	5,4	1,44E9	100	3,78E7	310	7,83E7
BH9823	10	1,32E8	120	1,39E7	310	2,51E7
BH9826	5,7	1,66E8	130	2,89E7	310	3,74E7
BH9831	15	2,80E8	140	3,57E7	310	5,40E7
BH9903	5,6	1,60E9	120	8,99E7	310	1,21E8

Analisando a figura 6.1 verifica-se que a partir da temperatura ambiente, cerca de 300K, todas as amostras apresentam queda na resistividade com a redução da temperatura até alcançar um valor mínimo. A temperatura de ocorrência desse valor mínimo de resistividade varia de amostra para amostra, ocorrendo entre 100 e 140K, conforme registrado na tabela 6.1. Abaixo dessa temperatura a resistividade cresce consideravelmente. Em todas as amostras o maior valor de resistividade ocorreu na mais baixa temperatura registrada, apresentando tendência de crescimento para temperaturas ainda mais baixas, porém verificou-se que há uma leve tendência de redução na taxa de crescimento para temperaturas abaixo de 20K, que pode ser

explicada pela teoria que prevê o início da condução por dois canais distintos, com mobilidade e concentrações distintas [34].

As curvas da figura 6.1 são semelhantes e coerentes com os resultados apresentados nas referências para amostras similares [20], porém o valor absoluto da resistividade para diferentes amostras varia muito, tornando necessário utilizar uma escala monolog, o que dificulta a verificação de um padrão de comportamento da grandeza. A equação de Arrhenius é bastante útil neste caso, pois estabelece um modelo que relaciona a resistividade com a temperatura, possibilitando calcular a energia de ativação dos portadores em algumas faixas de temperatura:

$$\rho = \rho_0 \cdot e^{-\frac{h\nu}{k_B T}} \quad (6.1)$$

Pode-se então comparar o comportamento da resistividade de diferentes amostras por meio da análise dos valores de energia de ativação (representada pelo termo  $h\nu$ ) calculados com auxílio da equação 6.1. É importante verificar que a equação 6.1 somente é aplicável para os trechos em que o processo de linearização leva a uma reta de inclinação descendente, que neste caso é determinada por:

$$\ln(\rho) = \ln(\rho_0) - \frac{h\nu}{k_B \cdot T} \quad (6.2)$$

A figura 6.2 mostra as curvas obtidas com a equação 6.2, visando efetuar o processo de linearização descrito anteriormente.

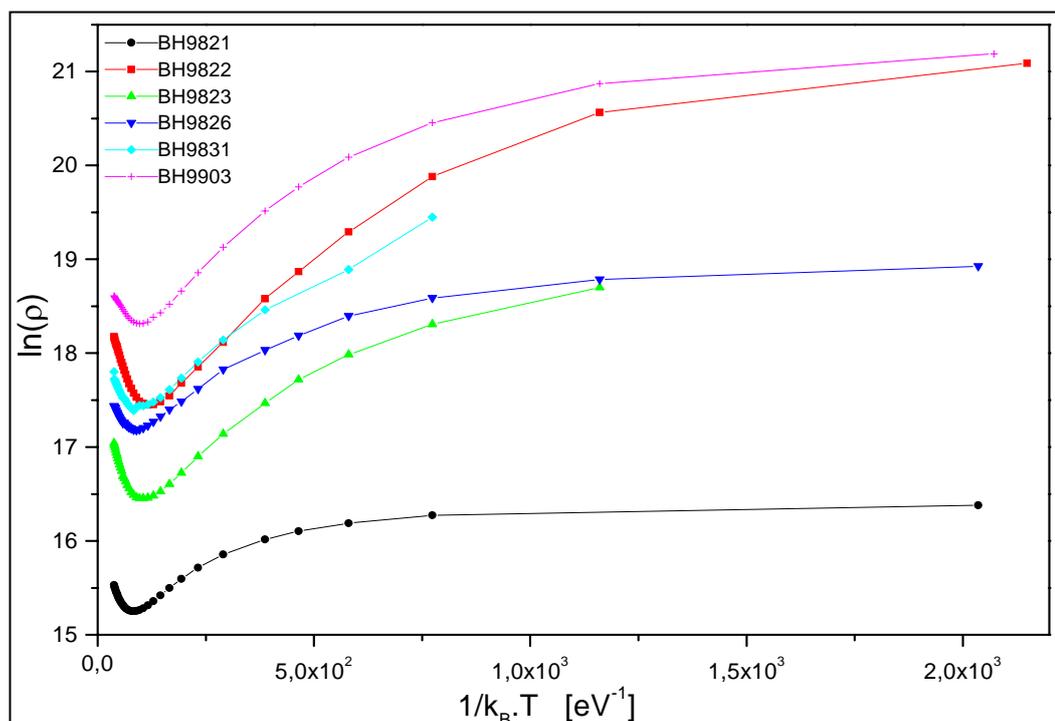


Figura 6.2 – Processo de linearização para determinação da energia de ativação.

Para realização da linearização selecionou-se, de cada curva da figura 6.2, o trecho reto descendente mais representativo, com pelo menos 3 pontos satisfatoriamente alinhados. Nas curvas da figura 6.2, esses trechos retos apresentam-se para abscissas entre 37,42 e 75,51 eV<sup>-1</sup>, correspondendo a temperaturas entre 310 e 160K, respectivamente. A tabela 6.2 apresenta os valores de energia de ativação ( $h\nu$ ) calculados a partir desse processo de linearização:

Tabela 6.2 - Energias de ativação obtidas através das curvas de resistividade

<b>Faixa de temperatura: 160K – 310K</b>		
<b>Amostra</b>	<b>Faixa de temperatura: 160K - 310K</b>	<b><math>\rho_0</math> [10<sup>6</sup>. <math>\Omega</math>]</b>
Bh9821	0,013	9,10
Bh9822	0,017	140
Bh9823	0,010	47,2
Bh9826	0,010	53,1
Bh9831	0,015	74,2
Bh9903	0,007	158

Obs.: Para todos os valores da tabela 6.2 o erro referente ao processo de linearização foi menor que o menor incremento digital.

A semelhança entre os valores de energia de ativação obtidos pela equação 6.2 evidencia que, nessa faixa de temperaturas (de 160K a 310K), os comportamentos das curvas de resistividade para diferentes amostras são similares, levando a concluir que este comportamento não é significativamente influenciado pelas diferentes condições e parâmetros de crescimento utilizados na confecção das amostras (vide tabela 5.1). As consideráveis diferenças entre os valores absolutos da resistividade para diferentes amostras se revelam através dos valores termo  $\rho_0$ , conforme a tabela 6.2. Assim, infere-se que as condições e parâmetros de crescimento podem ter influência direta sobre a intensidade da resistividade. Uma possível justificativa desse comportamento considera que os fenômenos que determinam a condução dos portadores (como espalhamentos por fônons ópticos polares, por exemplo) são tipicamente os mesmos nessa faixa de temperaturas e, por

esse motivo, verifica-se que o comportamento da resistividade pela variação da temperatura é aproximadamente o mesmo em todos os casos. Por outro lado, as diversas condições e parâmetros de crescimento utilizados na confecção das amostras resultam, por exemplo, em concentrações de pontos quânticos de formas e dimensões variadas. Os pontos quânticos comportam-se como defeitos da estrutura, gerando deformações no potencial da rede e proporcionam a ocorrência de fenômenos de espalhamento de portadores em intensidades específicas para cada amostra, que se refletem no valor absoluto da resistividade. O reconhecimento desses fenômenos exigiria uma investigação mais apurada das amostras, focada também na análise do tamanho e geometria dos pontos quânticos. Nesse trabalho a resistividade terá um papel apenas auxiliar na interpretação da mobilidade elétrica.

Para temperaturas abaixo de 160K este processo não pôde ser aplicado, sendo necessário outro meio de avaliação dos fenômenos de condução elétrica. O estudo da mobilidade elétrica foi o que se mostrou mais eficiente para descrever tais fenômenos.

### ***6.1.2 - Mobilidade***

Conforme o capítulo 4, a interpretação da mobilidade Hall em materiais semicondutores envolve modelos capazes de descrever seu comportamento em diferentes faixas de temperatura, para variados tipos de amostras, tratando os diferentes mecanismos de espalhamento que limitam a mobilidade dos portadores eletrônicos. Estes trabalhos apontam que os principais fatores de limitação da mobilidade em GaAs são os espalhamentos por fônons ópticos à médias e altas temperaturas (que neste trabalho são adotadas como aquelas superiores a 80K) e por impurezas ionizadas à baixas temperaturas. Verificou-se também que além desses dois mecanismos de espalhamento, em amostras de heteroestruturas de materiais semicondutores com comportamento 2D dos portadores, ou seja, em estruturas em que há confinamento bidimensional de portadores, os espalhamentos por fônons acústicos por potencial de deformação e piezoelétrico podem ter participação muito relevante na limitação da mobilidade elétrica. A análise realizada nessa seção faz uso dos conceitos e dos respectivos modelos que representam esses quatro mecanismos, apresentados no capítulo 4, devidamente adaptados para as condições das amostras em estudo. Esta análise visa avaliar a participação e a eficiência de cada um destes modelos na descrição do comportamento da mobilidade elétrica. A análise divide-se

em duas etapas. Na primeira, verificam-se os comportamentos (variação com a temperatura) das curvas de mobilidade em diferentes faixas de temperatura para comparação com os previstos pelos modelos, utilizados de forma independente. Na segunda, combinam-se os modelos disponíveis procurando ajustá-los às curvas de mobilidade, o que torna possível verificar o resultado da ação combinada dos diferentes mecanismos de espalhamento.

De forma análoga ao que ocorreu nas curvas de resistividade, que apresentaram os valores mais baixos para temperaturas em torno de 120K, pode-se prever por uma breve análise da equação 4.10 que as curvas de mobilidade, para semicondutores tipo n, devem apresentar seus valores máximos nessa mesma faixa intermediária de temperaturas, conforme mostra a figura 6.3. Porém, nesse caso, as temperaturas de ocorrência dos valores máximos encontram-se entre 80 e 100K.

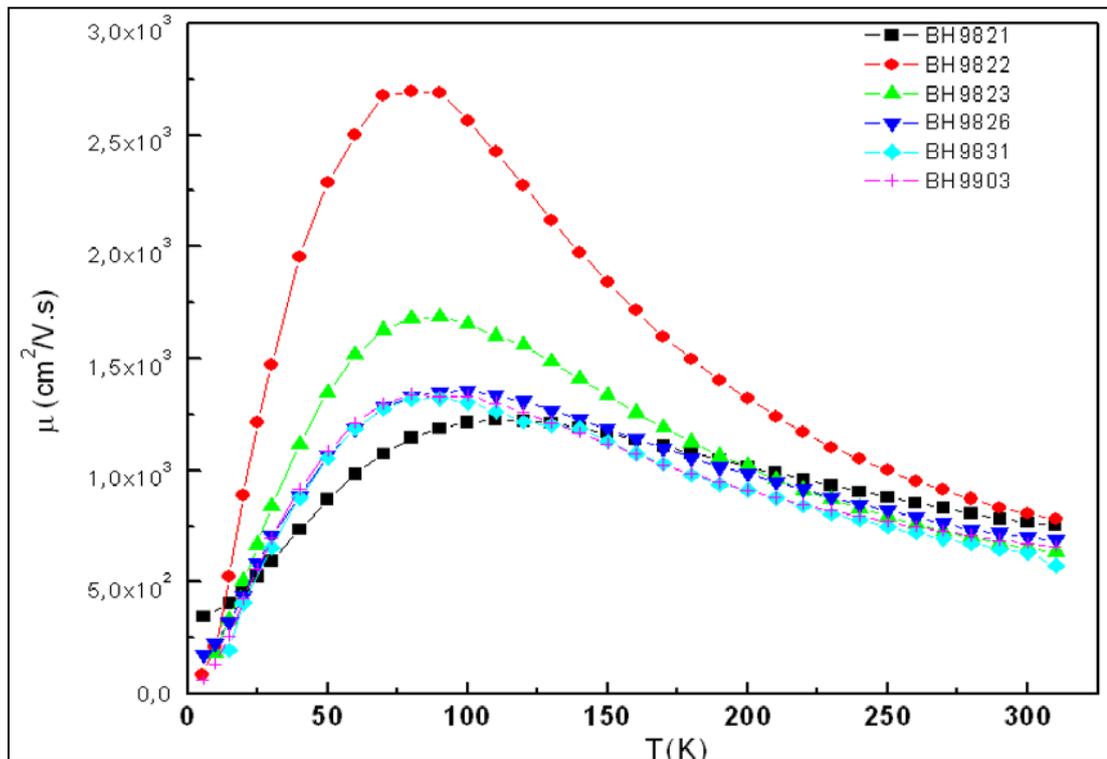


Figura 6.3 - Mobilidade elétrica dos portadores para as 6 amostras contendo pontos quânticos.

A tabela 6.2 apresenta, para efeito de comparação, alguns pontos característicos das curvas de mobilidade: A máxima e mínima temperatura observada em cada experimento,  $T_{\max}$  e  $T_{\min}$ ; os valores de mobilidade para a máxima e a mínima temperatura registradas,  $\mu_{T_{\max}}$  e  $\mu_{T_{\min}}$ ; a máxima mobilidade registrada em cada um dos experimentos,  $\mu_{\max}$  e a temperatura de ocorrência desse valor de resistividade,  $T_{\mu_{\max}}$ .

Tabela 6.3 - Pontos característicos da curva de mobilidade.

Amostra	$T_{\min}$ [K]	$\mu_{T\min}$ [cm <sup>2</sup> /V.s]	$T_{\mu_{\max}}$ [K]	$\mu_{\max}$ [cm <sup>2</sup> /V.s]	$T_{\max}$ [K]	$\mu_{T\max}$ [cm <sup>2</sup> /V.s]
BH9821	5,7	347,5	110	1226	310	753,4
BH9822	5,4	85,70	80	2694	310	782,8
BH9823	10	186,1	90	1686	310	637,0
BH9826	5,7	178,5	100	1354	310	688,4
BH9831	15	196,1	90	1322	310	574,4
BH9903	5,6	64,44	80	1338	310	659,8

É importante observar também que, sob uma análise preliminar, as curvas de mobilidade mostradas na figura 6.3 são coerentes com os parâmetros básicos utilizados no crescimento das amostras. Por exemplo, as amostras submetidas à maior temperatura de crescimento, conforme os dados da tabela 5.1, tendem a apresentar uma mobilidade maior. Isto se deve principalmente ao fato de que a incorporação de impurezas é menor para maiores temperaturas de crescimento, resultando em cristais de melhor qualidade e que, conseqüentemente, apresentam uma mobilidade maior.

Observou-se que muitos modelos usados para descrever a mobilidade  $\mu(T)$  seguem uma relação bem simples, do tipo  $\mu=AT^B$ , onde  $A$  e  $B$  são constantes a determinar. Para efeito de uma análise inicial apenas a constante  $B$  é relevante, já que seu valor exprime o tipo de dependência que a mobilidade tem em relação à temperatura. Portanto, na primeira fase da análise da mobilidade em função da temperatura, as curvas de mobilidade são traçadas em gráficos *di-log* para verificar, através da inclinação de possíveis trechos retos, o valor da constante  $B$  em cada faixa de temperaturas. A figura 6.4 apresenta a curva  $\mu \times T$  em um gráfico di-log para a amostra BH9821. Verifica-se claramente a existência de dois trechos aproximadamente retos, indicando a participação de diferentes mecanismos de espalhamento atuando de forma dominante em faixas de temperaturas distintas.

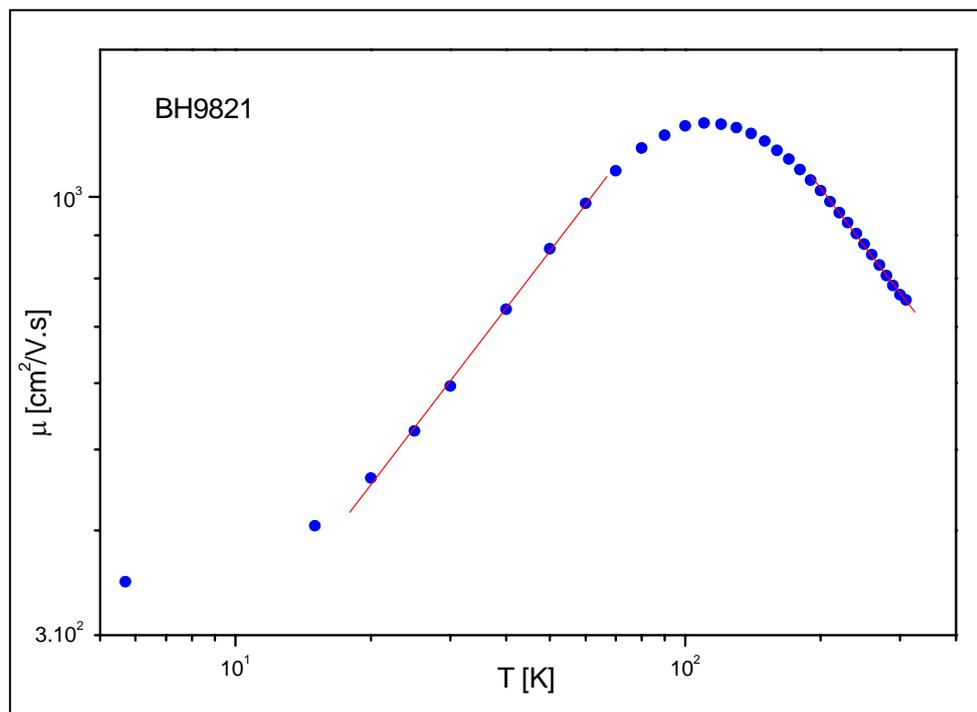


Figura 6.4 - Análise do comportamento da mobilidade da amostra BH9821

Procedimento idêntico foi realizado para as demais amostras. A tabela 6.3 apresenta os valores da constante  $B$  observados pelas inclinações dos trechos retos das curvas em gráficos di-log:

Tabela 6.4 - Valores do Parâmetro  $B$  das curvas de mobilidade para altas e baixas temperaturas.

Amostra	Trecho de baixa temperatura	Trecho de alta temperatura
BH9821	(0.747±0.020)	(-0.7076±0.0087)
BH9822	(1.49±0.12)	(-1.2047±0.0062)
BH9823	(1.377±0.027)	(-1.0587±0.0081)
BH9826	(1.164±0.031)	(-0.832±0.015)
BH9831	(1.254±0.079)	(-0.893±0.014)
BH9903	(1.518±0.065)	(-0.7236±0.0054)

Pela tabela acima se pode verificar que apenas as amostras BH9822 e BH9903 na região de baixa temperatura e a amostra BH9823 na região de alta temperatura apresentam valores do expoente  $B$  compatíveis com os mecanismos de espalhamentos inicialmente previstos para este tipo de amostra. Ou seja, na região de baixa temperatura o expoente  $B = 1,5$  pode indicar a ocorrência do espalhamento por impurezas ionizadas e na região de altas temperaturas  $B = -1$  pode ocorrer devido a espalhamento por potencial de deformação de fônons acústicos. O fato dos demais valores do expoente  $B$  serem diferentes dos inicialmente previstos para as amostras

em estudo, nas faixas de temperatura adequadas, deve-se principalmente a três fatores básicos:

- A atuação combinada de mais de um tipo de espalhamento obviamente leva a uma dependência da temperatura diferente daquela verificada nos modelos observados de forma independente. Neste caso, o efeito resultante deve ser calculado pela aplicação da equação 4.42.
- A presença de mecanismos de espalhamentos diferentes daqueles inicialmente previstos, gerando uma dependência com a temperatura diferente daquelas adotadas, que se referem aos mecanismos que normalmente tem maior influência sobre a mobilidade neste tipo de amostras. Por exemplo, a ocorrência de discordâncias pode afetar consideravelmente a mobilidade, embora não tenha sido considerada neste trabalho.
- O fato de, para alguns dos mecanismos de espalhamento considerados, a mobilidade apresentar uma variação com a temperatura diferente de  $\mu = AT^B$ , como acontece no espalhamento por fônons ópticos polares.

Uma abordagem mais adequada para este tipo de problema consiste em selecionar um grupo de modelos que representem os fenômenos que comumente ocorrem neste tipo de amostras, combiná-los e tentar ajustá-los às curvas de mobilidade. Dessa forma, na segunda fase da análise do comportamento da mobilidade elétrica serão geradas curvas de mobilidade construídas com base nos modelos selecionados, que serão comparadas àquelas medidas experimentalmente. Para isso apresenta-se a descrição dos cálculos realizados na obtenção das curvas de mobilidade geradas pelos modelos:

#### 6.1.2.1 - Impurezas ionizadas <sup>[12, 19]</sup>

Com base na expressão para o tempo de relaxação referente a este mecanismo, apresentada no capítulo 4, a respectiva curva de mobilidade pode ser obtida por:

$$\mu_{ii} = 10000 \frac{e}{m^*} \left[ \frac{0,414 \varepsilon_s^2 T^{3/2}}{Z^2 N_{ii} g(n^*, T, x)} \left( \frac{m^*}{m_o} \right)^{1/2} \right] \quad (6.3)$$

$$g(n^*, T, x) = \ln(1+b) - \frac{b}{(1+b)} \quad \text{e} \quad b = 4,31 \times 10^{13} \frac{\varepsilon_s T^2}{n^*} \left( \frac{m^*}{m_o} \right) x$$

O termo entre colchetes na equação 6.1 é tempo de relaxação definido por C.M. Wolfe <sup>[19]</sup> para o fenômeno de espalhamento por impurezas ionizadas. As outras duas expressões são as mesmas apresentadas no capítulo 4, equações 4.44 e 4.45. A expressão 6.1 foi ajustada para fornecer a mobilidade em cm<sup>2</sup>/V.s. na realização dos cálculos utilizou-se os seguintes considerações:

- $T$  é a temperatura fornecida em K.
- $m^* = 0,025m_0$  é a massa efetiva do InAs e  $m_0 = 9,109 \times 10^{-31}$  kg.
- $Z$  é o estado de carga das impurezas e seu valor foi adotado como sendo 1.

$N_{ii}$  é um parâmetro ajustável que fornece a concentração de impurezas ionizadas em cm<sup>-3</sup>. Nas amostras com heteroestruturas de InAs/GaAs os portadores apresentam um comportamento de gás bidimensional de elétrons, o que exige uma adequação posterior deste valor para obtenção da concentração de impurezas equivalente 2D. Para isso basta calcular  $N_{ii\_2D} = (N_{ii})^{2/3}$ .

- $n^*$  é a concentração efetiva de portadores, em cm<sup>-3</sup>, se for considerado o efeito do fenômeno de blindagem, brevemente descrito no capítulo 4. Como este efeito também foi desprezado, neste trabalho foi utilizado o valor da concentração de portadores obtida da caracterização Hall. Analogamente ao caso anterior, o valor a ser utilizado no cálculo será  $n^* = (n_{2D})^{3/2}$ , onde  $n_{2D}$  é a concentração de portadores obtida na caracterização Hall, em cm<sup>-2</sup>.

$\epsilon_S$  é a constante dielétrica relativa no caso estático e vale 14,54 para o InAs.

#### 6.1.2.2 - Deformação de Potencial de fônons acústicos <sup>[15, 16, 18, 19]</sup>

$$\mu_A = 10000 \frac{e}{m^*} \left[ \frac{(\hbar^3 \rho b u_l^2) I_A(\gamma_l)}{e^2 m^* kT} \right] \quad (6.2)$$

Assim como no caso de impurezas ionizadas, a expressão da mobilidade limitada pelo espalhamento por deformação de potencial de fônons acústicos (equação 6.2) foi adaptada para fornecer a mobilidade em cm<sup>2</sup>/V.s.

- $I_A(\gamma_l)$  é um fator de correção que pode ser calculado pela expressão 4.54, transcrita abaixo:

$$I_A(\gamma) = \frac{2\gamma_l}{\pi} \int_0^{\pi/2} \left( \frac{2}{e^{\gamma_l \sin \theta} - 1} \right) \sin^3 \theta d\theta$$

$$\text{onde } \gamma_l = \frac{2\hbar u_l q_F}{kT} \text{ e } q_F = (2\pi m_{s0})^{1/2}$$

Esta expressão deve ser resolvida numericamente. Na prática, para os valores obtidos neste experimento,  $I_A(\gamma_l)$  varia muito pouco e seu valor pode ser adotado como sendo sempre igual a 1, já que a maior diferença encontrada ocorre quando  $I_A(\gamma_l) = 0,998$ .

- $e = 1,60218 \times 10^{-19}$  C é a carga do elétron.

$K = 1,3807 \times 10^{-23}$  J/K é a constante de Boltzmann.

$e_A = 11,5$  eV =  $1,84251 \times 10^{-18}$  J é o potencial de deformação acústica do InAs.

- $\leq 1,0546 \times 10^{-34}$  J.s.

- $\rho = 5,36 \times 10^{-3}$  kg/cm<sup>3</sup> é a massa específica do InAs.

$b = 5,337 \times 10^{-8}$  cm é a espessura efetiva do gás bidimensional de elétrons. Nas amostras em questão considera-se que a superrede forma poços de potencial aproximadamente quadrados. Portanto, este parâmetro foi considerado como sendo igual à espessura da camada de InAs.

- $u_l = 5,24 \times 10^5$  cm/s e  $u_t = 3,07 \times 10^5$  cm/s são respectivamente as velocidades longitudinal e transversal dos fônons acústicos no InAs, ou componente longitudinal e componente transversal da velocidade do som neste material.

### 6.1.2.3 - Fônons Acústicos Piezoelétricos <sup>[15,16, 18, 19]</sup>

$$\mu_{PE} = 10000 \frac{e}{m^*} \left[ \frac{\tau_A \cdot \pi \cdot q \cdot e_A}{b \cdot e \cdot h_{14}^2 \left[ \frac{9}{32} + \frac{13}{32} \left( \frac{u_l}{u_t} \right)^2 \frac{I_A(\gamma_t)}{I_A(\gamma_l)} \right]} \right] \quad (6.3)$$

A expressão acima fornece a mobilidade limitada pelo espalhamento por fônons acústicos piezoelétricos, também em cm<sup>2</sup>/V.s.

- $I_A(\gamma_l)$  é o valor da integral  $I_A(\gamma)$  calculado utilizando a velocidade transversal  $u_t$  ao invés da longitudinal  $u_l$ . Neste caso, assim como ocorre anteriormente, o valor  $I_A(\gamma_l)$  é sempre muito próximo de 1 e a razão  $I_A(\gamma_t)/I_A(\gamma_l)$  também.

- $\tau_A$  é o tempo de relaxação do espalhamento por potencial de deformação de fônons acústicos, calculado através do termo entre colchetes da equação 6.2.

- $q$  é o vetor de onda bidimensional calculado por  $q = (2\pi n)^{1/2}$  e  $n$  a concentração bidimensional de portadores em  $\text{cm}^{-2}$ .
- $h_{14} = 3,5 \times 10^6 \text{ V/cm}$  é a constante piezoelétrica do InAs.

#### 6.1.2.4 - Fônons Ópticos Polares <sup>[13,19]</sup>

A mobilidade limitada por fônons ópticos polares foi calculada com base no trabalho de A. Fortini, D. Diguët e J. Lugand <sup>[13]</sup>, que obtém a seguinte expressão para o cálculo da mobilidade limitada pelo espalhamento por fônons ópticos polares, em  $\text{cm}^2/\text{V.s}$ :

$$\mu_{po} = 233T^{1/2} (e^{\xi_l} - 1) G(\xi_l) \quad (6.4)$$

$$\text{onde } \xi_l = \theta / T$$

$\theta = (\leq \omega_l)/k = 352,311\text{K}$  e  $\omega_l$  é a frequência dos fônons ópticos longitudinais no InAs.

$$G(\xi_l) \text{ é o resultado da integração numérica da função } G(\xi_l) = \int_0^\infty \gamma(\xi, \xi_l) \xi d\xi$$

Os autores do modelo calcularam a função  $G(\xi_l)$  numericamente, tabelando seus valores como função do parâmetro  $\xi_l$  para temperaturas entre 78,3K e 1761,6K. Assim, à partir destes valores tabelados foi possível gerar um polinômio capaz de fornecer o valor de  $G(\xi_l)$ , conforme segue:

$$G(\xi_l) = 0,96541 - 0,75208\xi_l + 0,61498\xi_l^2 - 0,17563\xi_l^3 + 0,02577\xi_l^4 - 0,00168\xi_l^5 + 1,41877 \cdot 10^{-5} \xi_l^6 \quad (6.5)$$

Finalmente, simplificando a equação 6.4 para o caso do InAs, obtêm-se:

$$\mu_{po} = 23,645976 * T^{1/2} * (e^{\xi_l} - 1) * G(\xi_l) \quad (6.6).$$

É importante observar novamente que a equação 6.6 só permite calcular a mobilidade limitada pelo espalhamento por fônons ópticos polares para temperaturas entre 78,3K e 1761,6K.

#### 6.1.2.5 - Combinação dos modelos de mobilidade <sup>[19, 28, 29]</sup>

Conforme o capítulo 4, para uma adequada interpretação do comportamento da mobilidade é necessário considerar a combinação dos efeitos de espalhamento, o que pode ser feito utilizando a equação 4.42:

$$\frac{1}{\mu_t} = \sum_i \frac{1}{\mu_i}$$

Os resultados da equação acima, calculados para cada temperatura, compõem a curva de mobilidade total  $\mu_t$ . Devido à impossibilidade de obtenção de valores de alguns dos modelos em determinadas faixas de temperatura, como ocorre para fônons ópticos polares,  $\mu_t$  pode apresentar comportamentos indesejáveis (descontinuidades) que não são relevantes nesse trabalho. As figuras 6.5 a 6.10 apresentam, para cada uma das amostras caracterizadas, as curvas de mobilidade Hall e curvas das mobilidades calculadas por cada um dos mecanismos de espalhamento considerados e a da mobilidade resultante obtida através da expressão 4.42.

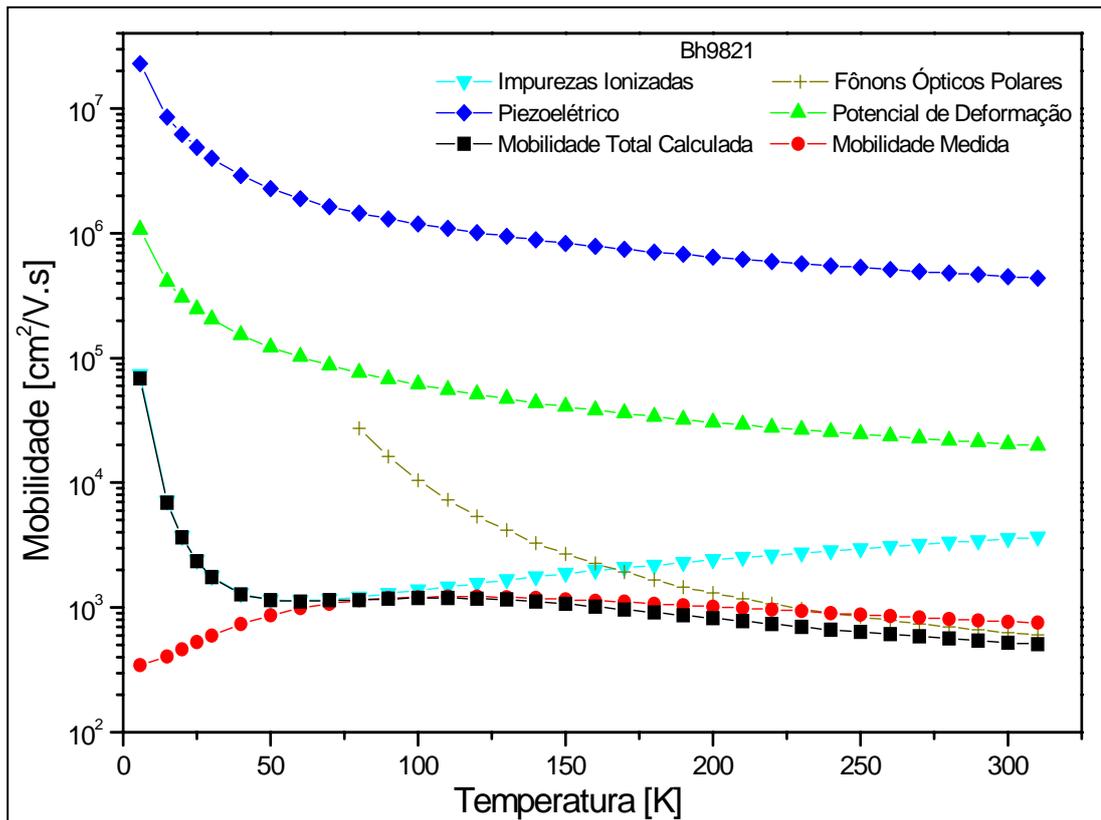


Figura 6.5 - Aplicação dos modelos de espalhamento à amostra BH9821

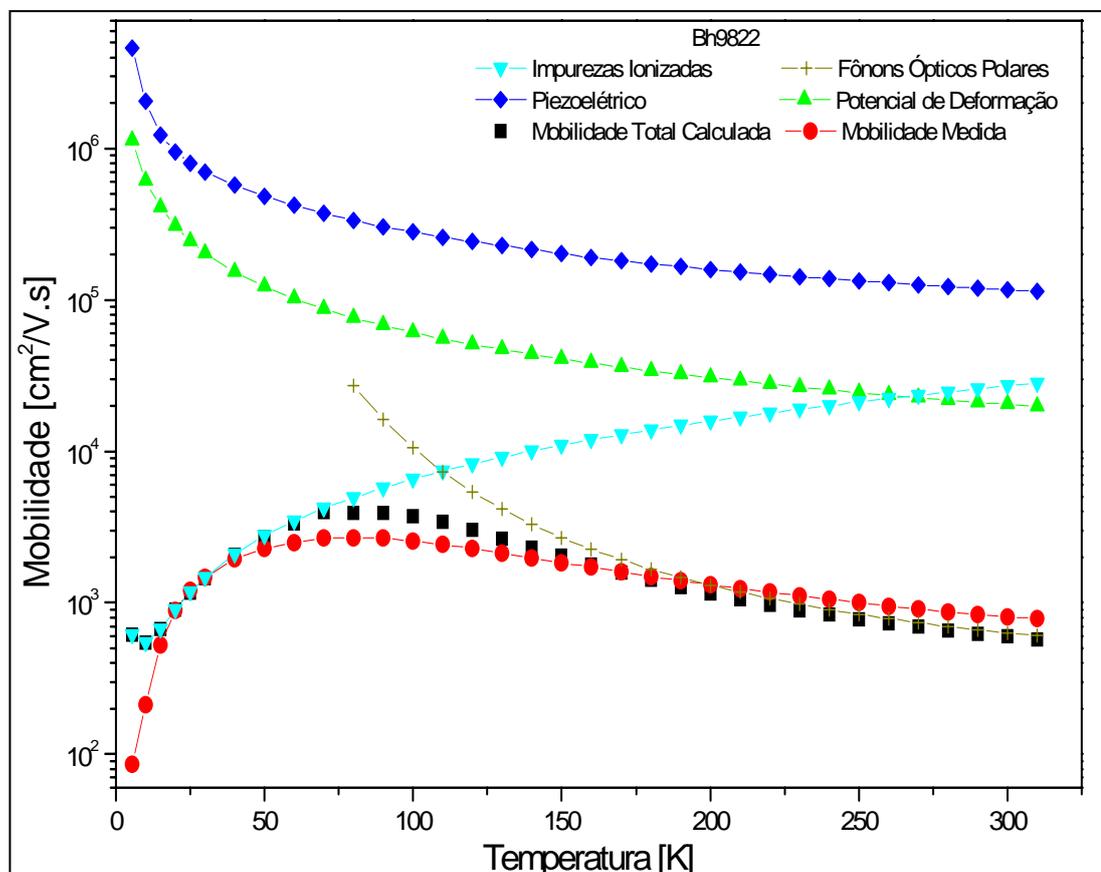


Figura 6.6 - Aplicação dos modelos de espalhamento à amostra BH9822

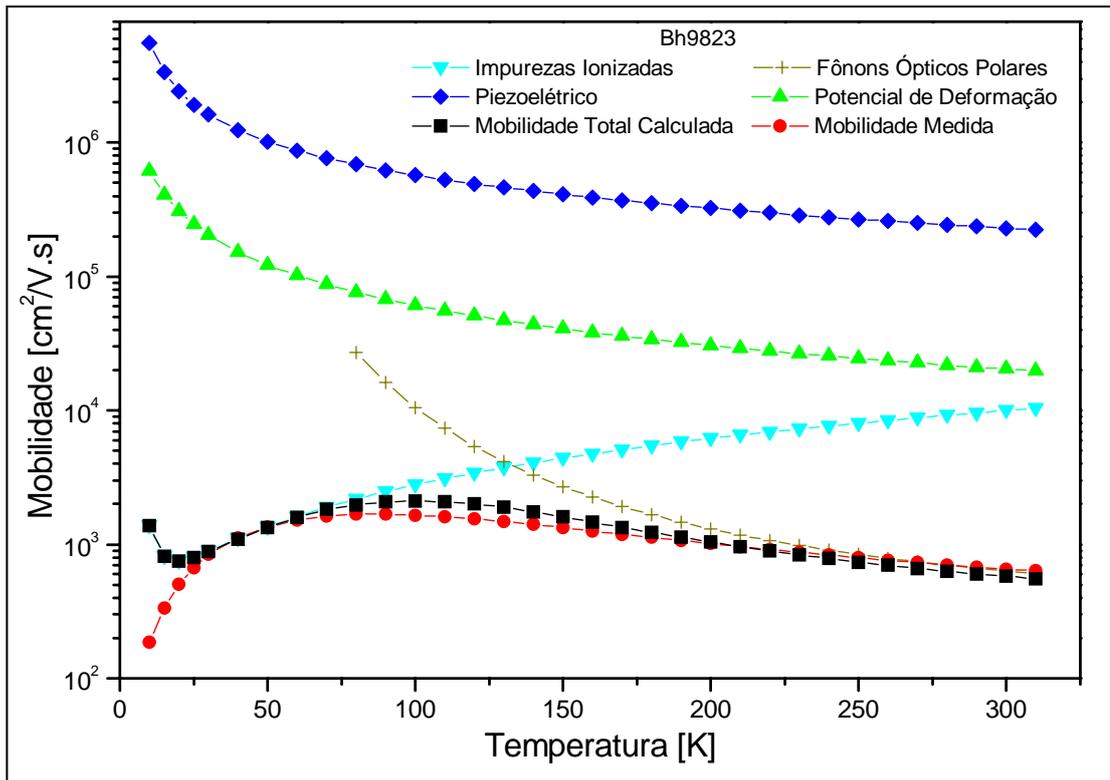


Figura 6.7 - Aplicação dos modelos de espalhamento à amostra BH9823

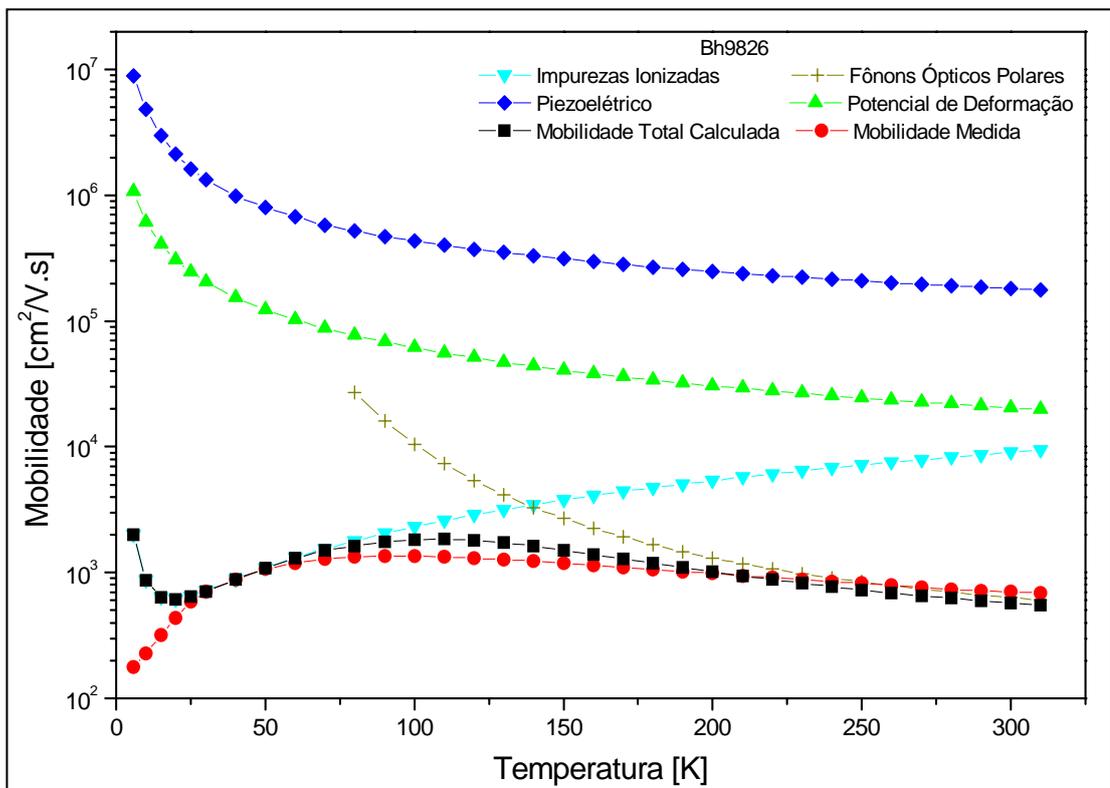


Figura 6.8 - Aplicação dos modelos de espalhamento à amostra BH9826

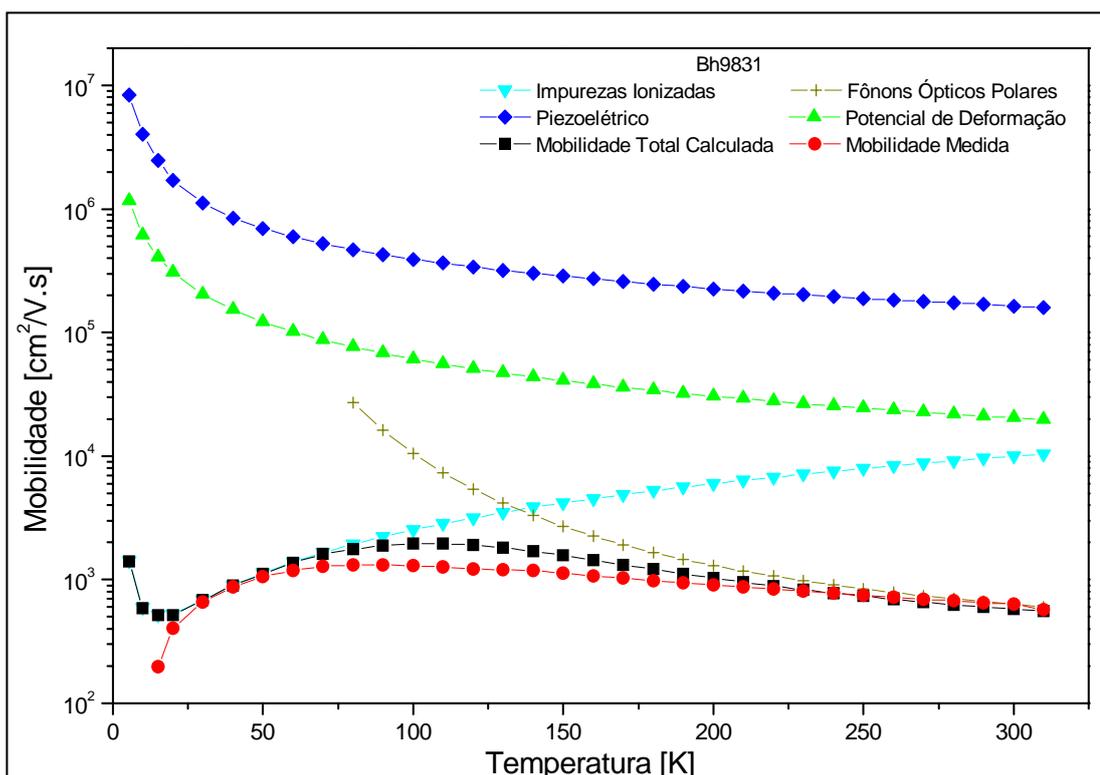


Figura 6.9 - Aplicação dos modelos de espalhamento à amostra BH9831

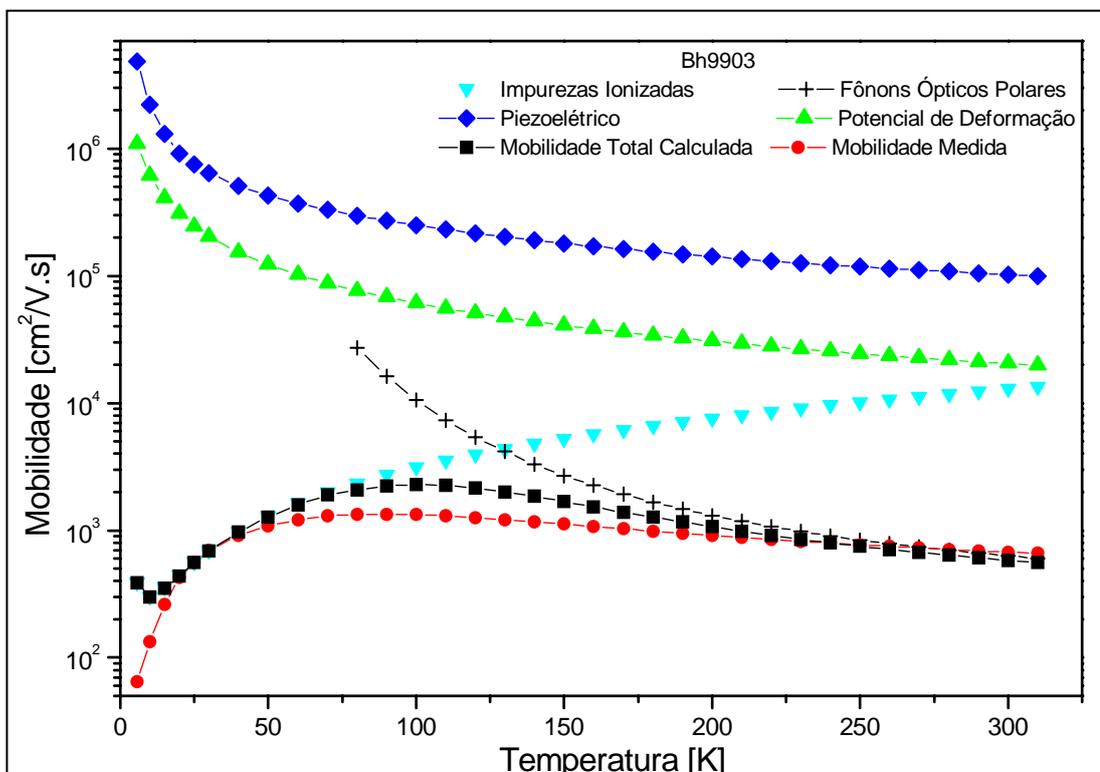


Figura 6.10 - Aplicação dos modelos de espalhamento à amostra BH9903

Observa-se que para baixas temperaturas o comportamento das curvas de mobilidade calculadas deve-se quase exclusivamente ao espalhamento por impurezas ionizadas e para as maiores temperaturas o mecanismo predominante é o de fônons ópticos polares, enquanto os espalhamentos por fônons acústicos apresentaram participação pouco significativa. Com exceção de alguns trechos em especial, as curvas geradas pelos modelos mostram-se razoavelmente eficientes para descrever a mobilidade medida experimentalmente: Na amostra BH9821, todo o intervalo com temperaturas inferiores a 80K tem um comportamento diferente daquele previsto pelos modelos. Observa-se claramente que o modelo de espalhamento por impurezas ionizadas não foi eficiente para representar o comportamento dessa amostra nessa faixa de temperaturas, pois a mobilidade medida continua a cair enquanto a prevista pelos modelos apresenta acentuado crescimento. Nas demais amostras, as curvas obtidas pelos modelos só começam a apresentar um comportamento diferente do obtido experimentalmente para temperaturas abaixo de 25K. Para efeito de análise, será inicialmente desconsiderado o trecho em que a mobilidade apresenta crescimento acentuado. Este comportamento a baixas temperaturas deve-se provavelmente ao transporte de portadores através de dois canais de condução, cada um com mobilidade e concentração de portadores específica, conforme descrito no trabalho de Correa F, JA *et al* <sup>[34]</sup>, e que não é previsto pelos modelos utilizados neste trabalho. A afirmativa de que no restante da curva os modelos representam satisfatoriamente os valores de mobilidade medida é reforçada por dois aspectos em especial:

- Três dos quatro modelos utilizados não apresentam nenhum parâmetro ajustável, fazendo uso somente de valores de algumas propriedades do material e de características construtivas das amostras. Então, se forem consideradas as incertezas e pequenas aproximações inerentes às atividades que envolvem processos experimentais, avalia-se que os modelos levaram a valores satisfatoriamente próximos daqueles obtidos experimentalmente. As regiões de ocorrência dos maiores desvios em relação às curvas experimentais são bastante diversificadas. Em geral, na região de temperaturas intermediárias, em torno do maior valor de mobilidade medido experimentalmente, e nos trechos de temperaturas mais altas encontram-se os desvios mais acentuados.

- Deseja-se verificar prioritariamente o comportamento das curvas, e não necessariamente o seu valor absoluto. Por este motivo, não é grande a exigência quanto aos desvios observados entre resultados experimentais e os dos modelos.

Mesmo considerando os fatores expostos acima é conveniente apresentar a tabela 6.4, que expõe os valores dos desvios absolutos e relativos das mobilidades para dois pontos característicos de cada uma das curvas. Estes desvios são tomados em relação aos valores das curvas obtidas experimentalmente. É importante observar que em quase todas as curvas estes foram os maiores valores de desvios observados no ajustes. Conforme os aspectos mencionados anteriormente, a ocorrência de desvios relativos de quase 55% não compromete os resultados obtidos.

Tabela 6.5 - Desvios entre as curvas de mobilidade medida e calculada.

Amostra	T [K]	$\mu_{medida}$ [cm <sup>2</sup> /V.s]	$\mu_{modelo}$ [cm <sup>2</sup> /V.s]	$\Delta\mu_{abs}$ [cm <sup>2</sup> /V.s]	$\Delta\mu_{rel}$ [%]
BH9821	110	1226	1194	-32,0	-2,61
	310	753,4	505,2	-248,2	-32,9
BH9822	80	2694	3937	1243	46,1
	310	782,8	572,3	-210,5	-26,9
BH9823	90	1686	2071	385	22,8
	310	637,0	554,8	-82,2	-12,9
BH9826	100	1354	1831	477	35,2
	310	688,4	550,9	-137,5	-20,0
BH9831	90	1322	1896	574	43,4
	310	574,4	554,0	-20,4	-3,55
BH9903	80	1338	2073	735	54,9
	310	659,8	559,3	-100,5	-15,2

Uma breve análise das curvas de mobilidade e dos desvios apresentados na tabela 6.4 indica que:

- A combinação dos modelos utilizados subestima o efeito dos fenômenos de espalhamento na região em que se observam os maiores valores de mobilidade, pois nessa faixa de temperaturas as mobilidades calculadas quase sempre apresentam valores superiores às obtidas experimentalmente. A origem dessas diferenças pode ser a existência de outros tipos de espalhamentos atuando nessa faixa de temperaturas ou à transições de populações de portadores entre sub-bandas se considerada a hipótese do transporte de portadores através de dois canais de condução, conforme descrito por Correa F, JA *et al* <sup>[34]</sup>.

- Contrariamente ao caso anterior, os efeitos dos fenômenos de espalhamento que ocorrem quando se aproxima da temperatura ambiente são menos intensos do que os previstos pelos modelos, pois a mobilidade medida apresenta-se sempre superior à calculada nessa faixa de temperaturas.

Alguns fatores que possivelmente afetaram a eficiência dos modelos na representação das mobilidades medidas são os seguintes:

- Não utilização de outros mecanismos de espalhamento que sejam significativamente atuantes, ou a falta de modelos mais adequados para descrever os mecanismos de espalhamento já utilizados neste trabalho. A consideração de outros mecanismos implicaria numa investigação específica para cada um deles visando encontrar o conjunto de modelos que, baseado em hipóteses físicas à respeito da construção das amostras e das características dos materiais que as compõem, possa representar a mobilidade obtida de forma mais eficiente possível. Poderia, por exemplo, ser avaliada a influência de possíveis discordâncias presentes no material. Isto pode constituir objeto de trabalhos futuros.
- Especificamente neste trabalho: a limitação do modelo de fônons ópticos polares em poder representar a mobilidade apenas em temperaturas superiores a 78,3K.
- A presença de estruturas que têm influência marcante no comportamento elétrico, como é o caso dos pontos quânticos, que atuam como defeitos da estrutura do material e, portanto, causam deformações no potencial de rede, que podem ocasionar espalhamentos adicionais.

#### *6.1.2.6 - Participação das impurezas ionizadas*

O mecanismo de espalhamento teoricamente <sup>[14, 19]</sup> mais atuante a baixas temperaturas é o de impurezas ionizadas. Dentre os modelos utilizados neste trabalho, é o único que apresenta parâmetro ajustável. A realização deste ajuste e conseqüente obtenção de um valor para a concentração de impurezas ionizadas fornecem uma boa estimativa da quantidade de partículas dessa natureza efetivamente envolvidas nos fenômenos de espalhamento. Assim, a tabela 6.5 apresenta os valores de concentração de impurezas ionizadas considerando os parâmetros que conferiam o melhor ajuste das curvas de mobilidade calculada.

Tabela 6.5 - Concentração 2D de impurezas ionizadas.

	<b>BH9821</b>	<b>BH9822</b>	<b>BH9823</b>	<b>BH9826</b>	<b>BH9831</b>	<b>BH9903</b>
$N_{ii} / \text{cm}^{-2}$	$1,2 \times 10^9$	$1,9 \times 10^8$	$4,5 \times 10^8$	$4,4 \times 10^8$	$4,0 \times 10^8$	$3,0 \times 10^8$

É importante observar sobre os valores acima que provavelmente apenas a ordem de grandeza da concentração de impurezas calculada seja seguramente relevante, já que as curvas apresentam um ajuste muito bom em mais de uma posição relativamente às curvas experimentais. A amostra BH9821 não apresentou um ajuste satisfatório à baixas temperaturas e, portanto, o valor de concentração de impurezas para esta amostra seguramente apresenta uma carga maior de erro em relação aos demais. Como esta amostra não possui pontos quânticos, por não possuir nenhuma multicamada de InAs/GaAs, este comportamento certamente se deve ao transporte de portadores através de dois canais de condução<sup>[34]</sup> que, neste caso, parece à ação de outros mecanismos de espalhamentos não previsto pelos modelos ou ao transporte de portadores através de dois canais de condução<sup>[34]</sup>.

### 6.1.3 – Concentração de portadores

Inicialmente informa-se que em todo o experimento a concentração de portadores indicou concentrações de elétrons, ou seja, todas as amostras caracterizadas mostraram ser do tipo n nas condições do experimento.

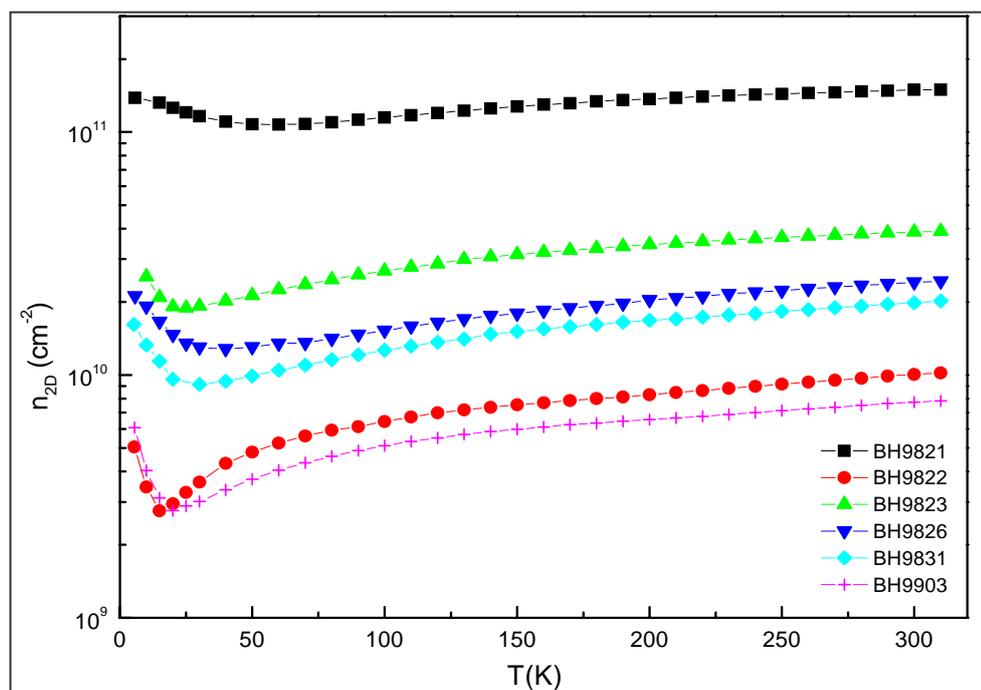


Figura 6.11 - Concentração 2D de portadores das amostras de InAs/GaAs.

O resultado obtido via efeito Hall pode ser observado na figura 6.11, que exhibe as curvas de concentração de portadores em função da temperatura para cada uma das amostras caracterizadas.

A diferença entre os valores de concentração de portadores observados para diferentes amostras à mesma temperatura é considerável, chegando a quase 2 ordens de grandeza ( $10^9$  a  $10^{11}$   $\text{cm}^{-2}$ ). Em todas as curvas a redução da temperatura causa uma queda suave na concentração de portadores até alcançar um valor mínimo (entre 15K e 60K), a partir do qual ocorre um aumento acentuado da concentração de portadores com pequenas variações de temperatura, contrariando a tendência de queda inicial. Este comportamento mostrou-se como o principal responsável pela inconsistência dos modelos de mobilidade com os resultados experimentais à baixas temperaturas. Por uma breve análise dos modelos é fácil verificar que a mobilidade calculada sofre uma influência importante da concentração de portadores medida no experimento, pois o modelo de espalhamento por impurezas ionizadas (que é o principal à baixas temperaturas) utiliza essa concentração de portadores nos cálculos, conforme a equação 6.3. Assim, o fenômeno que causa a deflexão nas curvas de concentração de portadores à baixas temperaturas também influencia diretamente a mobilidade calculada pelos modelos de espalhamento deste trabalho. A mais provável explicação para o aumento da concentração de portadores com a redução da temperatura considera um modelo com dois canais de condução (duas sub-bandas) onde os portadores apresentam mobilidades diferentes, descrito por Correa F, JA *et al* <sup>[34]</sup>. Segundo esse modelo, pode ocorrer uma redistribuição das populações de portadores das duas sub-bandas com a mudança da excitação térmica. Assim, com a redução da temperatura, a população de portadores da sub-banda fundamental aumenta enquanto a da sub-banda de estados excitados diminui. Esta transição é tal que a população total de portadores tende a aumentar com a redução da temperatura. A mudança de comportamento observada nas curvas da figura 6.11 ocorre em função desta transição com aumento da população total de portadores do sistema.

Diferente do que ocorre para a concentração de portadores, o comportamento da mobilidade e o da resistividade não apresentam mudanças tão acentuadas em nenhuma das amostras. Então, nessa faixa de temperaturas, a transição das populações de portadores nas sub-bandas influencia de forma marcante a

concentração de portadores sem, no entanto, causar alterações significativas no comportamento da resistividade e da mobilidade elétrica.

## 6.2 Resultados da Caracterização $I(V)$ e $I(t)$

A caracterização  $I(V)$  constituiu um experimento complementar, visando identificar comportamentos não lineares que podem ocorrer nas propriedades elétricas de amostras com heteroestruturas semicondutoras, como as de superredes de InAs/GaAs contendo pontos quânticos utilizadas neste trabalho. Uma análise completa destes comportamentos demandaria uma pesquisa bastante abrangente sobre os mecanismos que regem cada um destes fenômenos e também uma montagem experimental capaz de eliminar por completo os efeitos de ruídos de baixa frequência. Por estes motivos, de posse dos resultados das primeiras caracterizações elétricas, optou-se por apresentar apenas alguns resultados da caracterização  $I(V)$ , identificando a presença de efeitos não lineares típicos e concentrar mais esforços na interpretação dos resultados de mobilidade Hall. Assim, os resultados da caracterização  $I(V)$  serviram como motivação inicial para o estudo de fenômenos que serão abordados em trabalhos futuros. Desejava-se verificar a presença de dois tipos principais de comportamentos não lineares:

- Regiões com condutividade diferencial negativa.
- Oscilações de baixa frequência na corrente que atravessa a amostra.

Embora seja possível realizar um experimento específico para estudar este segundo comportamento, conforme procedimento exposto no capítulo 5, obtendo curvas  $I(t)$  que possibilitariam identificar as frequências de oscilação da corrente elétrica que atravessa a amostra, isto não foi feito por não se dispor de uma montagem capaz de eliminar eficientemente os efeitos de ruídos de baixa frequência, principalmente em torno de 60Hz. Estes ruídos são relevantes em função da intensidade extremamente baixa das correntes registradas. Realizou-se então, apenas a caracterização  $I(V)$  que também é capaz de mostrar a presença de tendências oscilatórias da corrente nas amostras. Com isso obtêve-se também uma situação mais econômica em termos de recursos disponíveis em laboratório, entre eles, a utilização de He líquido nos experimentos. O experimento para realização das caracterizações  $I(V)$  seguiu o procedimento descrito no capítulo 5, variando a temperatura da

amostra e submetendo-a a diferentes condições de iluminação com um LED infravermelho (escuro, 5mA e 20mA de corrente no LED).

Das curvas registradas podemos destacar 6, apresentadas nas figuras 6.12 e 6.13, que apresentaram ambos os comportamentos não-lineares citados anteriormente e que resultaram da caracterização I(V) da amostra BH9830. A abscissa destes gráficos corresponde a uma aproximação do campo elétrico na amostra, ou seja, à razão entre a tensão aplicada  $V$  e a distância entre contatos,  $L=0,06\text{cm}$ .

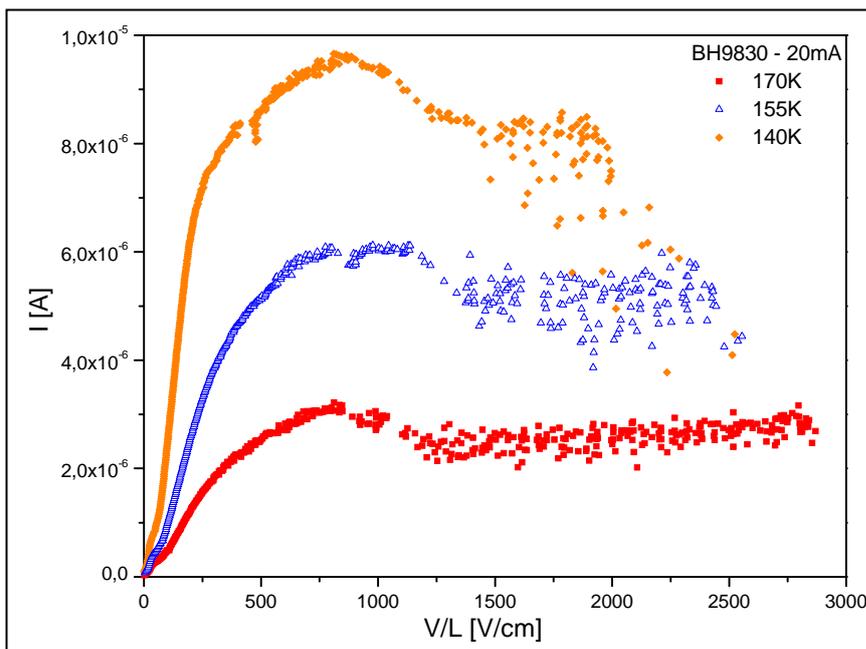


Figura 6.12 – Caracterização I(V) da amostra BH9830 com iluminação a 20mA de corrente no LED.

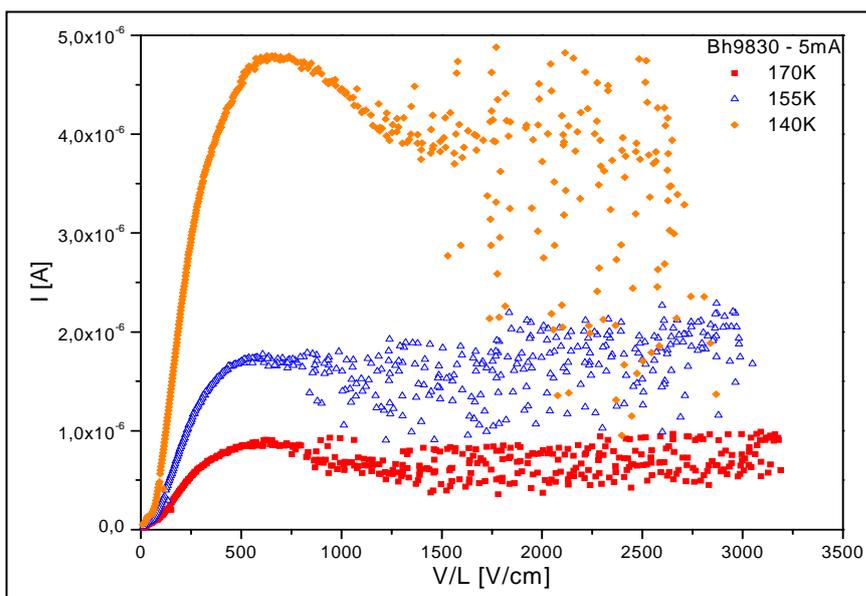


Figura 6.13 – Caracterização I(V) da amostra BH9830 com iluminação a 5mA de corrente no LED.

Em todas as 6 curvas pode-se observar que, a partir de determinado valor de tensão, que corresponde a um campo em torno de 500V/cm, a intensidade da corrente que atravessa a amostra cai com o aumento da tensão aplicada, ou seja, verifica-se a ocorrência de condutividade diferencial negativa. Observa-se também que, aumentando ainda mais tensão, a corrente tende a apresentar instabilidades identificadas como oscilações naturais de baixa frequência ocorrendo devido a fenômenos ligados à estrutura das amostras. Isto poderia ser confirmado em um experimento específico com aplicação de uma tensão DC, conforme comentários anteriores. As regiões achuradas nas figuras 6.14 a 6.16 representam as amplitudes das oscilações de corrente citadas anteriormente para o caso de 5 mA de corrente atravessando o LED.

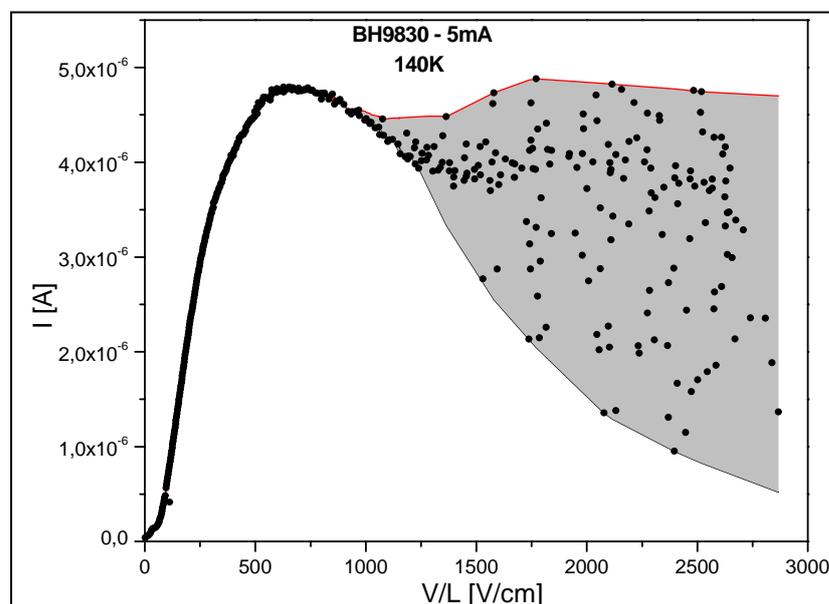


Figura 6.14 – Oscilações de corrente registradas na amostra BH9830 com iluminação à 5mA de corrente no LED e temperatura de 140K.

No experimento realizado sem iluminação, a amostra BH9830 não apresentou nenhum dos dois tipos de comportamentos citados anteriormente, ou seja, a iluminação age como ativadora destes fenômenos, na faixa de tensões estudada. Com o aumento da corrente no LED de 5mA para 20mA, ocorre aumento significativo da corrente através da amostra, obviamente em função da maior quantidade de fótons que incide sobre a mesma com o aumento da potência dissipada pelo LED.

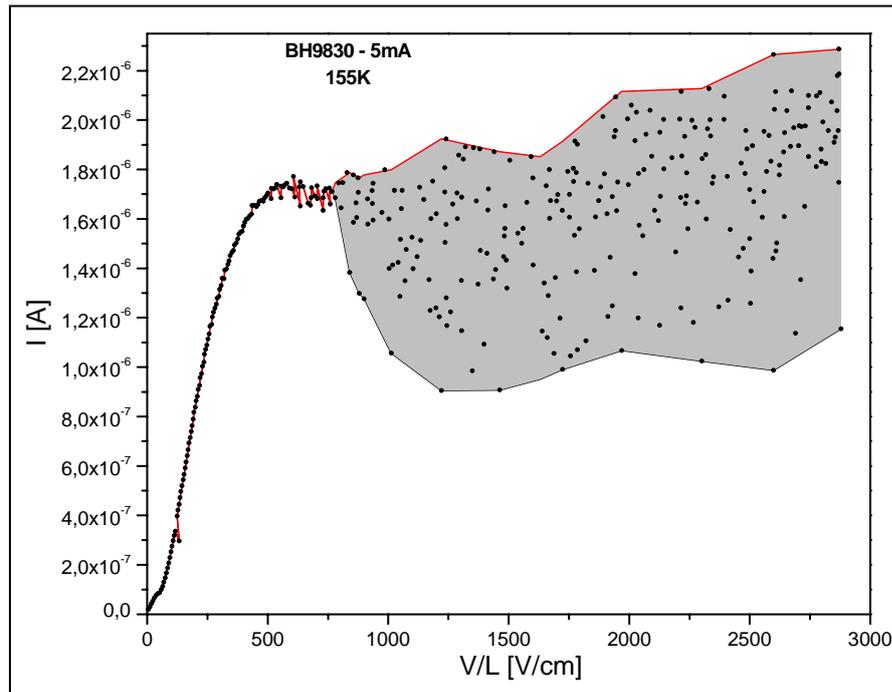


Figura 6.15 – Oscilações de corrente registradas na amostra BH9830 com iluminação à 5mA de corrente no LED e temperatura de 155K.

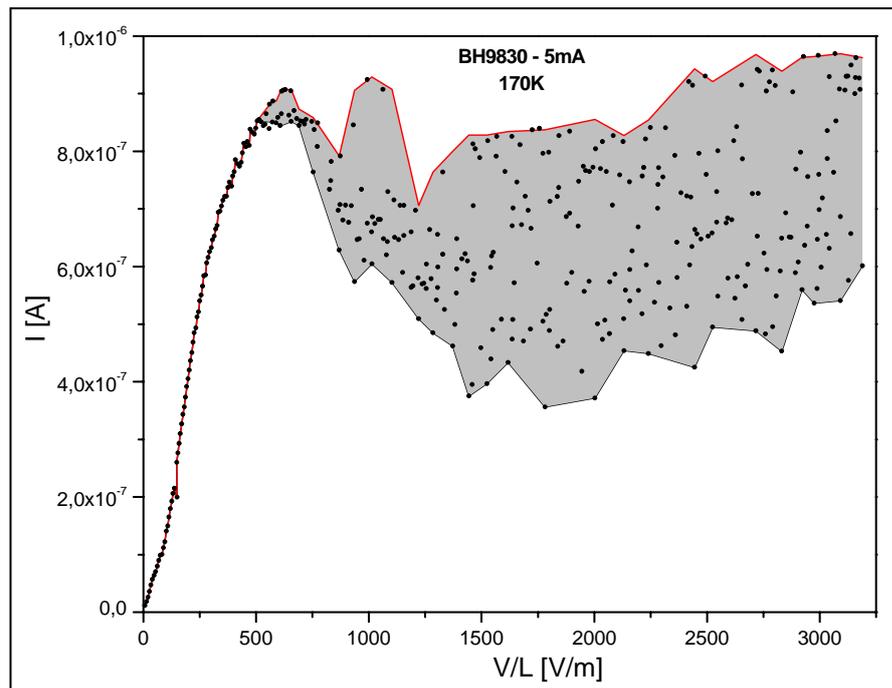


Figura 6.16 – Oscilações de corrente registradas na amostra BH9830 com iluminação à 5mA de corrente no LED e temperatura de 170K.

Os comportamentos observados na caracterização  $I(V)$  abrem a possibilidade de novos trabalhos para compreensão da natureza das oscilações observadas e dos mecanismos que levam à ocorrência da condutividade diferencial negativa nestas amostras.

## Capítulo 7 – Conclusões e perspectivas futuras

### 7.1 - Conclusões

Com base nos resultados apresentados das caracterizações elétricas das amostras de superredes de InAs/GaAs contendo pontos quânticos de InAs, pode-se tecer os seguintes comentários:

- As curvas de resistividade apresentaram, para todas as amostras, comportamentos semelhantes na faixa de temperatura que vai desde 310 K até 160 K. Isto foi corroborado através da análise do comportamento das curvas pela equação de Arrhenius, sendo possível obter a energia de ativação dos portadores para essa faixa de temperaturas, que serviu de parâmetro de comparação para a análise. Isto é um indicativo de que os fenômenos envolvidos na condução elétrica destas amostras são similares nessa faixa de temperaturas. Assim, as diferenças entre valores absolutos de resistividade são atribuídas basicamente aos parâmetros de crescimento utilizados em cada caso, que levam à formação de estruturas, como os pontos quânticos, de tamanhos e geometrias variadas (coerentes com as condições de crescimento) e com qualidades de estruturas cristalinas também diversas. Abaixo da temperatura de 160K, os comportamentos das curvas de resistividade elétrica registradas também são semelhantes, porém, optou-se por analisar o comportamento elétrico das amostras nessa faixa de temperaturas através da mobilidade elétrica, principalmente em função da maior disponibilidade de modelos compatíveis com os fenômenos observados.
- As curvas de mobilidade obtidas experimentalmente são coerentes com os parâmetros de crescimento utilizados na fabricação das amostras, a exemplo da compatibilidade dos valores com a temperatura de crescimento utilizada, que influencia diretamente a qualidade do cristal formado. As amostras que foram crescidas com maiores temperaturas, tenderam a apresentar mobilidades maiores em função da melhor qualidade do cristal crescido.
- As curvas de mobilidade obtidas através dos modelos disponíveis evidenciaram que as melhores descrições para a mobilidade correspondem aos espalhamentos devido às impurezas ionizadas, para temperaturas abaixo de 70K, e aos fônons ópticos polares, para temperaturas acima de 100K, considerando a faixa de temperaturas estudada. Nas regiões de baixas temperaturas, abaixo de 70K, o modelo

de espalhamento por impurezas ionizadas ajusta-se bem, com exceção da região de temperaturas abaixo de 25 K. Neste caso há um considerável desvio entre a mobilidade medida e a prevista pelos modelos, pois o modelo que prevê a mobilidade limitada por espalhamentos em impurezas ionizadas foi severamente influenciado pela concentração de portadores medida. A concentração de portadores, que é utilizada nos cálculos do espalhamento por impurezas ionizadas apresentou uma mudança severa de comportamento para baixas temperaturas, passando a aumentar com a redução de temperatura. Este comportamento foi atribuído às transições das populações de portadores entre sub-bandas, resultando no aumento da população total de portadores pelo aumento da população da sub-banda fundamental com a redução da temperatura, considerando a hipótese do transporte de portadores através de dois canais de condução, conforme descrito por Correa F, JA *et al* <sup>[34]</sup>.

- Os modelos que consideram a transporte elétrico bidimensional de portadores (em planos da amostra) não apresentaram grande influência sobre o resultado final obtido. No entanto, em algumas faixas de temperatura, a mobilidade total prevista apresenta-se consideravelmente maior do que a medida, apontado uma provável atuação de outros mecanismos de espalhamentos não considerados no trabalho, como por exemplo, espalhamento por discordâncias que podem ocorrer em quantidades expressivas neste tipo de amostra. Não houve oportunidade de realizar uma análise microestrutural de nossas amostras para conhecimento da concentração de discordâncias afim de que pudéssemos levar em conta este mecanismo em nossos estudos. É importante também poder delimitar a influência exercida pelas mudanças das populações de portadores nas sub-bandas, conforme descrito no item anterior, pois também causa desvios significativos entre a mobilidade medida e a calculada.
- Da caracterização I(V) pudemos verificar que as amostras de InAs/GaAs contendo pontos quânticos de InAs apresentam comportamentos não lineares em situações de altos campos elétricos aplicados e sob excitação externa de radiação infravermelho. Não houve aumento significativo desses efeitos não lineares com o aumento da intensidade da excitação, apesar do crescimento da corrente na amostra.

## 7.2 - Perspectivas futuras

Os resultados obtidos na caracterização a 4 pontos indicam que é possível avançar bastante no estudo das características elétricas destas amostras por meio da

análise das curvas de mobilidade. Dessa forma, em trabalhos futuros o grupo pretende atuar de 3 formas principais:

- Alcançar melhor representatividade dos modelos através da adoção de novos mecanismos de espalhamento. Para que isso seja feito de forma adequada seria também desejável uma análise da microestrutura das amostras que permitisse, por exemplo, estimar a concentração de discordâncias das mesmas.
- Buscar adequar os modelos de cálculo da mobilidade para garantir que também sejam adequados aos casos em que se identificar a ocorrência de transporte de portadores através de dois canais de condução, envolvendo variação de populações de portadores nestes canais com a mudança da temperatura. Para isso seria adequado ajustar os modelos de mobilidade utilizados ou corrigir as curvas de concentração de portadores para a região de baixas temperaturas. Seria importante também repetir os experimentos de caracterização com uma investigação minuciosa especificamente à baixas temperaturas (abaixo de 30K).
- Realizar uma investigação da influência dos pontos quânticos na mobilidade, resistividade e concentração de portadores destas amostras, buscando estabelecer uma relação entre o comportamento elétrico e as propriedades físicas dos pontos quânticos, em especial seu tamanho e geometria.

Com relação às caracterizações  $I(V)$  e  $I(t)$ , a utilização de recursos técnicos mais adequados possibilitará registrar, analisar e quantificar os efeitos não lineares na corrente elétrica, que ocorrem em algumas das amostras contendo pontos quânticos quando submetidas a altos campos elétricos, compreendendo também a influência de excitações externas no comportamento destes fenômenos. Deseja-se, em especial, realizar medidas com alimentação DC e altos campos elétricos, registrando oscilações naturais que ocorrem em algumas das amostras se submetidas a excitações externas com radiação infravermelho. Para que isso seja possível é necessária a utilização de uma placa DAC com maior taxa de amostragem, pois a disponível atualmente limita-se a 200 kS/s, restringindo nossa capacidade de investigação.

## 8 – REFERÊNCIAS À INFORMAÇÃO

### 8.1 Livros e periódicos

1. Bimberg D; Grundmann M; Ledentsov NN. Quantum Dot Heterostructures. John Wiley & Sons, Inc. New York, 1998;
2. Simmons JH, Bukowski TJ. Quantum Dot Research: Current State and Future Prospects. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, 27 (3/4): 119-142, 2002;
3. Rezende SM. A Física dos Materiais e Dispositivos Eletrônicos – Editora Universitária da UFPE – Recife, 1996;
4. Ashcroft NW, Mermin ND. Solid State Physics. International edition, Saunders College Publishing, 1976;
5. González Pérez, JC. Multicamadas de pontos quânticos auto-construídos de InAs em matriz GaAs. Tese de doutorado: Depto. de Física, ICEx - UFMG, 8/8/2000;
6. Price PJ. Two dimensional electron transport in semiconductor layers. I – Phonon scattering. *Annals of Physics*, 133: 217-239, 1981;
7. Rubinger RM; Ribeiro GM; de Oliveira AG; Albuquerque HA; da Silva RL; Rodrigues WN; Moreira MVB. Hall effect in InAs/GaAs superlattices with quantum dots: Identifying the presence of deep level defects. *Brazilian Journal of Physics*, 34 (2b): 626-628, 2004;
8. Chiquito AJ. Pontos Quânticos: Átomos artificiais e transistores atômicos. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 23 (2): 159-167, 2001;
9. Eisberg R; Resnick R. Física quântica, Editora Campus. Rio de Janeiro, 1974;
10. Look DC. Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices. John Wiley & Sons, Inc. New York, 1989;
11. Sze SM. Semiconductor Devices Physics and Technology – Bell Telephone Laboratories, John Wiley & Sons, Inc – New York, 1985;

12. Conwell E; Weisskopf VF. Theory of impurity scattering in semiconductors. *Physical Review*, 77 (3): 388-390, 1950;
13. Fortini A, Diguet D, Lugand J. Analysis of Polar Optical Scattering of Electrons in GaAs. *Journal of Applied Physics*, 41 ( 7): 3121-3127, 1970;
14. Jorio A; Sellami L; Aubin M; Carlone C. Effect of intrinsic defects on the electron mobility of gallium arsenide grown by molecular beam Epitaxy and metal organic chemical vapor deposition. *Journal of Applied Physics*, 91 (12) 9887-9893, 2002;
15. Kalem S; Chyi JI; Morkoç H; Bean R; Zanio K. Growth and transport properties of InAs epilayers on GaAs. *Applied Physics Letters*, 53 (17) 1647-1649, 1988;
16. Lee K; Shur MS; Drummond TJ; Morkoç H. Low field mobility of 2-d electron gas in modulation doped  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  layers. *Journal of Applied Physics*, 54 (11): 6432-6438, 1983;
17. Patel JU; Williams JG; Stillman GE. Degradation of mobility in neutron irradiated GaAs by the increase scattering form multiply charged ionized defects. *Journal of Applied Physics*, 73 (8): 3734-3739, 1993;
18. Walukiewicz W; Ruda HE; Lagowski J; Gatos HC. Electron mobility in modulation-doped heterostructures. *Physical Review B*, 30 (8) 4571-4582;
19. Wolfe CM; Holonyack Jr N; Stillman GE. *Electronic Properties of Semiconductors. Capítulos 5 e 6: Transport Properties e Scattering Processes.* Prentice Hall International, Inc. Londres. 1989;
20. Kulbachinskii VA; Kytin VG; Lunin RA; Malkina IG; Zvonkov BN; Safyanov YN. Low temperature transport properties of InAs/GaAs structures with quantum dots. *Microelectronic Engineering*, 43 – 44: 107 – 111, 1998;
21. Swart JW. *Fundamentos de Materiais Semicondutores – Apostila de Curso.* 2004;
22. Eisberg R; Resnick R. *Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei and particles.* John Wiley & Sons, Inc. New York, 1974;

23. Park CJ; Kim HB; Lee YH; Kim DY; Kang TW; Hong CY; Cho HY; Kim MD. Deep Level Defects in InAs Quantum Dots Grown on GaAs by Molecular Beam Epitaxy. *Journal of Crystal Growth*, 227: 1057, 2001;
24. Kittel C. *Introdução à Física do Estado Sólido*. Guanabara Dois. Rio de Janeiro, 1978.
25. Thurmond CD. The standard thermodynamic functions for the formation of electrons and holes in Ge, Si, GaAs and GaP. *Journal of The Electrochemical Society*, 122: 1133, 1975;
26. Rode DL. Electron Transport in InSb, InAs, and InP. *Physical Review B*, 3 (10): 3287-3299, 1971;
27. Adachi S. GaAs, AlAs, and Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As: material parameters for use in research and device applications. *Journal of Applied Physics*, 58 (3): R1-R29, 1985;
28. Look DC. *Semiconductors and Semimetals, Volume 19, Capítulo 2: The electrical and photoelectronic properties of semi-insulating GaAs*. Academic Press, Inc., 1983;
29. Bube RH. *Electronic Properties of Crystalline Solids: an introduction to fundamentals, Capítulo 10*. Academic Press. New York, 1974;
30. Bennett HS. Majority and minority electron and hole mobilities in heavily doped gallium aluminum arsenide. *Journal of Applied Physics* 80 (7): 3844-3853, 1996;
31. de Oliveira, AG; Moreira, MVB; Rodrigues WN, Matinaga, FM; González, JC; da Silva, MIN; Vilela, JMC; Andrade, MS; Ugarte, D; Silva, PC. On three dimensional self-organization and optical properties of InAs quantum-dot multilayers. *Applied Physics Letters*, 76 (23) 3400-3402;
32. Kul'bachinskii VA; Lunin RA; Rogozin VA; Mokerov VG; Fedorov YV; Khabarov YV; Namuri E; Kindo K; de Visser A. Lateral electronic transport in short-period InAs/GaAs superlattices at the threshold of quantum dot formation. *Semiconductors*, 37 (1): 70-76, 2003;

33. de Oliveira CEM; de Carvalho MMG. Sistema automatizado para medidas de efeito Hall em semicondutores. *Revista de Física Aplicada e Instrumentação*, 11 (1): 23-49, 1996;
34. Corrêa F, JA; de Oliveira, AG; da Silva, MIN; Moreira, MVB; Ribeiro, GM; Chacham, H. Temperature dependence of the equilibrium Hall concentration in silicon planar-doped GaAs samples. *Solid State Communications*, 98 (12) 1063-1068, 1996;
35. Babinski A; Jasinski J. Post-growth Thermal Treatment of Self-Assembled InAs/GaAs Quantum Dots. *Thin Solid Films*, 412: 84 – 88, 2002.
36. Brooks H; Herring C. *Physical Review B*, 83: 879, 1951;
37. Chiquito AJ. Cálculo da distribuição de cargas na banda de condução em junções semicondutoras: um exercício de física (Computacional). *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 21 (4): 514-523, 1999;
38. Chiquito AJ; Pusep YA; Mergulhão S J; Galzerani JC; Moshegov NT; Miller DL. Capacitance spectroscopy of InAs self-assembled quantum dots embedded in a GaAs/AlAs superlattice. *Journal of Applied Physics*, 88: 1987 - 1991, 2000;
39. Dózsa L; Horváth ZJ; Tuyen VV; Pódör B; Mohácsy T; Franchi S; Frigeri P; Gombia E; Mosca R. The effect of InAs quantum layer and quantum dots on the electrical characteristics of GaAs structures. *Microelectronic Engineering*, 51 – 52: 85 – 92, 2000;
40. Hilmer H; Forchel A; Hansmann S; Morohashi M; Lopez E; Meier HP; Ploog K. *Physical Review B*, 39: 10901, 1989;
41. Jaszek R. Carrier Scattering by dislocation in semiconductors. *Journal of materials science: materials in electronics*, 12: 1-9, 2001;
42. Jaszek R; Harris JJ; Roberts C. Electrical properties of highly strained modulation-doped InAs/GaAs quantum-well heterostructures. *Journal of Applied Physics*, 85 (2) 959-968, 1999;
43. Jena D; Gossard AC; Mishra UK. Dislocation scattering in a two dimensional electron gas. *Applied Physics Letters*, 76 (13) 1707-1709, 2000;
44. Jena D; Gossard AC; Mishra UK; *Applied Physics Letters*, 76: 1707, 2000;
45. Kalem S. Molecular-beam epitaxial growth and transport properties of InAs epilayers. *Journal of Applied Physics*, 66 (7) 3097-3103, 1989;

46. Kasap M; Acar S; Alkan B. Electron mobility in  $\text{In}_{0.51}\text{Ga}_{0.49}\text{As}$  and  $\text{In}_{0.60}\text{Ga}_{0.40}\text{As}$  semiconductors and the effect of dislocation scattering. *GU Journal of Science*, 17(1): 31-35, 2004;
47. Kawamura T; Sarma SD. Phonon-scattering-limited electron mobilities in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  heterojunctions. *Physical Review B*, 45 (7) 3612-3627, 1992;
48. Kulbachinskii VA; Kytin VG; Lunin RA; Malkina IG; Zvonkov BN; Safyanov YN. Low temperature transport properties of  $\text{InAs}/\text{GaAs}$  structures with quantum dots. *Microelectronic Engineering*, 43 – 44: 107 – 111, 1998;
49. Lin BJF; Tsui DC; Paalanen MA; Gossard AC. Mobility of the two-dimensional electron gas in  $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterostructures. *Applied Physics Letters* 45 (6): 695-697, 1984;
50. Mishournyi VA; del Castillo ICH; Gorbachev AY; Martínez AL. Tecnologías epitaxiales de crecimiento de cristales semiconductores. *Avance y Perspectiva*, 21: 21-31, 2002.
51. Penchina CM; Farvacque J; Masut R. Electrical conductivity of dislocated semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 53 (7): 4970-4974, 1982;
52. Price PJ. *Physical Review B*, 32: 2643, 1985;
53. Rubinger RM. Estudo do Centro EL2 em Amostras de GaAs com Dopagem Planar de Silício Crescidas por Epitaxia por Feixe Molecular – Dissertação de Mestrado – Departamento de Física – ICEX – UFMG – Belo Horizonte, 1996;
54. Viles DK; Wleck AD. Potential distribution in the van der Pauw technique, *American Journal of Physics*, 63 (12): 1074-1078, 1995;

## 8.2 Sites da internet

55. <http://www.pmt.usp.br/pmt5783/Aula5.pdf>
56. <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/GaAs/index.html>
57. <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/InAs/basic.html>
58. <http://www.lancs.ac.uk/ug/kingj1/index.htm>