

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ - UNIFEI  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM  
MATERIAIS PARA ENGENHARIA**

Transporte eletrônico em amostras de  
InAs/GaAs.

**Luiz Henrique Ribeiro**

Itajubá, 27 de setembro de 2021

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ - UNIFEI  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM  
MATERIAIS PARA ENGENHARIA**

**Luiz Henrique Ribeiro**

**Transporte eletrônico em amostras de  
InAs/GaAs.**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Materiais para Engenharia como parte dos requisitos para obtenção do Título de Doutor em Ciências em para Engenharia.

**Área de Concentração: Não Metais**

**Orientador: Prof. Dr. Rero Marques Rubinger**

**Coorientador: Prof. Dr. Adhimar Flávio Oliveira**

**27 de setembro de 2021**

**Itajubá**

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ - UNIFEI  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM  
MATERIAIS PARA ENGENHARIA

Transporte eletrônico em amostras de  
InAs/GaAs.

**Luiz Henrique Ribeiro**

Tese aprovada por banca examinadora em 03 de  
Setembro de 2021, conferindo ao autor o título  
de **Doutor em Ciências em Materiais para  
Engenharia.**

***Banca Examinadora:***

Prof. Dr. Rero Marques Rubinger  
Prof. Dr. Adhimar Flávio Oliveira  
Prof. Dr. Vander Alkmin dos Santos Ribeiro  
Prof. Dr. Yvo Marcelo Chiaradia Masselli  
Prof. Dr. Márcia Regina Baldissera

**Itajubá  
2021**

---

Luiz Henrique Ribeiro

Transporte eletrônico em amostras de InAs/GaAs/ Luiz Henrique Ribeiro. –  
Itajubá, 27 de setembro de 2021-  
84 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. Rero Marques Rubinger

Tese (Doutorado)

Universidade Federal de Itajubá - UNIFEI

Programa de pós-graduação em Materiais para engenharia, 27 de setembro de  
2021.

1. GaAs/InAs. 2. Transporte eletrônico. I. Rero Marques Rubinger. II. Univer-  
sidade Federal de Itajubá. III. Transporte eletrônico em amostras de GaAs/InAs

CDU 07:181:009.3

---

# Agradecimentos

Agradeço de todo meu coração a todos que de alguma forma me ajudaram a realizar mais uma conquista. Agradeço a todos os professores pela orientação, críticas e incentivos colaboraram com o desenvolvimento deste trabalho. Agradeço ao Dr. Rero Marques Rubinger pela orientação, amizade e comprometimento no meu processo de formação acadêmica desde do início em que trabalhei com o senhor no meu mestrado, e agora em meu doutorado. Agradeço ao meu co-orientador Dr. Adhimar Flávio de Oliveira que sempre esteve comigo, e foi mais que um co-orientador, mas um amigo, que esteve comigo em toda a caminhada em meio aos desafios e superações. Serei sempre eternamente grato a você e ao Dr. Rero por tudo que fizeram por mim. Aos funcionários da Unifei, em especial aqueles do departamento de Física e Química - IFQ Calu e Roberto, meus sincero obrigado.

*"A meu pai que ensinou a sempre lutar pelo que é bom e justo. A minha família que sempre me incentivaram a buscar novas conquistas, e a minha esposa Graça que sempre esteve comigo, é também pra você mais esta conquista.*

# Resumo

Este trabalho apresenta o estudo do transporte eletrônico em um conjunto de cinco amostras de semicondutores com multicamadas de InAs/GaAs crescidas pela técnica de epitaxia de feixe molecular. Desenvolveu-se um sistema de comutação automatizado para realizar medições de transporte eletrônico de mobilidade e concentração de portadores usando a técnica de van der Pauw. Para a avaliação do sistema mediu-se foi avaliado através de uma amostra de ITO, bem conhecida na literatura. Em sua avaliação o sistema apresentou resultados condizentes com os esperados. Em seguida foram realizadas as medições das cinco amostras em função da temperatura na faixa de 260K a 310K. Para identificar quais mecanismos de espalhamento mais contribuíram para a limitação da mobilidade, foi necessário utilizar o método da meta-heurística de evolução diferencial auto-adaptativa. Este método permitiu determinar os principais mecanismos de espalhamento que limitam a mobilidade eletrônica no conjunto de amostras estudados são por discordância e fônons. As discordâncias consistem nos defeitos dominantes nesta estrutura devido a incompatibilidade entre as redes de InAs e GaAs. Portanto, para aumentar a mobilidade do portador, propôs-se algumas estratégias: uma mudança nos parâmetros de crescimento da amostra, como temperatura do substrato e espessura da camada de InAs/GaAs. Alternativamente, o recozimento das amostras também pode ser considerado para melhorar a mobilidade da amostra.

**Palavras-chaves:** Evolução diferencial auto-adaptativa; mobilidade eletrônica; Mecanismos de espalhamento; transporte eletrônico; InAs/GaAs

# Abstract

This work presents the study of electronic transport on a set of five multilayer molecular beam epitaxy-grown InAs/GaAs semiconductor samples. We developed an automated switch system to carry out electronic transport measurements of mobility and carrier concentration using the van der Pauw technique. The system was evaluated using an ITO sample, which is well known in the literature. In its evaluation, the system presented results consistent with the expected ones. Measurements were carried out as a function of temperature within the range of 260 K to 310 K. To identify which scattering mechanisms most contributed to mobility limitation, it was necessary to use the Self-adaptive Differential Evolution meta-heuristic method. This method allowed the determination of the main scattering mechanisms limiting the electronic mobility and identified as scattering by dislocations and phonons. Dislocations consist of the dominant defects in this lattice mismatch structure. Therefore, to increase carrier mobility, we propose some strategies: a change in the sample growth parameters such as substrate temperature and InAs/GaAs layer thickness. Alternatively, annealing of the samples could also be considered to improve sample mobility.

**Keywords:** Self-adaptive Differential Evolution; electronic mobility; Scattering mechanisms; electronic transport; InAs/GaAs



# Lista de ilustrações

Figura 1.1 – Estrutura cristalina blenda de zinco (zincblende) para o InAs. As esferas na cor cinza representam os átomos de Índio, e as esferas amarelas os átomos de Arsênio. Esta estrutura é a mesma para o GaAs, a diferença é que para a estrutura GaAs, substituímos o Índio (In) pelo Gálio (Ga). . . . .	18
Figura 2.1 – Movimento dos elétrons na ausência do campo elétrico. A velocidade média térmica dos elétrons é nula. . . . .	21
Figura 2.2 – Movimento dos elétrons com a presença do campo elétrico. Efeito combinado da deriva e da agitação térmica. . . . .	21
Figura 2.3 – Trajetória de elétrons e lacunas no espalhamento por impurezas ionizadas. . . . .	25
Figura 2.4 – Ilustração da discordância do tipo <i>misfit</i> , que ocorre devido a incompatibilidade das constantes de rede. . . . .	26
Figura 2.5 – Ilustração da discordância do tipo threading que atravessam a camada de InAs terminando na superfície. . . . .	27
Figura 2.6 – Deslocamento de uma cadeia diatômica por fônons LA e TA no centro da zona de Brillouin. . . . .	28
Figura 2.7 – Deslocamento de uma cadeia diatômica por fônons LA e TA na fronteira da zona de Brillouin. . . . .	28
Figura 2.8 – Deslocamentos de uma cadeia diatômica para os fônons LO e TO no centro da zona de Brillouin (a) . . . . .	30
Figura 2.9 – Deslocamentos de uma cadeia diatômica para os fônons LO e TO na borda da zona de Brillouin (b). . . . .	31
Figura 2.10 – Configuração para medidas de resistividade e Efeito Hall onde $L_s$ é o comprimento da, $w$ a largura e $d$ a espessura da barra. Pelo comprimento da barra é percorrida uma corrente elétrica $I$ , em que $V_H$ é medida uma diferença de potencial denominada de tensão Hall, e $V_c$ é a tensão de condução. . . . .	33
Figura 2.11 – Forma arbitrária de uma amostra indicando os contatos para a medida de resistividade através da técnica de van der Pauw. Em que $I$ é a corrente elétrica e $V_c$ a tensão de condução. . . . .	35
Figura 2.12 – Função de taxa de resistividade usada para corrigir os resultados de Van der Pauw para a forma de amostra assimétrica. . . . .	36
Figura 2.13 – Forma arbitrária de uma amostra indicando os contatos para a medida de efeito Hall através da técnica de van der Pauw. . . . .	37

Figura 3.1 – Esquema de montagem das fontes, juntamente com o multímetro e o controle de temperatura do criostato para realização de medidas na amostra. . . . .	38
Figura 3.2 – A esquerda a foto da Keithley 2400 usada como fonte de corrente, e a direita a foto Keithley 2100 usada como voltímetro. . . . .	39
Figura 3.3 – GMW equipamento utilizado para o controle do campo magnético no eletroímã. É este equipamento que controla a intensidade do campo magnético bem como a sua inversão. . . . .	39
Figura 3.4 – A Lakeshore mostra a temperatura. Em A: é mostrada a temperatura atual da amostra, em 1: a temperatura desejada para as medições, e em B: a temperatura do ponto frio que está localizado do lado da amostra. . . . .	40
Figura 3.5 – Placa Hall. Responsável pela corrente elétrica e tensão gerada na amostra durante a queda de temperatura. . . . .	40
Figura 3.6 – Gráficos do programa em Labview para as leituras de mobilidade Hall, $R_H$ e resistividade $n_H$ . . . . .	41
Figura 3.7 – scale = 0.5 . . . . .	42
Figura 3.8 – Ilustração esquemática das partes essenciais de um sistema de Epitaxia por Feixe Molecular. A ilustração acima contém 5 células de efusão. . . . .	43
Figura 3.9 – Foto do Sistema MBE RIBER 2300 R&D da UFMG. . . . .	44
Figura 3.10–Ultrassom utilizado na limpeza das amostras. . . . .	44
Figura 3.11–Ilustração da disposição das camadas sobre o substrato de GaAs. Na cor azul, são representados o substrato e os espaçadores de GaAs, na cor amarela as coberturas de InAs e em vermelho a interface entre o InAs e o GaAs. . . . .	45
Figura 4.1 – Resistividade da amostra de ITO utilizada para verificar o comportamento do instrumento entre a temperatura ambiente e a temperatura de 10K. Podemos verificar pela resistividade que essa amostra apresentou um comportamento metálico. . . . .	49
Figura 4.2 – Concentração de portadores em função da temperatura para amostra de ITO. No gráfico podemos verificar que a amostra possui uma quantidade aproximadamente constante de portadores, da ordem de $3 \times 10^{27} m^{-3}$ . Indicando que a amostra possui apenas um canal de condução. . . . .	50
Figura 4.3 – Mobilidade eletrônica da amostra de ITO em função da temperatura. Os dados apresentam uma pequena redução na mobilidade em função do aumento da temperatura. Este comportamento é típico de espalhamento por fônons óticos e acústicos, devido ao aumento de temperatura. . . . .	51
Figura 4.4 – Concentração de portadores e mobilidade eletrônica em função da temperatura para as amostras estudadas. . . . .	52

Figura 4.5 – Mobilidade vs temperatura considerando todos os mecanismos de espalhamento contribuintes representados por símbolos abertos. O ajuste da mobilidade do elétron na amostra $S_1$ (linha tracejada). . . . .	53
Figura 4.6 – Mobilidade vs temperatura considerando todos os mecanismos de espalhamento contribuintes representados por símbolos abertos. O ajuste da mobilidade do elétron na amostra $S_2$ (linha tracejada). . . . .	54
Figura 4.7 – Mobilidade vs temperatura considerando todos os mecanismos de espalhamento contribuintes representados por símbolos abertos. O ajuste da mobilidade do elétron na amostra $S_3$ (linha tracejada). . . . .	55
Figura 4.8 – Mobilidade vs temperatura considerando todos os mecanismos de espalhamento contribuintes representados por símbolos abertos. O ajuste da mobilidade do elétron na amostra $S_4$ (linha tracejada). . . . .	56
Figura 4.9 – Mobilidade vs temperatura considerando todos os mecanismos de espalhamento contribuintes representados por símbolos abertos. O ajuste da mobilidade do elétron na amostra $S_5$ (linha tracejada). . . . .	57

# Lista de tabelas

Tabela 3.1 – Parâmetros de crescimento das amostras semicondutoras de InAs/GaAs.	45
Tabela 4.1 – Principais parâmetros de ajuste obtidos através do método SADE.	. . . 53

# Lista de siglas

**MBE** Epitaxia de feixe molecular

**QD** Pontos quânticos

**InAs** Arseneto de Índio

**GaAs** Arseneto de Gálio

**ML** Monocamadas

**RHEED** Reaction High-Energy Electron Diffraction

**2DEG** Bidimensional

# Lista de Símbolos

$\rho$  - Resistividade elétrica

$\sigma$  - Condutividade elétrica

$\mu$  - Mobilidade eletrônica

$m^*$  - Massa efetiva

$\tau$  - Tempo livre médio

$\vec{E}$  - Campo elétrico

$I$  - Corrente elétrica

$e$  - Carga elementar do elétron

$n$  - Densidade de portadores

$\varepsilon$  - Energia

$\vec{J}$  - Densidade de corrente

$V_H$  - Tensão Hall

$\vec{B}$  - Campo magnético

$\hbar$  - Constante de Planck  $h/2\pi$

$R_H$  - Coeficiente Hall

$d$  - espessura da amostra

$T$  - Temperatura

$k_B$  - Constante de Boltzmann

$\epsilon_s$  - Constante dielétrica em baixa frequência

$Z_0$  - Largura do poço

$N_{ic}$  - Densidade de impurezas no poço de potencial

$u_l$  - Velocidade longitudinal dos fônons acústicos

$u_t$  - Velocidade transversal dos fônons acústicos

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>17</b>
<b>1.1</b>	<b>Objetivo Geral</b>	<b>19</b>
<b>1.2</b>	<b>Obejtivos Específicos</b>	<b>19</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO TEÓRICA</b>	<b>20</b>
<b>2.1</b>	<b>Transporte eletrônico em semicondutores</b>	<b>20</b>
2.1.1	Massa efetiva	23
2.1.2	Mecanismos de espalhamento	24
2.1.2.1	Impurezas ionizadas	24
2.1.2.2	Linhas de discordância	26
2.1.2.3	Fônons acústicos	27
2.1.2.3.1	Piezoelétricos	29
2.1.2.3.2	Potencial de deformação	29
2.1.2.4	Fônons ópticos	30
2.1.2.5	Espalhamento por desordem em ligas	31
2.1.3	Regra de Mathiessen	32
<b>2.2</b>	<b>Efeito Hall</b>	<b>32</b>
2.2.1	Estrutura de van de Pauw	34
<b>3</b>	<b>MATERIAIS E MÉTODOS</b>	<b>38</b>
<b>3.1</b>	<b>Projeto e montagem da placa Hall</b>	<b>38</b>
3.1.1	Sistemas de medições	38
3.1.1.1	Configurações do sistema	39
<b>3.2</b>	<b>Preparação das amostras</b>	<b>42</b>
3.2.1	Crescimento das amostras	42
3.2.2	Limpeza das amostras	44
3.2.3	Características das amostras	45
<b>3.3</b>	<b>Evolução Diferencial Auto-adaptativa</b>	<b>46</b>
<b>4</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>48</b>
<b>4.1</b>	<b>Avaliação do equipamento desenvolvido</b>	<b>48</b>
<b>4.2</b>	<b>Amostras de InAs/GaAs</b>	<b>51</b>
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>58</b>

---

	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	<b>59</b>
<b>A</b>	<b>APÊNDICE A - PUBLICAÇÕES</b> . . . . .	<b>63</b>

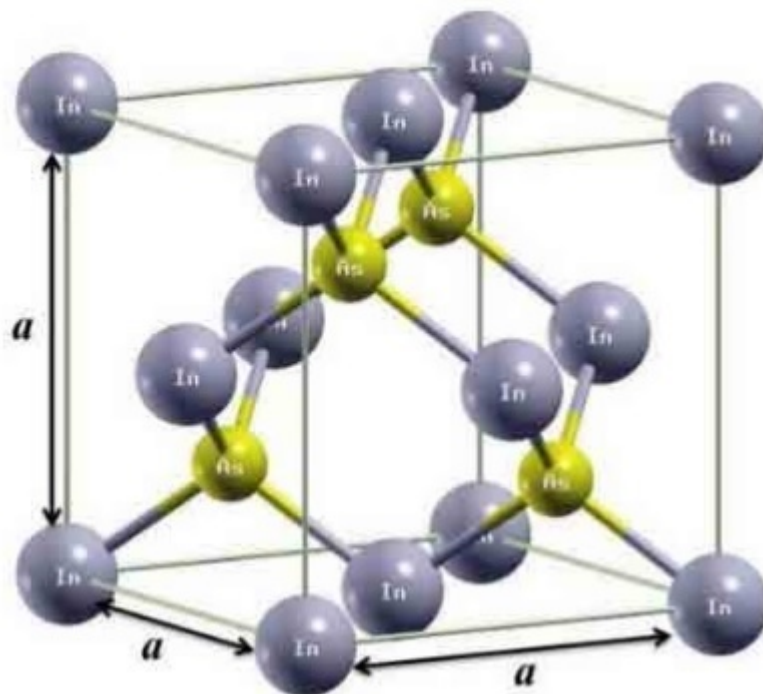


# 1 Introdução

Tecnologias para a produção de materiais que estão envolvidos na fabricação de dispositivos eletrônicos, tem atingido enorme avanço nos últimos anos. Materiais semicondutores compostos principalmente dos grupos II-VI e dos grupos III-V da tabela periódica, têm sido usados na fabricação de dispositivos eletrônicos de alta eficiência, tais como os de potência e alta frequência [1, 2]. Os dispositivos atuais precisam possuir uma dimensionalidade cada vez menor, podem ser encontrados, por exemplo, em dispositivos como circuitos integrados, diodos emissores de luz infravermelhos, diodos laser, LEDs detectores luminosos e células solares [3, 4, 5, 6, 7].

Dentre os materiais semicondutores desenvolvidos com compostos dos grupos II-IV e III-V o Arseneto de Gálio (GaAs) e o Arseneto de Índio (InAs) tem se destacado devido ao seu de bandgap direto [8], a alta mobilidade eletrônica em comparação com outros semicondutores, como o silício (Si), maior resistência à radiação ionizante, e outras propriedades elétricas e ópticas superiores à do Si. Estruturalmente apresentam a forma cúbica cristalina do tipo blenda de zinco (zincblende) como pode ser visto na Figura 1.1, são muito importantes na indústria microeletrônica, interessantes na fabricação de dispositivos optoeletrônicos de alta eficiência [9], sendo muito úteis em dispositivos que interajam luz e eletricidade.

Figura 1.1 – Estrutura cristalina blenda de zinco (zincblende) para o InAs. As esferas na cor cinza representam os átomos de Índio, e as esferas amarelas os átomos de Arsênio. Esta estrutura é a mesma para o GaAs, a diferença é que para a estrutura GaAs, substituímos o Índio (In) pelo Gálio (Ga).



Fonte: Mendoza Estrada 2017.

Neste trabalho será apresentado um estudo das propriedades elétricas de um conjunto de heteroestruturas de InAs/GaAs. O desenvolvimento de heteroestruturas InAs/GaAs, são definidas como um sistema no qual materiais de diferentes composições ou estruturas compartilham a mesma interface [10, 11]. Neste trabalho foram utilizadas cinco amostras semicondutoras contendo multicamadas, crescidas pela técnica epitaxia por feixe molecular MBE [12].

A combinação de diferentes semicondutores resulta em diferentes tipos de heteroestruturas, no caso do InAs/GaAs o crescimento das amostras ocorreu sobre substratos de GaAs semi-isolantes e as camadas foram alternadas entre InAs e espaçadores de GaAs. Durante o crescimento, devido a diferença de constante de rede, ocorreu relaxação das camadas na formação de pontos quânticos [13]. Além disso, foi verificado neste trabalho que parte da tensão na rede também se relaxou no formato nomeado de linhas de discordância [14] e ainda ficou alguma tensão nas redes sem relaxar. A formação dos defeitos nas amostras, como a discordância, desordens na liga e defeitos pontuais, e as tensões residuais na rede (strain), provocam a redução do transporte eletrônico e limitam a mobilidade dos elétrons [10, 15].

Assim, este estudo destinou-se a investigar os mecanismos de espalhamentos envolvidos nas amostras, como por exemplo, por discordância, que ocorre devido ao desajuste

atômico na rede cristalina. Estes entre outros mecanismos de espalhamento que serão apresentados mais detalhadamente influenciam no transporte eletrônico do material.

Para determinar os principais mecanismos que limitam a mobilidade eletrônica, foi utilizado o algoritmo meta-heurístico Evolução Diferencial Auto-adaptativa SADE, que apresentou maior robustez para encontrar os parâmetros de ajuste da mobilidade eletrônica. Através deste mecanismo foi possível visualizar quais mecanismos de espalhamento mais limitavam a mobilidade eletrônica. Ao longo deste trabalho será apresentado no capítulo 2, uma revisão teórica sobre o transporte eletrônico em semicondutores e conceitos como massa efetiva, mecanismos de espalhamentos, regra de Mathiessen, efeito Hall e estrutura de Van de Pauw necessários para a análise e desenvolvimento deste trabalho. No capítulo 3 é apresentado o projeto e montagem da placa Hall, automação do sistema, preparação das amostras e o método metaheurístico SADE. No capítulo 4 são apresentados os resultados e análise dos mecanismos de espalhamento que mais influenciaram na limitação da mobilidade eletrônica. Por fim no capítulo 5 é discutido todas as conclusões em relação à massa efetiva e mecanismos de espalhamento envolvidos nas amostras.

## 1.1 Objetivo Geral

1. Determinação dos mecanismos de espalhamentos nas amostras de InAs/GaAs.

## 1.2 Objetivos Específicos

1. Montagem do sistema Hall.
2. Medidas experimentais.
3. Ajuste da mobilidade eletrônica.
4. Determinação dos principais mecanismos de espalhamento em cada amostra.

## 2 Revisão teórica

Neste capítulo será apresentado a fundamentação teórica do transporte em semicondutores com foco em mecanismos de espalhamento, objeto de estudo nesta tese.

### 2.1 Transporte eletrônico em semicondutores

A produção de dispositivos eletrônicos depende diretamente de como ocorre o transporte de cargas de em seu interior. Em metais o movimento das cargas pode ser explicado pela teoria de Drude, que desenvolveu sua teoria de condução elétrica e térmica, aplicando a teoria cinética dos gases a um metal, considerado como gás de elétrons. Para este modelo, os átomos possuem núcleos imóveis com carga positiva, e ao redor deles, situam-se os elétrons fortemente ligados ao núcleo e o gás de elétrons constituídos por elétrons livres que podem se deslocar pelo material [8].

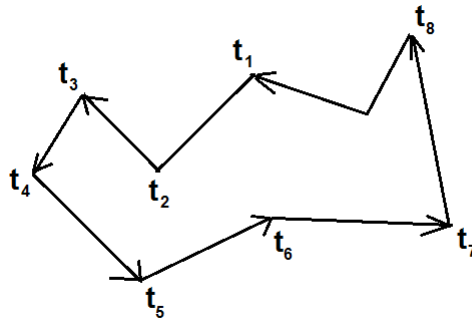
Uma das características da condução nos metais é Lei de Ohm. Através desta lei se estabelece-se uma relação linear entre a tensão aplicada no material e a corrente elétrica que nele surge. Uma outra forma de expressar esta importante lei, está na equação 2.1, que por meio do campo elétrico  $\vec{E}$  e a densidade de corrente fluindo no metal  $\vec{j}$ , relaciona uma importante grandeza física dos materiais a condutividade elétrica .

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (2.1)$$

Os semicondutores apresentam comportamento distinto dos metais no que se refere à dependência da condutividade com a temperatura. Enquanto a condutividade diminui com o aumento da temperatura para os metais, ela aumenta para os semicondutores. Nos semicondutores a corrente elétrica é formada por elétrons e buracos, a condutividade resulta da mobilidade de portadores de carga, em resposta a um campo elétrico aplicado [16].

Seja um semicondutor em uma região na qual não exista um campo elétrico. Neste caso, o movimento dos elétrons está relacionado apenas a temperatura do material. Seus movimentos ocorrem em direções aleatórias, em que o elétron percorre um certo deslocamento, e depois deste deslocamento, o elétron sofre uma colisão, mudando a sua direção, sentido e velocidade, e colide assim continuamente. Na média o vetor velocidade do elétron é igual a zero, conforme ilustrado na figura 2.1. Os elétrons podem ser espalhados no interior do material por átomos que compõe a rede cristalina, por defeitos na rede, por impurezas ou por outros centros de espalhamentos.

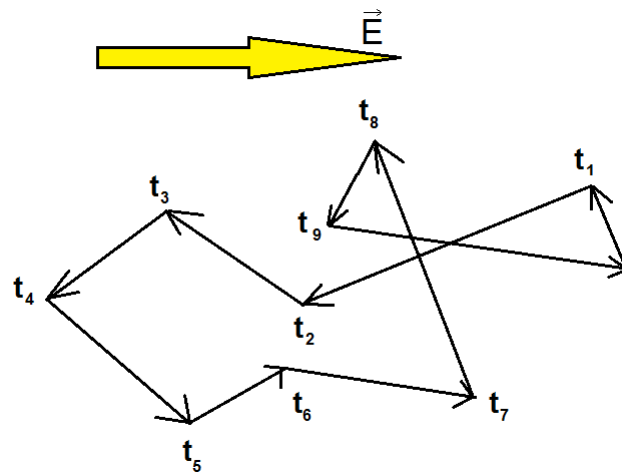
Figura 2.1 – Movimento dos elétrons na ausência do campo elétrico. A velocidade média térmica dos elétrons é nula.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Quando é aplicado um campo elétrico externo ao semiconductor, os elétrons são acelerados devido a força elétrica gerada pelo o campo elétrico. Cada elétron é acelerado entre duas colisões. Esta aceleração tem direção preferencial ao do campo elétrico conforme mostrado na Figura 2.2. Assim, além da velocidade térmica dos elétrons, terá também a velocidade devido ao campo elétrico aplicado, denominada de velocidade de deriva.

Figura 2.2 – Movimento dos elétrons com a presença do campo elétrico. Efeito combinado da deriva e da agitação térmica.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A velocidade de deriva pode ser obtida pela equação 2.2:

$$\vec{v}_d = \frac{\vec{F}}{m^*} \tau \quad (2.2)$$

em que  $m^*$  representa a massa efetiva dos elétrons no cristal. Em função do campo

elétrico temos:

$$\vec{v}_d = \frac{-e\vec{E}}{m^*}\tau \quad (2.3)$$

Considerando como  $I$  a corrente elétrica que passa pelo material  $n$  em uma densidade volumétrica de carga, pode-se definir:

$$I = n \cdot (-e) \cdot A \cdot v_d \quad (2.4)$$

em que  $A$  é a secção transversal do semiconductor. Assim:

$$I = n \cdot (-e) \cdot A \cdot \frac{-eE}{m^*}\tau \quad (2.5)$$

$$I = \frac{n \cdot A \cdot e^2 E}{m^*}\tau \quad (2.6)$$

A densidade de corrente é definida como  $J = I/A$ , assim:

$$\vec{J} = \frac{n \cdot e^2 \cdot \vec{E}}{m^*}\tau \quad (2.7)$$

Substituindo a equação 2.1 na equação 2.7, temos:

$$\sigma \cdot \vec{E} = \frac{n \cdot e^2 \cdot \vec{E}}{m^*}\tau \quad (2.8)$$

onde:

$$\sigma = \frac{n \cdot e^2}{m^*}\tau \quad (2.9)$$

A condutividade elétrica é calculada pela fórmula:  $\sigma = n \cdot e \cdot \mu$ , assim:

$$n \cdot e \cdot \mu = \frac{n \cdot e^2}{m^*}\tau \quad (2.10)$$

em que a mobilidade  $\mu$  será dada por:

$$\mu = \frac{e \cdot \tau}{m^*} \quad (2.11)$$

### 2.1.1 Massa efetiva

Para estudar as propriedades elétricas dos semicondutores é preciso entender como o elétron se comporta no material sob a ação de um campo elétrico externo. O elétron pode ser descrito por um pacote de onda que se movimenta com velocidade de grupo [8]:

$$V_g = \frac{\partial w}{\partial k} \quad (2.12)$$

Sendo  $\varepsilon = \hbar \cdot w$  a energia do elétron, assim:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} = \hbar \cdot V_g \quad (2.13)$$

Se o elétron for submetido a uma força de módulo  $F$ , de um campo elétrico por exemplo, sua energia varia de  $d\varepsilon$  ante um percurso  $dx$ . Como  $d\varepsilon = Fdx$  podemos fazer:

$$Fdx = \hbar \cdot V_g dk \quad (2.14)$$

como  $dx = V_g dt$ , vem:

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} \quad (2.15)$$

onde  $\hbar \cdot k$  é o momento do elétron. Vemos então que a rede não afeta a forma da variação do momento. O que ela altera é a dependência da energia com o momento, que corresponde a alterar a massa do elétron. Assim:

$$a = \frac{dV_g}{dt} = \hbar^{-1} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k \partial t} = \hbar^{-1} \frac{\partial^2 \varepsilon dk}{\partial k^2 dt} \quad (2.16)$$

Substituindo o valor de  $dk/dt$ , obtém-se:

$$F = \frac{\hbar^2}{\partial^2 \varepsilon / \partial k^2} \cdot a \quad (2.17)$$

Da segunda lei de Newton  $F = m \cdot a$ , vemos que sob a ação de uma força externa, o elétron age no cristal semelhantemente a um elétron livre, porém com uma massa efetiva [16].

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 \varepsilon / \partial k^2} \quad (2.18)$$

De forma geral a massa efetiva depende da direção de  $\vec{k}$ , sendo uma grandeza tensorial que pode ser representada por uma matriz, cujo elemento  $\alpha\beta$  é dado por:

$$m_{\alpha\beta}^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 \varepsilon / \partial K_\alpha \partial K_\beta} \quad (2.19)$$

## 2.1.2 Mecanismos de espalhamento

A mobilidade dos portadores de carga em um cristal depende das interações desses portadores com os átomos da rede cristalina, com os átomos de impurezas, com defeitos da rede, com outros portadores, etc. Todas essas interações são conhecidas por mecanismos de espalhamento [16].

O estudo da mobilidade eletrônica é de grande importância na investigação e compreensão dos mecanismos de espalhamento que afetam a dinâmica do movimento dos portadores em heteroestruturas de materiais semicondutores. A investigação das características do comportamento eletrônico visa ampliar a gama de aplicações destes materiais. Neste trabalho serão apresentados os mecanismos de espalhamento mais importantes encontrados nas amostras de InAs/GaAs, bem como as respectivas faixas de temperatura de atuação. Como foi apresentado na seção 2.1.3 o mecanismo de espalhamento não é realizado de forma independente, o comportamento físico das propriedades de transporte de portadores, é dado pela soma das mobilidades eletrônicas segundo a regra de Matthiessen, em uma faixa de temperatura, que indica a ocorrência de uma combinação dos mecanismos de espalhamento.

### 2.1.2.1 Impurezas ionizadas

O espalhamento por impurezas é caracterizado por uma interação elétrica entre a carga da impureza e a carga do portador livre [17], e pode ser com impurezas do tipo  $p$  ou tipo  $n$ . Neste trabalho, o espalhamento foi feito com amostras do tipo  $n$ .

O potencial da rede é Coulombiano dependerá do átomos que formam a rede cristalina e das impurezas também presentes sobre a mesma. Para um íon com carga  $Ze$ , a perturbação no potencial de um cristal perfeito é simplesmente a energia coulombiana dada por:

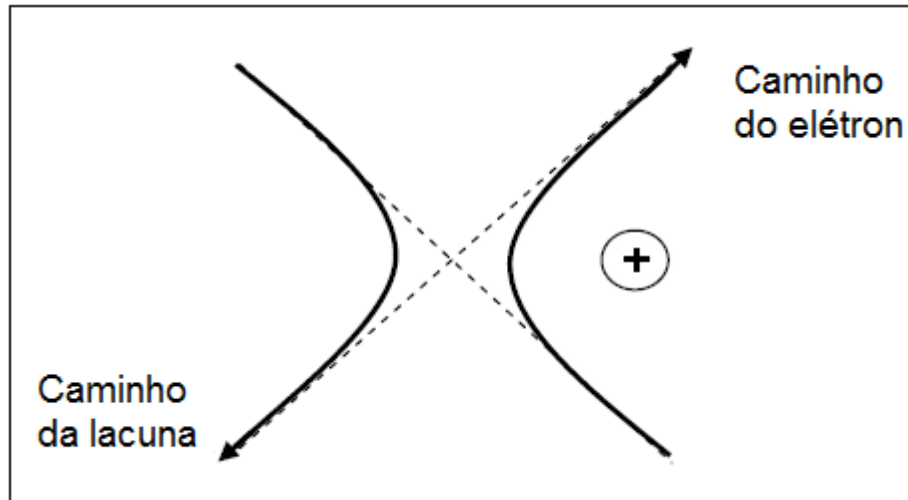
$$\Delta U = \frac{\pm Ze}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.20)$$

onde  $r$  é a distância entre o íon e o portador de carga.

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 pode ser visto na Figura 2.3.



Figura 2.3 – Trajetória de elétrons e lacunas no espalhamento por impurezas ionizadas.



Fonte: Physical properties of semiconductors 1989.

O espalhamento por impurezas ionizadas acontece principalmente em baixas temperaturas, ou para grandes concentrações de impurezas. Ao passar pelas proximidades de um átomo ionizado, o portador sofre um desvio em sua trajetória, devido à interação entre o campo elétrico do átomo ionizado e a carga do portador. Naturalmente, quanto maior a velocidade do portador, menor a deflexão sofrida, assim, o espalhamento por impurezas ionizadas é mais relevante em baixas temperaturas, o que implica uma menor velocidade térmica dos portadores.

A relação da mobilidade para impurezas [18, 19] é dada por:

$$\mu_{ic} = \frac{4\pi\epsilon_s^2\hbar^3k^3}{e^3m^{*2}N_{ic}I_B} \quad (2.21)$$

em que  $N_{ic}$  é a densidade de impurezas no poço de potencial devido às impurezas remotas e/ou na interface,  $\epsilon_s$  é a constante dielétrica em baixa frequência,  $\hbar$  é a constante reduzida de Planck,  $k^2 = 2m^*E/\hbar^2$ , e o cálculo de  $I_B$  é dado por pela equação 2.22.

$$I_B(\beta) = \int_0^\pi \frac{\sin^2\theta}{(\sin\theta + \beta)^2} d\theta \quad (2.22)$$

onde  $\beta = S_0/2k$  e  $S_0$  é a constante de blindagem devido a impurezas e pode ser definida como:

$$S_0 = \frac{e^2n}{2\epsilon_s k_B T} \quad (2.23)$$

em que  $n$  é a densidade de portadores,  $k_B$  trata-se da constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura na rede em kelvin.

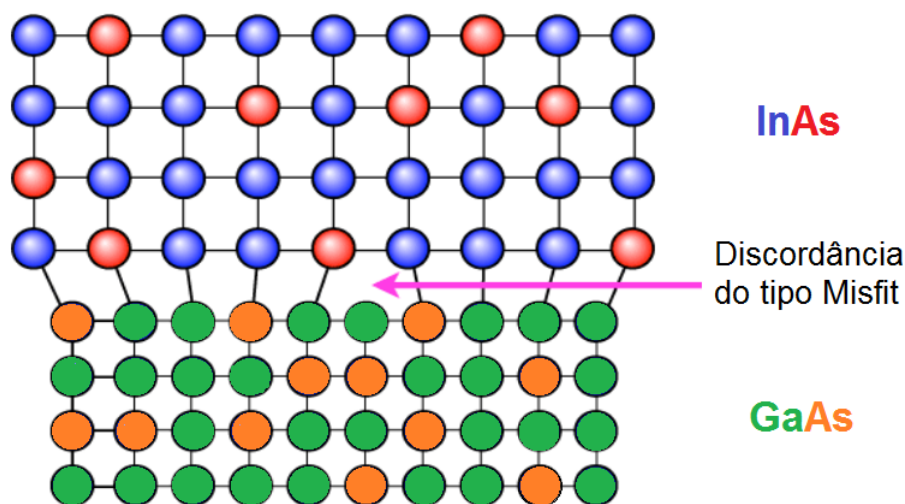
### 2.1.2.2 Linhas de discordância

Defeito cristalino é uma imperfeição no arranjo periódico regular dos átomos em um cristal. Na realidade, os cristais nunca são perfeitos e contêm vários tipos de imperfeições e defeitos, que afetam muitas das suas propriedades mecânicas ou elétricas, alterando propriedades importantes como a deformações plásticas de metais, e a condutividade eletrônica dos semicondutores. As discordâncias podem ser interpretadas como sendo descontinuidades de planos atômicos no interior de um cristal.

Estes defeitos podem ser produzidos quando o cristal está sendo crescido, e existe um grande interesse no uso de materiais cristalinos crescidos com essa incompatibilidade nas posições atômicas para a construção de dispositivos eletrônicos [20]. Um semiconductor pode ser obtido, através do crescimento epitaxial de uma camada de material mais fino (filme), sobre outro material mais espesso denominado de substrato, a qual os materiais possuem parâmetros de rede diferentes. Assim, a energia de formação resultante do desfaseamento na posição atômica irá produzir tensões na rede, podendo ser relaxadas na forma discordâncias.

Para as amostras investigadas neste trabalho ocorreram discordâncias do tipo *misfit* e do tipo *threading*. Discordância do tipo *misfit* [21] acontece devido desajuste da rede cristalina conforme pode ser visto na Figura 2.4.

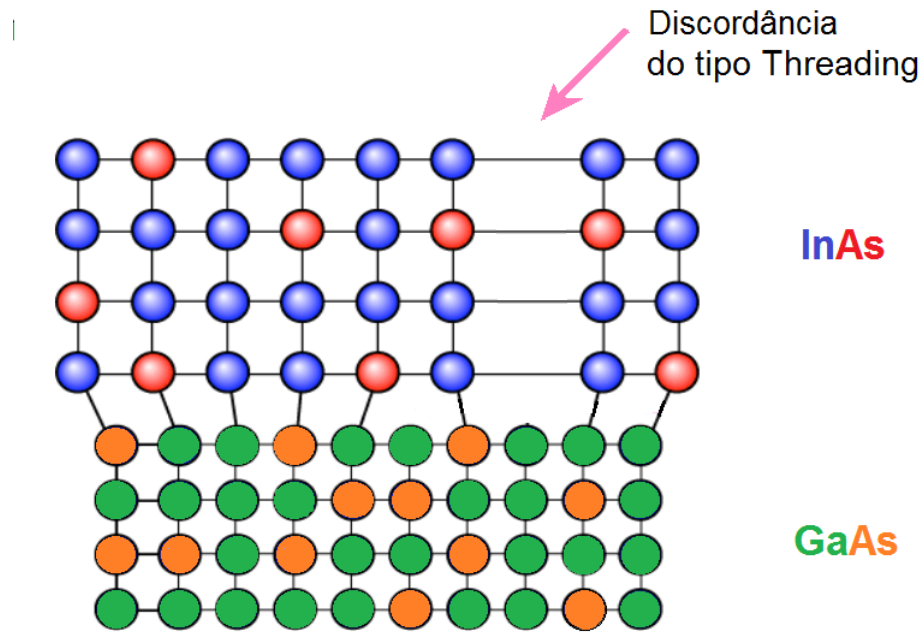
Figura 2.4 – Ilustração da discordância do tipo *misfit*, que ocorre devido a incompatibilidade das constantes de rede.



Fonte: Prof. Douglas J. Paul University of Glasgow. Acessado dia 22/05/2020.

A discordância do tipo *threading* [22, 23], surge quando o desajuste da rede cristalina atravessa a camada do material. Conforme pode ser visto na Figura 2.5, a falta de uma camada de InAs, termina na superfície da camada do GaAs ocasionando a discordância.

Figura 2.5 – Ilustração da discordância do tipo threading que atravessam a camada de InAs terminando na superfície.



Fonte: Prof. Douglas J. Paul University of Glasgow. Acessado dia 22/05/2020.

A mobilidade devido ao espalhamento por discordâncias é calculada pela fórmula:

$$\mu_{dis} = \frac{4\pi\epsilon_s^2 k^4 a^2}{e^3 m^{*2} N_{dis} I_t} \quad (2.24)$$

em que  $I_t$  é definido por:

$$I_t = \frac{1}{2} \xi^2 \int_0^1 \frac{1}{(1 + \xi^2 u^2) \sqrt{1 - u^2}} du \quad (2.25)$$

sendo que  $u$  está relacionado com a interação elétron-impureza,  $\xi = ka_B$  é um parâmetro adimensional e  $a_B$  é o raio de Bohr, que é definido por:

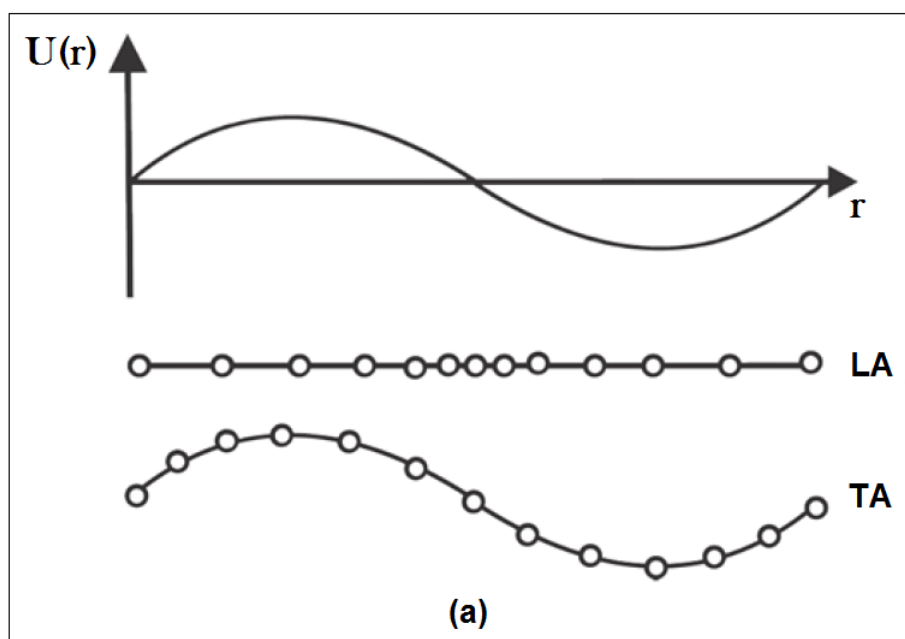
$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_s^2 \hbar^2}{e^2 m^*} \quad (2.26)$$

### 2.1.2.3 Fônons acústicos

O espalhamento por fônons acústicos têm a sua origem nas vibrações da rede e está ligado diretamente a temperatura. Os átomos que vibram em fase de modo similar ao comportamento das ondas acústicas são chamados de fônons acústicos. Em um cristal eles podem espalhar os portadores por dois diferentes e independentes processos: o espalhamento piezoelétrico e o espalhamento por potencial de deformação [24].

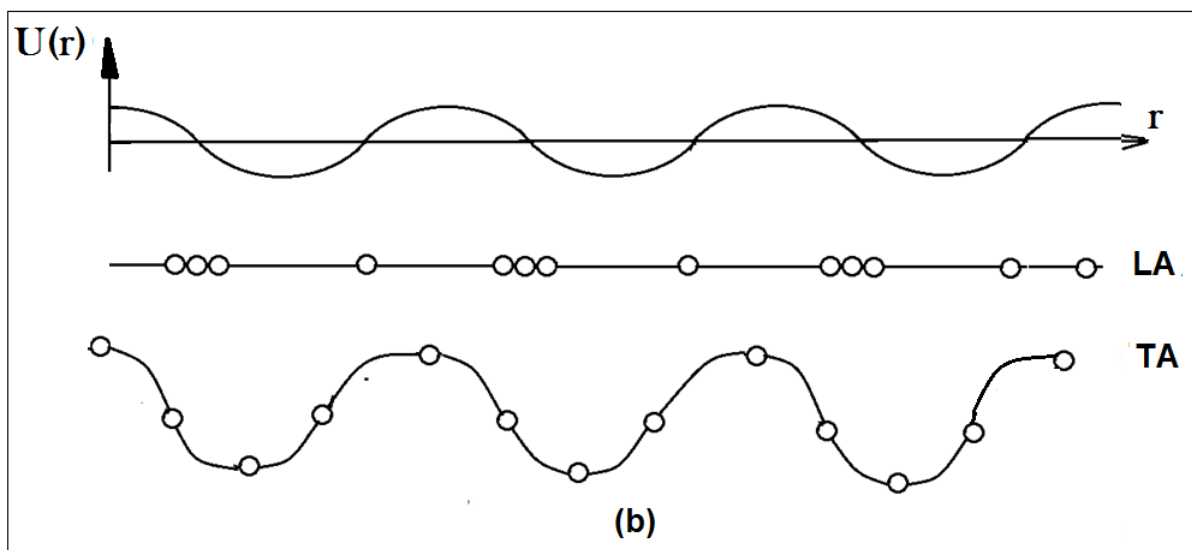
Os espalhamentos por fônons acústicos são espalhamentos mecânicos e podem ser analisados qualitativamente através da Figura 2.6 no centro da zona de Brillouin (a), e pela Figura 2.7 que representa o extremo da zona de Brillouin (b). Nestas Figuras os deslocamentos  $U(r)$ , de uma cadeia de átomos da rede Bravais para fônons acústicos estão na direção longitudinal (LA) e na direção transversal (TA) localizados nas zonas de Brillouin.

Figura 2.6 – Deslocamento de uma cadeia diatômica por fônons LA e TA no centro da zona de Brillouin.



Fonte:Physical properties of semiconductors 1989.

Figura 2.7 – Deslocamento de uma cadeia diatômica por fônons LA e TA na fronteira da zona de Brillouin.



Fonte:Physical properties of semiconductors 1989.

Pode-se perceber através das Figuras que a distância entre os átomos adjacentes são fortemente afetados (há uma concentração de átomos) por fônons longitudinais acústicos (LA), tanto no centro como no extremo da zona de Brillouin, e pouco afetado pelos fônons transversais (TA) (continua periódico). Os fônons longitudinais irão produzir uma modulação na rede cristalina e perturbar a periodicidade da rede, produzindo o denominado espalhamento por potencial de deformação de elétrons e buracos.

### 2.1.2.3.1 Piezoelétricos

Os deslocamentos atômicos produzidos pelas vibrações da rede em modo acústico introduzem um potencial se os átomos forem parcialmente ionizados. Esses íons produzem campos elétricos internos que mudam no tempo e espaço, causados principalmente por fônons acústicos longitudinais (LA). O espalhamento relacionado com este efeito é denominado espalhamento piezoelétrico, que ocorre em cristais sem um centro de simetria, que inclui todos os semicondutores compostos [25].

Um tempo de relaxação pode ser definido para o mecanismo do potencial piezoelétrico, porque a mudança de energia durante as colisões é pequena. O tempo de relaxação é dado por:

$$\tau_{pe}(\varepsilon) = \frac{2\sqrt{2}\pi\hbar^2 \cdot D \cdot s^2 \cdot \sqrt{\varepsilon}}{(ehpz/\varepsilon)^2 \sqrt{m^*} \cdot kT} \quad (2.27)$$

em que  $P$  é definido por:

$$P = \sqrt{\frac{h_{pz}^2}{Ds^2\varepsilon}} \quad (2.28)$$

em que  $T$  é temperatura e  $\varepsilon$  é energia. A mobilidade para o tempo de relaxação é:

$$\mu_{dp} = \frac{16\sqrt{2}\pi \cdot \varepsilon \hbar^2}{3eP^2 \cdot (m^*)^{3/2} \cdot \sqrt{kT}} \quad (2.29)$$

### 2.1.2.3.2 Potencial de deformação

Como foi dito acima na presença de fônons acústicos, átomos vizinhos se deslocam na mesma direção, e assim, alteram a configuração da rede cristalina mudando o seu potencial. Esse potencial deformado espalha o portador de carga, sendo proporcional à tensão na rede. A mobilidade devido ao potencial de deformação por fônons acústicos pode ser calculada pela fórmula 2.30:

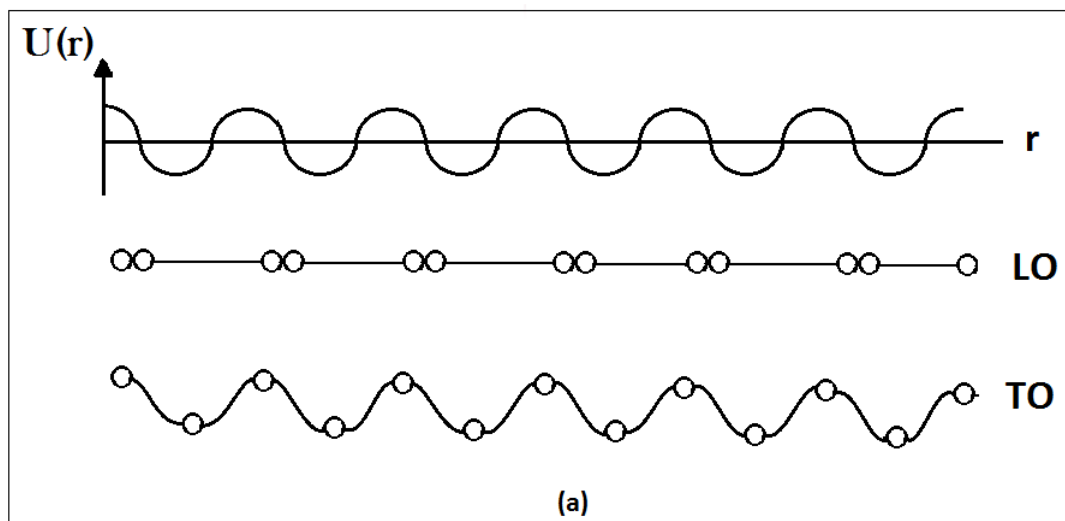
$$\mu_{dp} = \frac{e\hbar^3 u_i^2 \delta Z_0}{m^{*2} E_d^2 k_B T} \quad (2.30)$$

onde  $E_d$  é a constante do potencial de deformação,  $u_l$  é a velocidade longitudinal dos fônons acústicos e  $\delta$  é a densidade do cristal. O espalhamento por potencial de deformação possui uma defasagem de  $90^\circ$  [26] em relação ao espalhamento acústico piezoeletrico, fazendo com que os dois mecanismos de espalhamento sejam independentes.

#### 2.1.2.4 Fônons ópticos

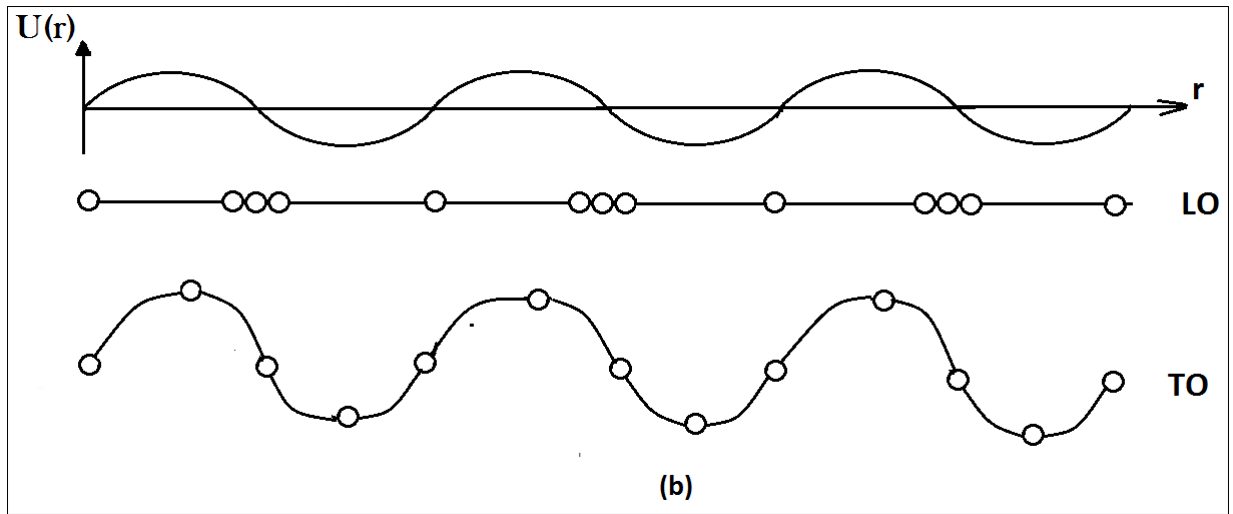
Os fônons ópticos também espalham elétrons por dois processos independentes. Estes são referidos como espalhamento de potencial de deformação e do espalhamento polar. O espalhamento por potencial de deformação por fônons ópticos é similar ao dos fônons acústicos e polar, o deslocamento  $U(r)$  de uma cadeia de átomos da rede bravais para os fônons óptico longitudinal (LO) e óptico transversal (TO) são mostrados nas Figuras 2.8 e 2.9 .

Figura 2.8 – Deslocamentos de uma cadeia diatômica para os fônons LO e TO no centro da zona de Brillouin (a)



Fonte: Physical properties of semiconductors 1989.

Figura 2.9 – Deslocamentos de uma cadeia diatômica para os fônons LO e TO na borda da zona de Brillouin (b).



Fonte: Physical properties of semiconductors 1989.

De maneira semelhante aos fônons acústicos, a expansão e contração da célula unitária são dominadas pelos fônons ópticos longitudinais. O espalhamento devido a fônons ópticos de modo polar ocorre devido ao campo elétrico causado pela polarização de íons na célula primitiva induzindo vibrações na rede de modo óptico.

Assim, quando o cátion e o ânion vibram uns contra os outros em um modo fônon óptico longitudinal, é criado um campo de polarização. Isso causa uma forte perturbação dos elétrons, resultando na dispersão polar do fônon óptico.

A mobilidade devido ao espalhamento por fônons ópticos de modo polar é calculada através da formula [27, 28]:

$$\mu_{po} = \frac{4\pi\epsilon_p\hbar^3}{e\theta_{po}k_B m^{*2} Z_0} \cdot [e^{\frac{\theta_{po}}{T}} - 1] \quad (2.31)$$

onde  $\theta_{po}$  é a temperatura do fônon óptico e  $Z_0$  é a largura do poço quântico.

#### 2.1.2.5 Espalhamento por desordem em ligas

O espalhamento por desordem em ligas [29] ocorre na interface entre o GaAs e o InAs formadores da liga semicondutora. Nesta interface é formada uma estrutura cristalina não periódica, o que ocasiona variações do potencial da rede  $V_A$  (potencial devido ao GaAs) e  $V_B$  (potencial devido ao InAs) espalhando o portador de carga.

A mobilidade eletrônica pode ser calculada através da formula:

$$\mu_{al} = \frac{16}{3b} \frac{e\hbar^3}{x(x-1)m^{*2}\Omega_0\Delta V_{al}^2} \quad (2.32)$$

em que  $\Omega_0$  é o volume ocupado por um átomo na liga,  $\Delta V_{al}^2$  é a diferença de potencial entre os componentes da liga,  $x$  é a fração da liga e  $b$  é o fator de Fang-Howard que pode ser calculado pela fórmula;

$$b = \left( \frac{33e^2 m^* n}{8\epsilon_s \hbar^2} \right)^{1/3} \quad (2.33)$$

onde  $\epsilon_s$  é Constante dielétrica em baixa frequência.

### 2.1.3 Regra de Mathiessen

Descobrir as propriedades de transporte eletrônico em um sólido, e como ele ocorre dentro dos materiais, é de extrema importância no seu estudo, na qual se inclui também os semicondutores. Os elétrons livres podem se mover no interior de um cristal ideal (perfeito) sem perder energia. Porém, qualquer alteração na estrutura do cristal causará o espalhamento dos elétrons, que resultará em uma alteração em sua mobilidade. Esta mudança da mobilidade pode ter influência também dos fônons (vibração da rede) e impurezas.

De uma maneira geral, os eventos de espalhamento são independentes, o que permite o uso da regra de Matthiessen, que é definida como sendo a soma dos espalhamentos envolvidos.

A regra de Matthiessen pode ser apresentada em função das resistividades da forma:

$$\rho = \rho_T + \rho_i + \rho_d \quad (2.34)$$

em que  $\rho_T$ ,  $\rho_i$  e  $\rho_d$  são resistividades devido aos fônons, impurezas e a ligas, devido a deformações por exemplo como discordâncias. Esta regra também pode ser escrita em termos das mobilidades, sabendo que a condutividade é  $\sigma = \frac{1}{\rho}$  e  $\sigma = n \cdot q \cdot \mu$ , assim:

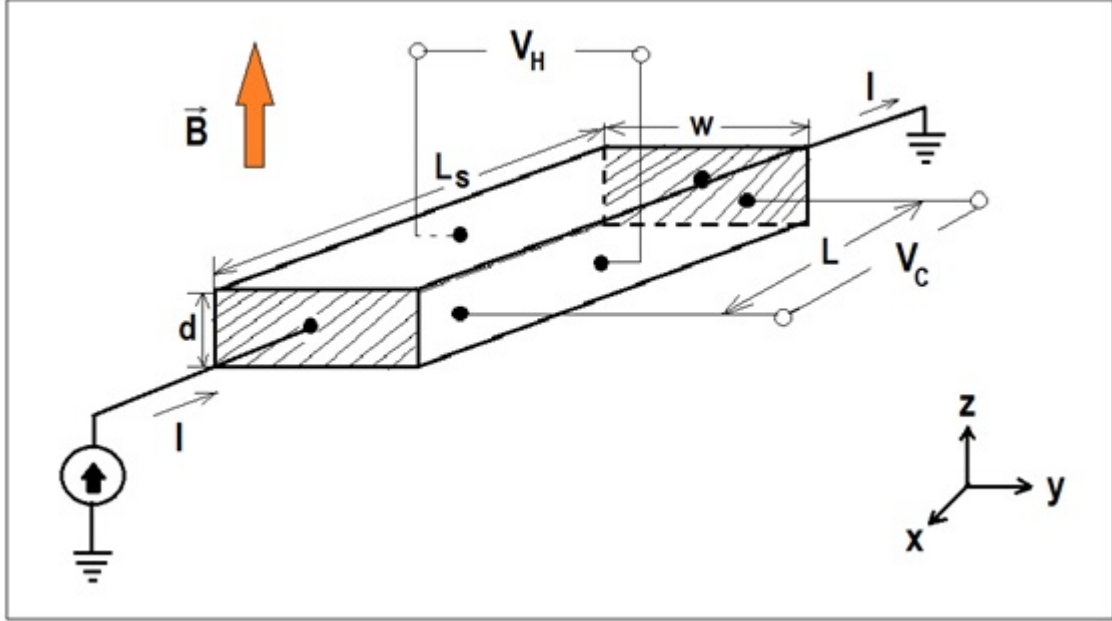
$$\mu^{-1} = \Sigma \mu_i^{-1} \quad (2.35)$$

## 2.2 Efeito Hall

As medidas de efeito Hall são utilizadas para obter a concentração, o tipo de portador de carga e a mobilidade dos portadores majoritários em um semicondutor. Este efeito foi descoberto, quando Hall (1879) realizou experimentos envolvendo a condução elétrica de placas metálicas sujeitas a campos magnéticos. Para o estudo do efeito Hall, consideraremos um semicondutor no formato de uma barra ilustrada na Figura 2.10.



Figura 2.10 – Configuração para medidas de resistividade e Efeito Hall onde  $L_s$  é o comprimento da,  $w$  a largura e  $d$  a espessura da barra. Pelo comprimento da barra é percorrida uma corrente elétrica  $I$ , em que  $V_H$  é medida uma diferença de potencial denominada de tensão Hall, e  $V_c$  é a tensão de condução.



Fonte: Look DC (1992) Electrical characterization of GaAs materials and devices. Wiley, New York.

As principais vantagens de se utilizar um semicondutor no formato de barra, são a fabricação e simplicidade de análise devido à uniformidade das linhas de campo elétrico ao longo da amostra. Supondo que os portadores de carga sejam elétrons e que todos estejam com velocidade  $v$  e na direção  $x$ , antes da aplicação do campo magnético. Após a aplicação do campo magnético na direção  $z$ , os elétrons experimentam uma força:

$$\vec{F} = -e \cdot \vec{v} \times \vec{B} \quad (2.36)$$

Esta força terá uma componente  $y$   $-e \cdot (\vec{v} \times \vec{B})_y$  logo:

$$F_y = -e(v_z v_x - B_x B_z) \quad (2.37)$$

A carga elétrica se acumulará na face  $+y$  da amostra até que uma força oposta  $-e \cdot E_y$  entre em equilíbrio com a força  $e \cdot v_x B_x$ . A densidade de corrente total é, naturalmente,  $j_x = n \cdot e \cdot v_x$ , de modo que  $e \cdot E_y = e v_x \cdot B = -e B \cdot j_x / ne$ . O coeficiente Hall  $R_H$  é definido como:

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B} = -\frac{1}{ne} \quad (2.38)$$

Sendo a equação 2.38 válida para a maioria dos materiais semicondutores e, em particular o GaAs. Uma análise mais precisa o coeficiente Hall é dado por:

$$R_H = -\frac{r}{ne} \quad (2.39)$$

em que  $r$  é o fator Hall, que tipicamente varia entre 1.0 e 1.3 para GaAs, sob uma grande variedade de temperaturas, pureza da amostra e outros fatores.

Para baixos valores de  $E$ , a velocidade  $v_x$  varia linearmente com  $E_x$ , isto é,  $v_x = \mu E_x$ . O coeficiente de proporcionalidade entre  $v$  e  $E$ , chamado de mobilidade  $\mu$ , é quase isotrópico para GaAs. A mobilidade pode então ser medida da seguinte forma:

$$\mu = \frac{v_x}{E_x} = -\frac{j_x}{neE_x} = \frac{j_x}{E_x} \frac{E_y}{j_x B} = \frac{1}{B} \frac{E_y}{E_x} = \frac{1}{B} \left( \frac{V_C w}{V_H l} \right)^{-1} = \frac{1}{B} \frac{V_H l}{V_C w} \quad (2.40)$$

onde  $V_C = E_x l$  é a tensão de condução, ou seja, a tensão entre os contatos paralelos para o fluxo de corrente, e  $V_H = E_y w$  é a tensão entre os contatos perpendiculares para o fluxo de corrente, a tensão Hall. As equações 2.38 e 2.40 constituem as equações para o experimento Hall. A condutividade de mobilidade é definida pela equação:

$$\sigma = n \cdot e \cdot \mu \quad (2.41)$$

onde  $\sigma$  é a condutividade. Quando todos os elétrons têm a mesma magnitude da velocidade no eixo  $x$ , a mobilidade Hall  $\mu_H = \mu$ , e da equação 2.38 temos que:

$$R_H = \frac{-1}{n_H \cdot e} \quad (2.42)$$

onde  $n_H$  é a concentração de portadores Hall. Novamente, para todos os elétrons de mesma velocidade,  $n_H = n$

### 2.2.1 Estrutura de van de Pauw

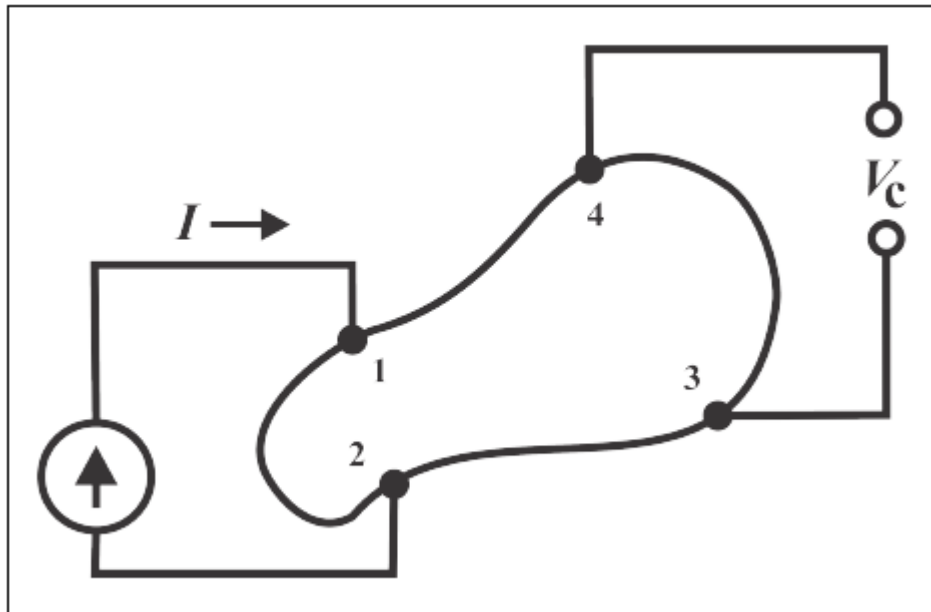
A caracterização de um material semicondutor é muito importante, pois trás informações sobre o seu comportamento elétrico como: resistividade, condutividade, energia de ativação, a mobilidade eletrônica e a concentração de portadores de carga. Durante este procedimento é importante saber as dimensões da amostra do material investigado, porém, nem sempre possuem formas regulares, o que pode dificultar os cálculos de suas propriedades, os tornando mais trabalhosos. Uma forma de contornar esse problema é através do método Van der Pauw. O método de Van der Pauw é o mais utilizado para as medições de resistência elétrica em materiais semicondutores, por ser um método que independe do formato da amostra, sendo necessário apenas a sua espessura. Além disso,

tal método contorna vários erros em outras metodologias, como descrito no próximo parágrafo.

Van der Pauw formulou essa técnica em 1958 para evitar os erros como desalinhamento dos contatos, efeito Seebeck, em que a amostra esteja montada na presença de um gradiente de temperatura, e resolveu os problemas de potencial [24].

Neste trabalho, foi utilizado o efeito Hall pela da técnica de Van der Pauw. Há outras formas de realizar o efeito Hall, mas essa melhor se adapta as amostras altamente resistivas e, mesmo para as que são de baixa resistividade, é a técnica mais confiável, pois é a única que elimina a maior parte das contribuições espúrias. A caracterização com 4 pontos utilizando o método de van der Pauw, na qual são realizadas medidas de resistividade pela inclusão da permutação entre os quatro contatos, dois são usados para a aplicação de uma corrente elétrica, e os outros dois na leitura de uma tensão, conforme pode ser visto na Figura 2.11.

Figura 2.11 – Forma arbitrária de uma amostra indicando os contatos para a medida de resistividade através da técnica de van der Pauw. Em que  $I$  é a corrente elétrica e  $V_c$  a tensão de condução.



Fonte: Look DC (1992) Electrical characterization of GaAs materials and devices. Wiley, New York.

Seja  $R_{ij,kl} = V_{kl}/I_{ij}$ , onde a corrente entra no contato  $i$  e sai no contato  $j$ , com  $V_{kl} = V_k - V_l$ . Resistividade na ausência de campo magnético é calculada pela expressão:

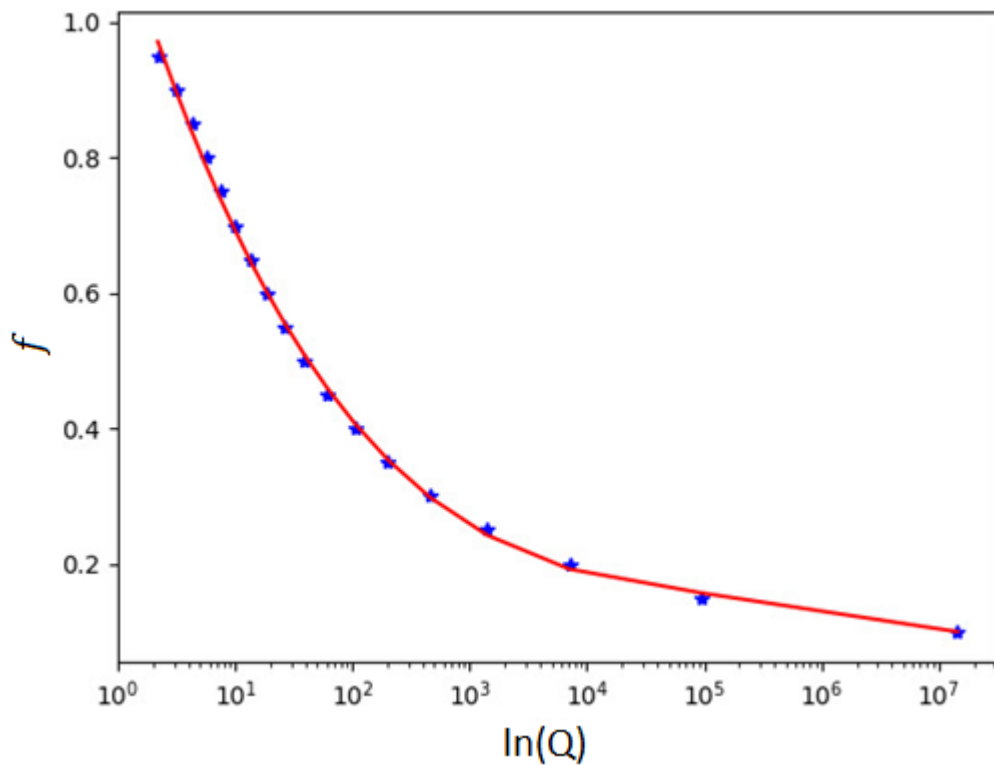
$$\rho = \frac{\pi d}{\ln 2} \left[ \frac{R_{21,34} + R_{32,41}}{2} \right] \cdot f \quad (2.43)$$

onde  $f$  é determinado da equação transcendental:

$$\frac{Q-1}{Q+1} = \frac{f}{\ln 2} \cdot \operatorname{arccosh} \left[ \frac{1}{2} \exp\left(\frac{\ln 2}{f}\right) \right] \quad (2.44)$$

A curva de  $f$  vs  $Q$  é apresentada na Figura 2.12.

Figura 2.12 – Função de taxa de resistividade usada para corrigir os resultados de Van der Pauw para a forma de amostra assimétrica.



Fonte: Próprio autor

A resistividade  $\rho$  pela técnica de Van de Pauw é dada por:

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{\pi d}{\ln 2} \cdot \frac{1}{8} (R_{21,34} - R_{12,32} + R_{32,41} - R_{23,41}) \cdot f_A \\ &+ \frac{\pi d}{\ln 2} \cdot \frac{1}{8} (R_{43,12} - R_{34,12} + R_{13,23} - R_{41,23}) \cdot f_B \end{aligned} \quad (2.45)$$

onde  $f_A$  e  $f_B$  são determinados através de  $Q_A$  e  $Q_B$  respectivamente pela fórmulas abaixo:

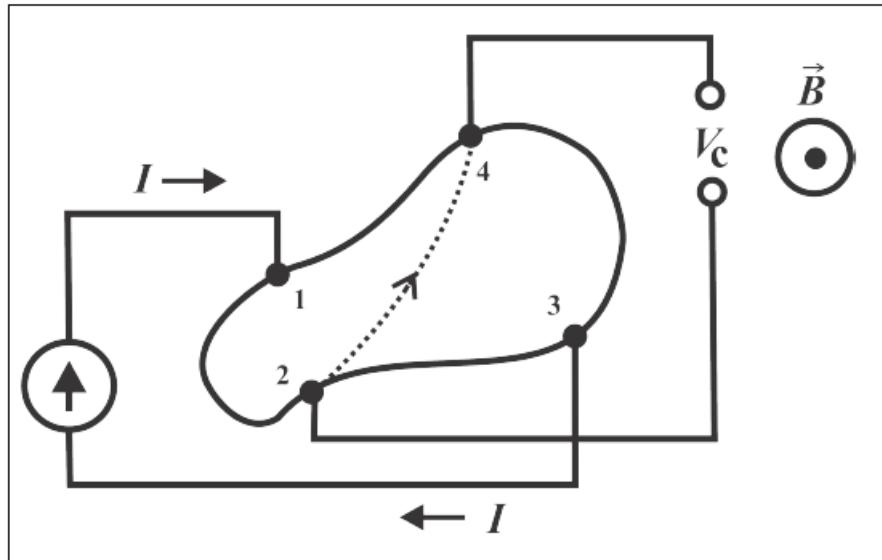
$$Q_A = \frac{R_{21,34} - R_{12,34}}{R_{32,41} - R_{23,41}} \quad (2.46)$$

onde

$$Q_B = \frac{R_{43,12} - R_{34,12}}{R_{14,23} - R_{41,23}} \quad (2.47)$$

A mobilidade Hall é determinada utilizando a configuração da Figura 2.13, em que os contatos de corrente e tensão são cruzados.

Figura 2.13 – Forma arbitrária de uma amostra indicando os contatos para a medida de efeito Hall através da técnica de van der Pauw.



Fonte: [29]

O cálculo do coeficiente Hall foi realizado pela fórmula abaixo. Para minimizar a magnetoresistência e outros efeitos fizeram-se necessários uma média do campo magnético corrente e o campo com a polaridade invertida:

$$R_H = \frac{d}{B} \cdot \frac{1}{8} (R_{31,42}(+B) - R_{13,42}(+B) + R_{42,13}(+B) - R_{24,13}(+B)) \\ + \frac{d}{B} \cdot \frac{1}{8} (R_{13,42}(-B) - R_{31,42}(-B) + R_{24,13}(-B) - R_{42,13}(-B)) \quad (2.48)$$

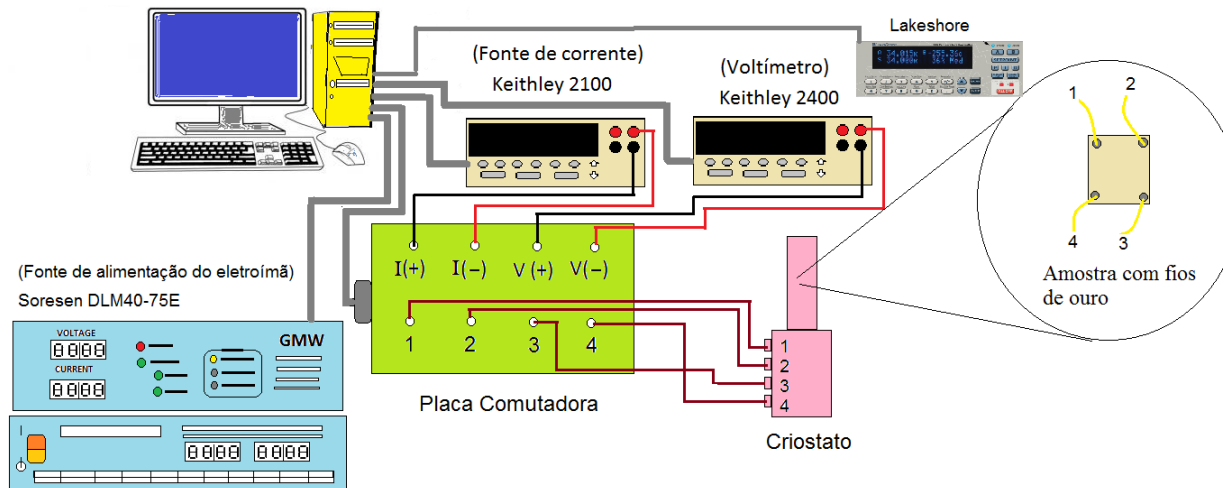
Embora a técnica de van der Pauw seja aplicada a qualquer forma arbitrária para qualquer amostras investigadas, na prática as formas simétricas quase sempre são usadas. Neste trabalho as amostras foram clivadas em um formato aproximadamente quadrado.

## 3 Materiais e Métodos

### 3.1 Projeto e montagem da placa Hall

Para o desenvolvimento da pesquisa no programa de Materiais para Engenharia que também auxilia para disciplinas do mesmo programa, foi desenvolvido um sistema automatizado de medidas Hall pela técnica de van de Pauw no laboratório de Laboratório de Caracterização de Materiais (LCM), do Instituto de Física e Química (IFQ). Para a realização das medições foram utilizados uma *Source Meter Keithley 2400*, um multímetro, também da marca Keithley 2100, uma placa DAQ, uma fonte de alta corrente da marca GMW, um eletroímã, um sistema com criostato, um ultrassom, ferro de solda e um microscópio. Todo o sistema foi automatizado para a coleta automática dos dados. Para isso, foi utilizado o programa que permitiu a realização de todas as operações de variação da temperatura, inversão de campo magnético, ativação do campo elétrico e medida de corrente, apresentação de gráficos em tempo real e arquivamento dos dados para análise posterior. O esquema de montagem da instrumentação é apresentado na Figura 3.1.

Figura 3.1 – Esquema de montagem das fontes, juntamente com o multímetro e o controle de temperatura do criostato para realização de medidas na amostra.



Fonte: Próprio Autor

#### 3.1.1 Sistemas de medições

Para a realização das medições foram utilizados os equipamentos descritos acima que se encontram no laboratório de pesquisa (LCM). Foi construída uma placa que fazia as comutações dos contatos na amostra. Essas medidas eram acompanhadas o tempo todo, para garantir a segurança dos equipamentos, contra eventuais quedas de energia ou

qualquer problema que ocorresse. Cada medida durava em média 10 horas. O sistema foi todo automatizado para a coleta automática dos dados permitindo a realização de todas as operações de variação da temperatura, inversão de campo magnético, ativação do campo elétrico e medida de corrente, apresentação de gráficos em tempo real e arquivamento dos dados para análise posterior. A seguir será explicado de forma mais detalhada as etapas de funcionamento do programa em Labview.

### 3.1.1.1 Configurações do sistema

São inicializados simultaneamente os equipamentos Keithley 2400 e 2100, Lakeshore e GMW (Figuras 3.2, 3.3 e 3.4). Para isso, são enviados os valores de temperatura inicial, temperatura final e o passo de varredura das temperaturas, para a criação de um vetor de temperaturas que será enviado para controlar a Lakeshore. São enviados também dados de corrente para a fonte GMW para controle do campo magnético aplicado sobre a amostra. E na fonte Keithley 2400 é configurado o valor máximo de corrente.

Figura 3.2 – A esquerda a foto da Keithley 2400 usada como fonte de corrente, e a direita a foto Keithley 2100 usada como voltímetro.



Fonte: Próprio Autor

Figura 3.3 – GMW equipamento utilizado para o controle do campo magnético no eletroímã. É este equipamento que controla a intensidade do campo magnético bem como a sua inversão.



Fonte: Próprio Autor

Após o envio do valor de temperatura para realizar a medida, o programa analisa constantemente se os sensores de temperatura na amostra estão nos valores desejados. Caso isso não ocorra o processo continua até que o valor de temperatura dentro de uma faixa de erro seja obtido. Após obter esse valor o programa segue para a etapa de medições.

Esse processo se repete para todos os valores de temperatura enviados na inicialização do programa.

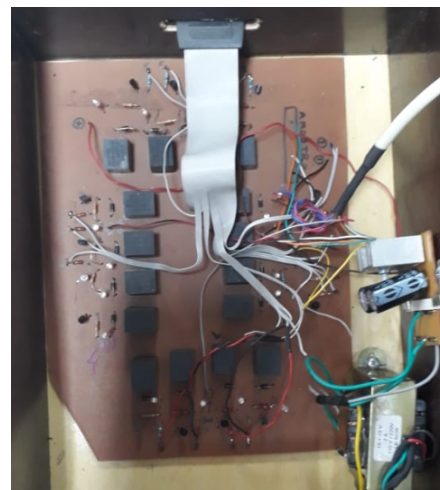
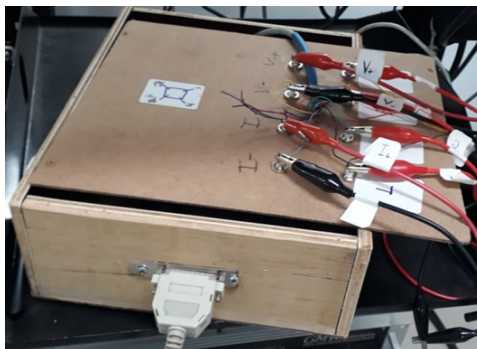
Figura 3.4 – A Lakeshore mostra a temperatura. Em A: é mostrada a temperatura atual da amostra, em 1: a temperatura desejada para as medições, e em B: a temperatura do ponto frio que está localizado do lado da amostra.



Fonte: Próprio Autor

O programa envia o comando para a placa DAQ, que controla os reles da placa Hall 3.5 e realiza todas as operações de medida de resistividade e RH pela técnica de Van der Pavn para aquele valor de temperatura. Esse valor é apresentado em um gráfico na tela do usuário em função da temperatura 3.6. Além disso, os dados são salvos em arquivos de dados.

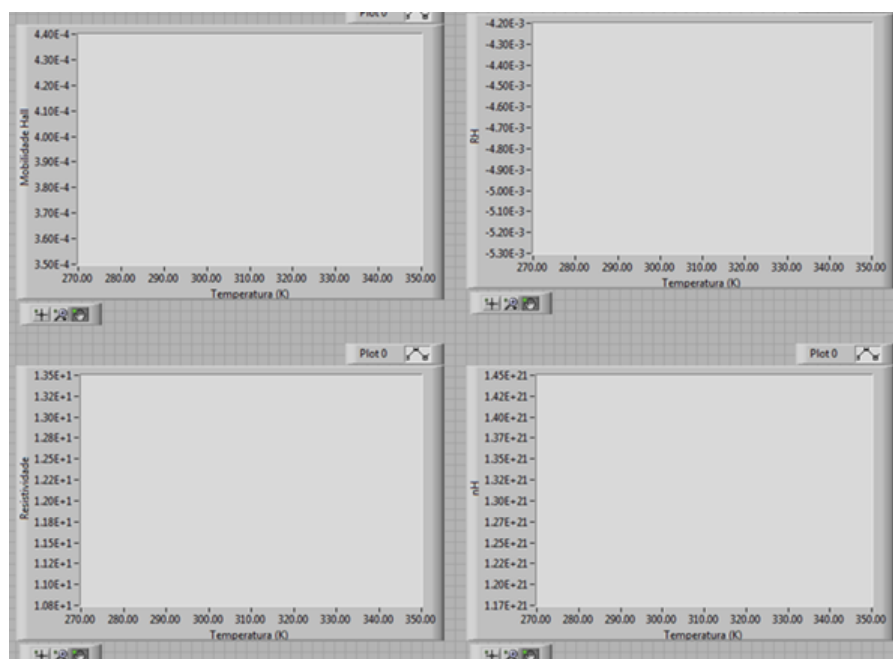
Figura 3.5 – Placa Hall. Responsável pela corrente elétrica e tensão gerada na amostra durante a queda de temperatura.



Fonte: Próprio Autor



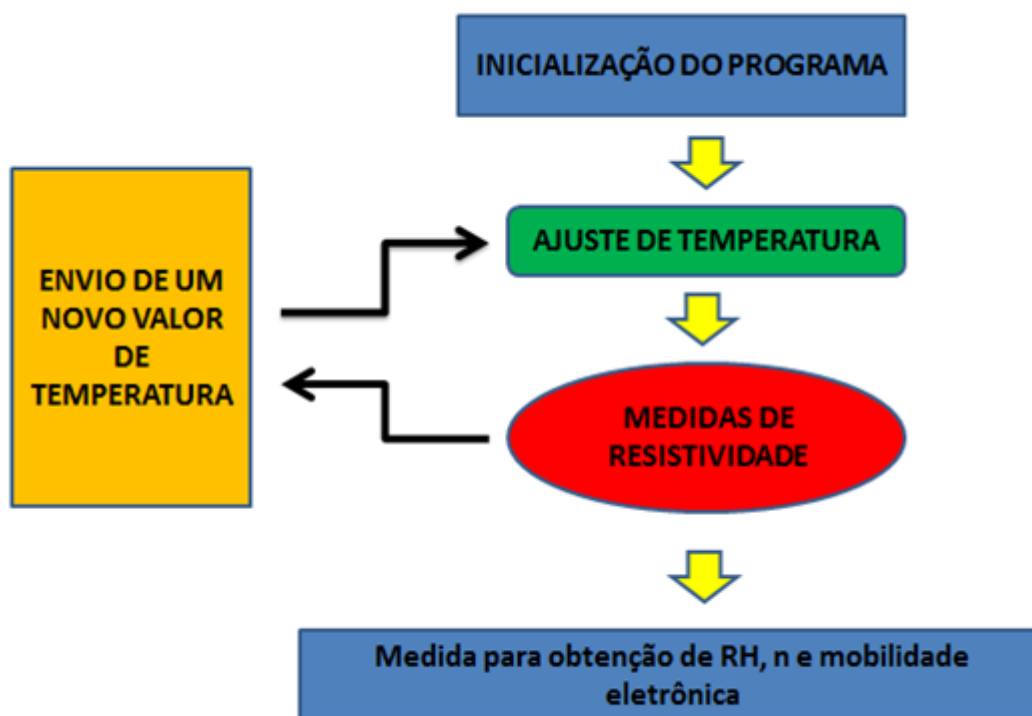
Figura 3.6 – Gráficos do programa em Labview para as leituras de mobilidade Hall,  $R_H$  e resistividade  $n_H$



Fonte: Próprio Autor

Um resumo de todo o processo de controle, medida, visualização e coleta de dados é apresentado no diagrama de blocos da Figura 3.7.

Figura 3.7 – Diagrama de blocos do programa em Labview.



Fonte: Próprio Autor

## 3.2 Preparação das amostras

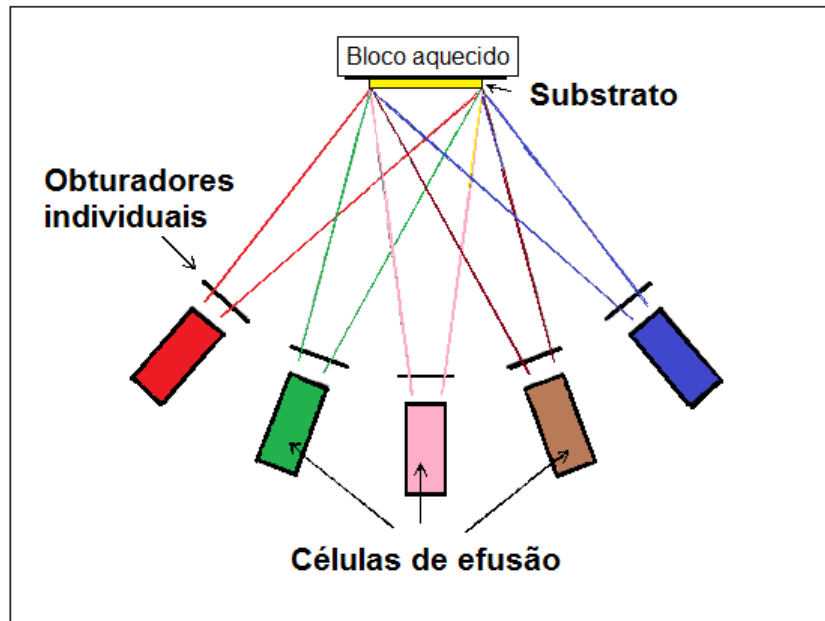
### 3.2.1 Crescimento das amostras

A Epitaxia por feixe molecular (Molecular Beam Epitaxy - MBE) é uma técnica avançada para deposição epitaxial de filmes finos em ultra alto vácuo (da ordem de  $10^{-10}$  Torr) [30], em que os feixes moleculares dos materiais são gerados no interior das células de efusão altamente estáveis, que direcionam para um substrato alvo aquecido, onde ocorre o crescimento das camadas epitaxiais [31]. Este método de crescimento permite rigoroso controle na dopagem, da composição da liga e espessura das camadas crescidas. Cada célula de efusão possui uma abertura, e um obturador que controla o fluxo de material que será enviado para o substrato, permitindo o crescimento de camadas alternadas de diferentes materiais [32]. Todas as células de efusão se encontram na câmara de ultra-alto vácuo, e estão orientadas na direção do substrato.

Em cada célula de efusão é colocado um elemento em forma sólida, que será evaporado através de um sistema de filamentos resistivos. Controladores eletrônicos de potência e sensores termopares permitem que a temperatura da célula permaneça constante.

O vapor da substância sob pressão no interior da célula de efusão é lançado na direção do substrato, através de um feixe atômico ou molecular, e absorvido por ele conforme pode ser visto na Figura 3.8. O material a ser crescido no substrato é previamente escolhido, como por exemplo, Ga, As e In.

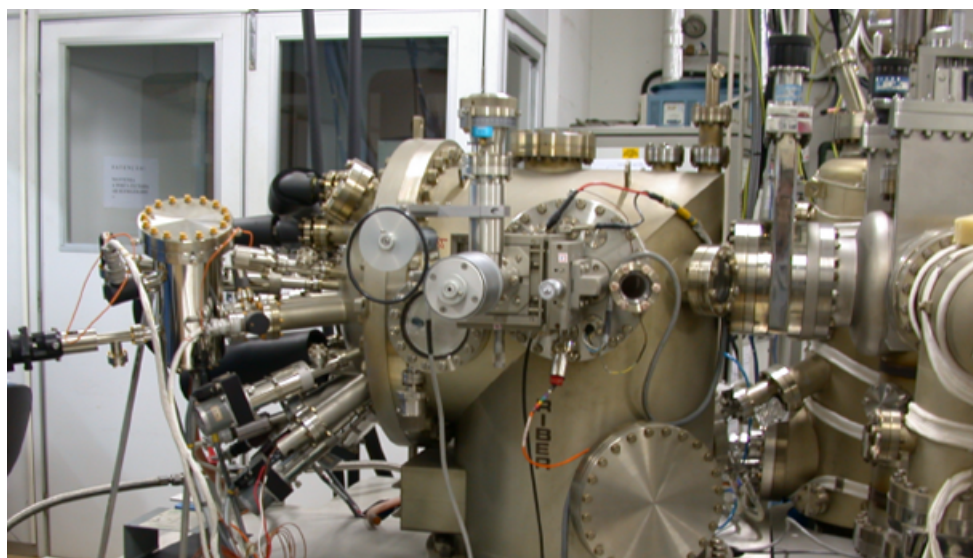
Figura 3.8 – Ilustração esquemática das partes essenciais de um sistema de Epitaxia por Feixe Molecular. A ilustração acima contém 5 células de efusão.



Fonte: Próprio Autor

O sistema de MBE da UFMG, Figura 3.9 possui uma grande câmara de aço-inox de diâmetro entre 360 e 450 mm, com pressão residual por volta de  $2 \cdot 10^{-10}$  Torr, local em que localiza-se o substrato, sobre o qual pretende-se fazer o crescimento. O substrato é colocado num manipulador e aquecido até a temperatura de crescimento. Os feixes moleculares dos materiais escolhidos para o crescimento são produzidos nas células de efusão, a qual um termopar e um controlador de temperatura são encarregados de monitorar e controlar a temperatura. Os obturadores mecânicos podem abrir ou fechar rapidamente em um intervalo de tempo  $\Delta t < 0,1$ s.

Figura 3.9 – Foto do Sistema MBE RIBER 2300 R&amp;D da UFMG.



Fonte: [33]

### 3.2.2 Limpeza das amostras

A limpeza das amostras realizou-se em 3 etapas: primeiramente a amostra era colocada em um béquer com acetona para a limpeza de eventuais sujeiras na amostra, em seguida em outro béquer contendo álcool Iso-propílico, e por último em um béquer com água destilada para se retirar o álcool. Cada uma das etapas teve duração de 90 segundos com o béquer inserido no interior do ultrassom da Figura 3.10.

Figura 3.10 – Ultrassom utilizado na limpeza das amostras.

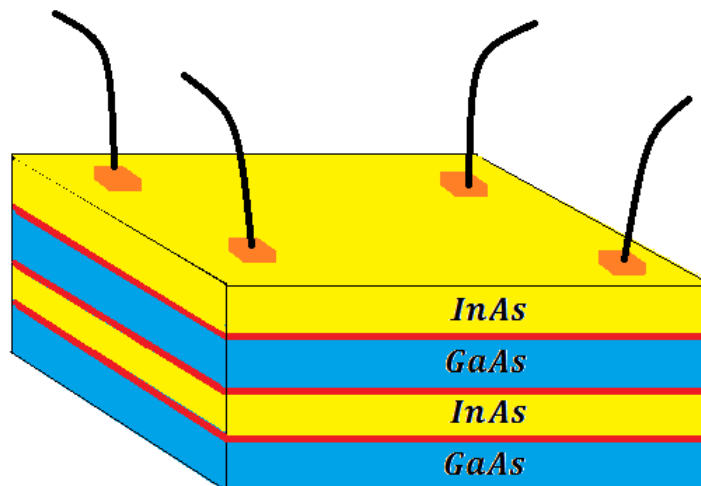


Fonte:www.cristofoli.com . Acessado dia 22/05/2020.

### 3.2.3 Características das amostras

As amostras foram crescidas no sistema MBE Riber 2300 da UFMG (ICEEx) possui várias camadas de GaAs e InAs conforme ilustrado na Figura 3.11. O número de períodos de InAs/GaAs variou entre 50 e 100 camadas, com cobertura de InAs que variou de 1,4 a 3,0 monocamadas (ML), seguida por uma camada espaçadora de 30 ou 40 ML de GaAs, em que a quantidade de MLs de uma camada, não representa valor da espessura das camadas, e sim a quantidade de material depositado.

Figura 3.11 – Ilustração da disposição das camadas sobre o substrato de GaAs. Na cor azul, são representados o substrato e os espaçadores de GaAs, na cor amarela as coberturas de InAs e em vermelho a interface entre o InAs e o GaAs.



Fonte: Próprio autor.

Tabela 3.1 – Parâmetros de crescimento das amostras semicondutoras de InAs/GaAs.

Amostras	Temperatura de Crescimento (°C)	Períodos de InAs/GaAs	Cobertura de InAs (ML)	Espaçador de GaAs (ML)
S1	485	50	1,9	30
S2	475	100	1,9	30
S3	485	50	2,5	40
S4	475	50	3,0	40
S5	500	50	1,4	40

### 3.3 Evolução Diferencial Auto-adaptativa

Por meio dos principais mecanismos de espalhamento, descritos na Seção 2.1.2, e do método SADE, foi possível extrair os parâmetros de ajuste dos mecanismos que limitam a mobilidade eletrônica, de forma robusta. O método meta-heurístico denominado Evolução Diferencial (sigla do inglês ED) foi proposto por Storn e Price [34] e é um algoritmo evolutivo baseado em mecanismos de seleção natural e genética populacional. Para isso, o DE utiliza operadores de mutação, cruzamento e seleção para gerar novos indivíduos na busca pelos mais adaptados. Inicialmente, o algoritmo DE foi aplicado para resolver sistemas de variáveis contínuas [34] e logo se mostrou eficiente para uma ampla gama de problemas [35, 36, 37, 38].

Posteriormente, recebeu uma atualização, deixando de depender de parâmetros de controle que se tornaram auto-adaptativos [5], recebendo o nome de Evolução Diferencial Auto-adaptativa (do inglês Self-Adaptive Differential Evolution *SADE*). Inicialmente, no SADE, os indivíduos são gerados aleatoriamente em intervalos físicos predefinidos, gerando a população inicial que irá evoluir ao longo das gerações. Cada indivíduo é candidato à solução que minimiza a função objetivo. Neste trabalho, foi encontrada a recombinação usando a regra descrita pela equação (3.1).

$$P_{i,j}^{G=1} = P_L^{G=1} + R_{i,j}(0, 1) (P_U^{G=1} - P_L^{G=1}), \quad (3.1)$$

onde o índice  $i$  e  $j$  são, respectivamente, o tamanho da população e o número de parâmetros a serem ajustados, variando de 1 a 100 e de 1 a 13. Nesse modelo, os parâmetros ajustados referem-se à solução das equações dos diferentes mecanismos de espalhamento que limitam a mobilidade eletrônica. Além disso,  $R_{i,j}(0, 1)$  é um número aleatório entre 0 e 1, com distribuição uniforme;  $P_U$  e  $P_L$  são os limites inferior e superior para os indivíduos, respectivamente.  $G$  refere-se ao número de geração, entre 1 e 50000, neste trabalho. No estágio de mutação, obteve-se um vetor doador por meio da equação 3.2.

$$D_i^G = P_i^G + F (P_{best}^G - P_i^G) + F (P_{r1}^G - P_{r2}^G), \quad (3.2)$$

onde  $P_{best}^G$  é o indivíduo que melhor minimiza a função objetiva e  $P_{r1}^G$  e  $P_{r2}^G$  são indivíduos escolhidos aleatoriamente, diferentes uns dos outros e o  $P_i^G$  é o indivíduo atual.  $F$  é o fator de mutação ajustado pela Equação 3.3.

$$F_i^{G+1} = \begin{cases} F_l + R_1 F_u, & \text{se } R_2 < \tau_1, \\ F_i^G, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.3)$$

Na recombinação ou cruzamento, o vetor doador é misturado ao vetor  $P_i^G$ , gerando um vetor temporário  $T_i^G$ . Neste trabalho, a recombinação foi feita usando a regra descrita

pela equação 3.4.

$$T_{i,j}^G = \begin{cases} D_{i,j}, & \text{se } R(0,1)_j \leq CR \text{ ou } j = j_R, \\ P_{i,j}^G, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.4)$$

onde  $j_R$  é um número inteiro aleatório entre 1 e 13, de acordo com o número de parâmetros a serem ajustados. A taxa de cruzamento,  $CR$ , é um número real, definido pela equação 3.5.

$$CR_i^{G+1} = \begin{cases} R_3, & \text{se } R_4 < \tau_2, \\ CR_i^G, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.5)$$

onde  $R_4$  são 4 números aleatórios entre 0 e 1.  $\tau_1$  e  $\tau_2$  representam as probabilidades de ajuste de  $F$  e  $CR$ . Finalmente, na etapa de seleção, foi comparado o vetor temporário  $P_i^G$  e os vetores que melhor minimizam a função objetivo são escolhidos, usando as relações 3.6.

$$P_i^{G+1} = \begin{cases} T_i^G, & \text{se } f(T_i) < f(P_i), \\ P_{i,j}^G, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.6)$$

Este processo se repete até atingir o final das gerações, ou algum critério pré-definido seja satisfeito. Com isso, conseguiu-se estimar de forma robusta os parâmetros dos modelos de espalhamento que trazem informações importantes sobre o comportamento elétrico de nosso conjunto de amostras estudadas.

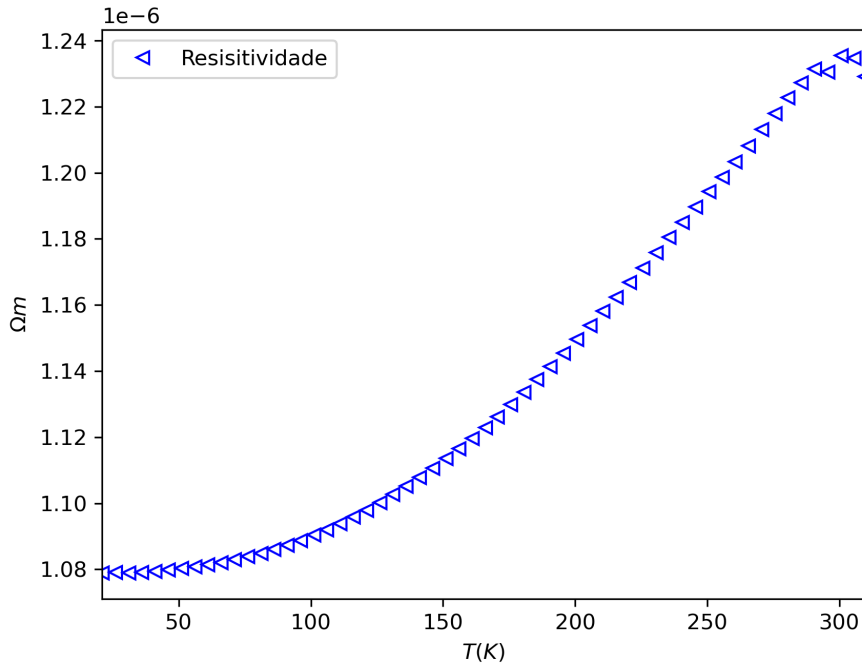
## 4 Resultados

### 4.1 Avaliação do equipamento desenvolvido

Na Figura 4.1 é apresentado o gráfico da medida de resistividade em função da temperatura. A amostra varia sua resistividade de  $1,08 \times 10^{-6} \Omega \cdot m$ , em 10K, para  $1,24 \times 10^{-6} \Omega \cdot m$  na temperatura ambiente. Esse aumento da resistividade com a temperatura é típico de amostras metálicas, ou seja, que possui uma sobreposição entre as bandas de valência e condução [1]. Pode-se verificar na medida que o equipamento se comportou bem. O intervalo de comutação escolhido para os relés, juntamente com a aplicação de corrente da *Keithley* 2400 e a medida de tensão pela *Keithley* 2100, está correto, ou seja, o sistema teve uma boa sincronização. Além disso, foi possível verificar que o *software* desenvolvido em *Labview* controlou corretamente a variação de temperatura. Como essa foi uma medida teste os intervalos de temperatura foram adotados com 5K, mas o software permite estipular intervalos de até 1K. Baixos valores no passo de variação de temperatura são importantes para amostras semicondutores, nas quais serão extraídas informações em baixos valores de temperatura. Uma variação pequena de temperatura vai permitir o sistema dentro do criostato ter maior estabilidade, deixando as medidas ainda mais confiáveis.



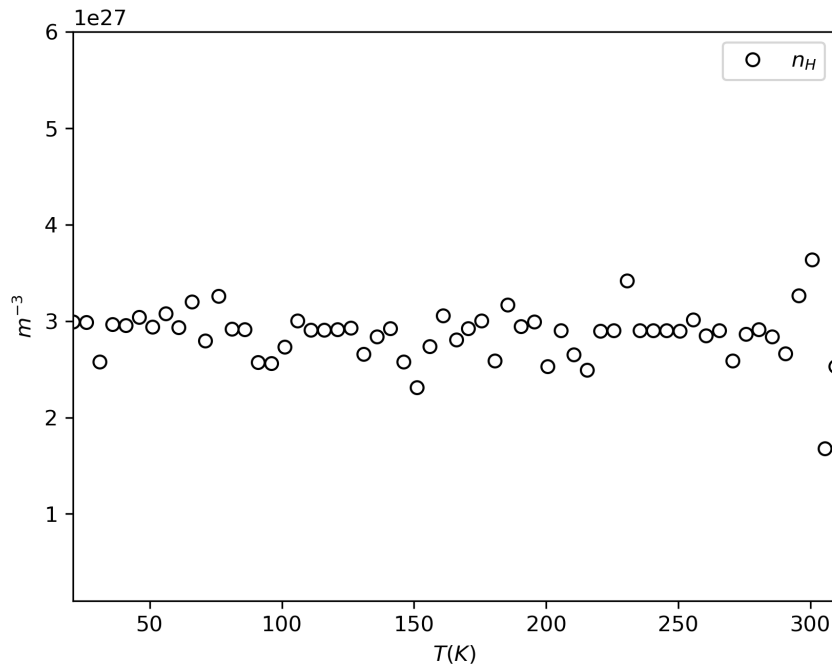
Figura 4.1 – Resistividade da amostra de ITO utilizada para verificar o comportamento do instrumento entre a temperatura ambiente e a temperatura de 10K. Podemos verificar pela resistividade que essa amostra apresentou um comportamento metálico.



Fonte: Próprio Autor

Na Figura 4.2 é apresentado o resultado da medida de concentração de portadores em função da temperatura. Como pode ser verificado essa concentração é aproximadamente constante e da ordem de  $3 \times 10^{27} m^{-3}$ . Tal resultado indica que a amostra possui apenas um canal de condução e não existem defeitos capturando os portadores.

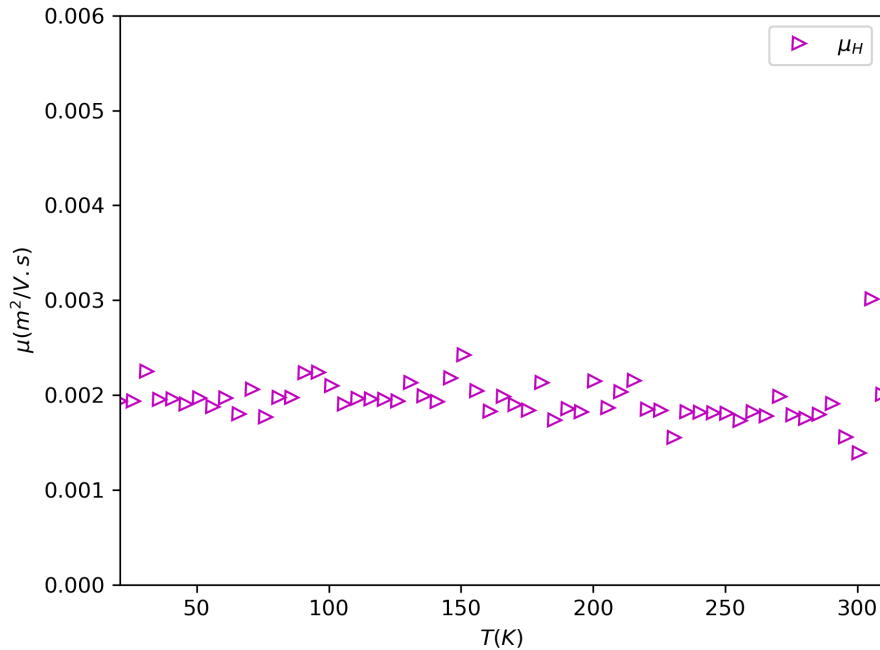
Figura 4.2 – Concentração de portadores em função da temperatura para amostra de ITO. No gráfico podemos verificar que a amostra possui uma quantidade aproximadamente constante de portadores, da ordem de  $3 \times 10^{27} m^{-3}$ . Indicando que a amostra possui apenas um canal de condução.



Fonte: Próprio Autor

Na Figura 4.3 são apresentados os resultados da mobilidade eletrônica, em  $m^2/Vs$  para a amostra de ITO. Como pode ser verificado, os dados apresentam uma pequena redução na mobilidade eletrônico à medida que a temperatura é aumentada. Esse comportamento é típico do surgimento de vibrações na rede cristalina, tais como fônons óticos e acústicos, que surgem com o aumento da temperatura [10]. Novamente os resultados mostram que a montagem ofereceu bons resultados ao longo das medidas. Para obtenção da concentração de portadores e da mobilidade eletrônica foi necessário realizar medidas com o campo na direção positiva, negativa e sem campo magnético, juntamente com a variação dos contatos feita pela placa apresentada na Figura 3.5. Todas essas operações foram controladas pela placa DAQ, que por sua vez era controlada por um software em Labview. O software em Labview monitorava todo o sistema, e realizava as operações matemáticas necessárias e apresenta em tempo real os comportamentos da mobilidade, temperatura, concentração de portadores e resistividade na amostra.

Figura 4.3 – Mobilidade eletrônica da amostra de ITO em função da temperatura. Os dados apresentam uma pequena redução na mobilidade em função do aumento da temperatura. Este comportamento é típico de espalhamento por fônons óticos e acústicos, devido ao aumento de temperatura.

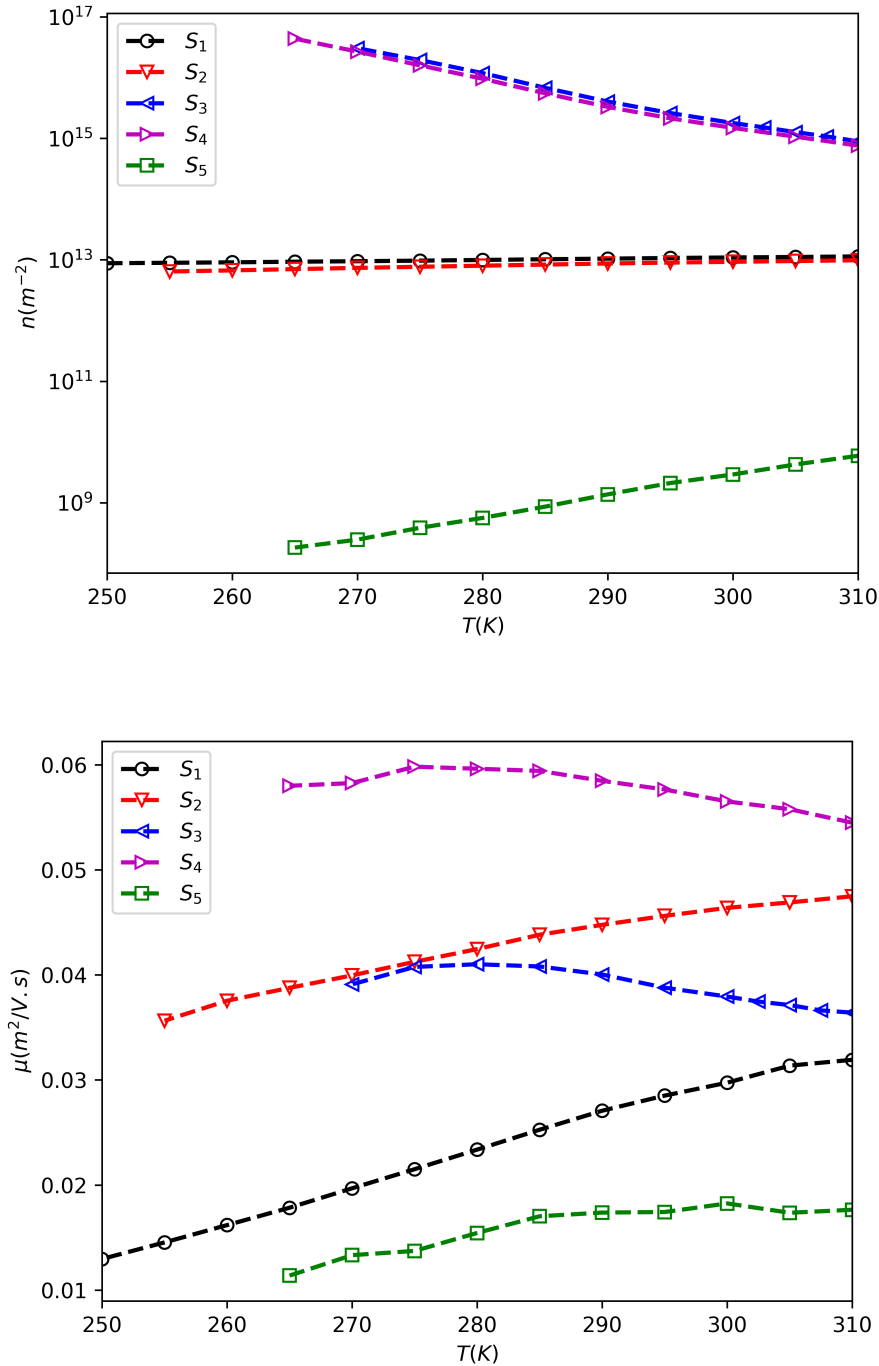


Fonte: Próprio Autor

## 4.2 Amostras de InAs/GaAs

A Figura 4.4 mostra a mobilidade e a concentração de portadores medidas para as cinco amostras em função da temperatura. Essas amostras apresentaram baixa mobilidade eletrônica e alta resistividade tal que as medidas ocorrem na faixa de temperatura entre 250 K e 310 K. Modelamos esses dados usando os mecanismos de espalhamento distintos, e o método SADE apresentado anteriormente, estimando os parâmetros que caracterizam o estudo. O comportamento da concentração de portadores nesta faixa de temperatura indica que o transporte eletrônico ocorre em um único canal de condução.  $S_3$  e  $S_4$  têm uma concentração média de portadores de  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , inclinação ligeiramente negativa aumentando a temperatura.  $S_1$  e  $S_2$ , eles têm uma concentração aproximadamente constante de portadores com um valor médio de  $10^9 \text{ cm}^{-2}$ , e a amostra  $S_5$  tem um valor médio de  $10^5 \text{ cm}^{-2}$ , com uma inclinação positiva. A mobilidade eletrônica na faixa de temperatura é limitada principalmente por fônons e defeitos de rede [10]. Este resultado é confirmado nos diferentes mecanismos de limitação da mobilidade, onde as impurezas teionizadas não afetam a mobilidade eletrônica na faixa de temperatura medida.

Figura 4.4 – Concentração de portadores e mobilidade eletrônica em função da temperatura para as amostras estudadas.



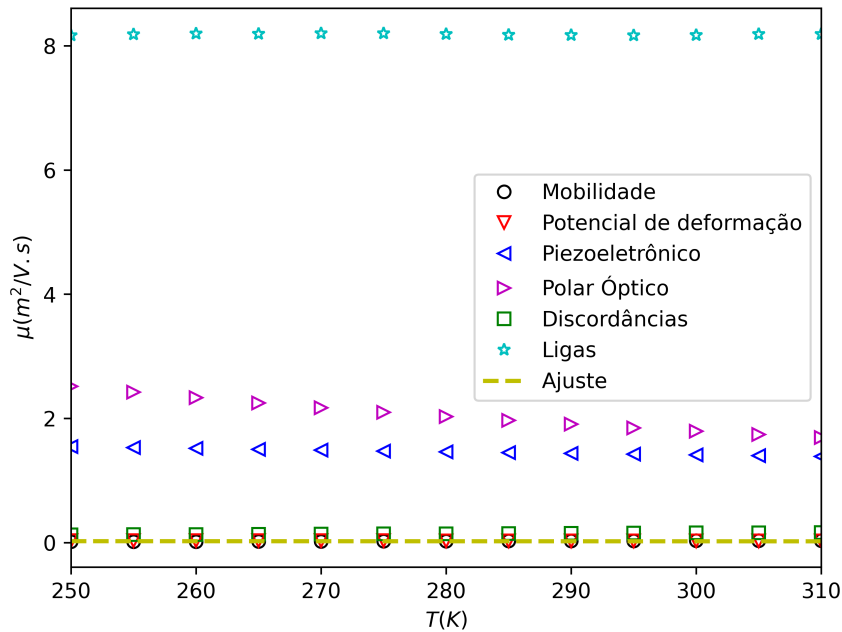
Fonte: Próprio Autor

A Figura 4.5 mostra os ajustes de mobilidade eletrônica em função da temperatura entre 250 K e 310 K para a amostra  $S_1$ . Pode-se verificar que os principais mecanismos que limitam a mobilidade eletrônica são os fônons devido à deformação para os potenciais e discordâncias. Os outros mecanismos de espalhamento, como fônons piezoelétricos, fônons

Tabela 4.1 – Principais parâmetros de ajuste obtidos através do método SADE.

Sample	$m^*$	$N_{dis}$ ( $\text{cm}^{-2}$ )	$x$	$\epsilon_\infty$	$\epsilon$
$S_1$	0,31	$1,0 \times 10^{10}$	0,35	12,5	12,9
$S_2$	0,30	$1,0 \times 10^{10}$	0,36	10,4	12,9
$S_3$	0,39	$1,0 \times 10^7$	0,41	10,4	14,4
$S_4$	0,36	$1,0 \times 10^7$	0,44	10,5	12,9
$S_5$	0,38	$1,0 \times 10^{10}$	0,35	12,5	12,9

Fonte: Próprio Autor

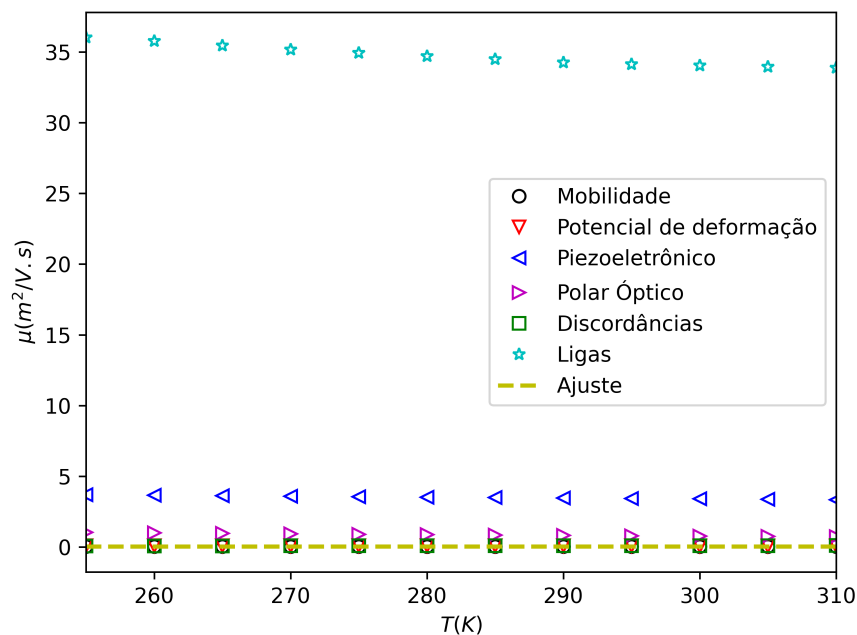
Figura 4.5 – Mobilidade vs temperatura considerando todos os mecanismos de espalhamento contribuintes representados por símbolos abertos. O ajuste da mobilidade do elétron na amostra  $S_1$  (linha tracejada).

Fonte: Próprio Autor

ópticos de modo polares e devido a desordem em ligas, contribuem para a mobilidade de ajuste fino. O espalhamento devido as discordâncias surge devido à diferença entre as constantes de rede de InAs e GaAs. Essa diferença também resulta na formação de pontos quânticos, e parte da tensão ainda está presente na rede. Os principais parâmetros de ajuste são mostrados na Tabela 4.1, na qual um aumento na massa efetiva em todas as amostras é perceptível. Este aumento é justificado devido à tensão residual não relaxada na rede na interface entre GaAs e InAs [10, 33]. O efeito da tensão na rede é equivalente a sujeitar a rede a alta pressão. Sabe-se que o efeito da pressão em semicondutores, como GaAs e InAs, deforma a estrutura da banda, causando uma redução na diferença de energia entre o vale  $\Gamma$  e os vales  $L$  e  $X$  da banda de condução [39, 40, 41, 42].

A Figura 4.6 apresenta os ajustes de mobilidade da amostra  $S_2$  na mesma faixa de temperatura. Para a amostra  $S_1$ , os principais mecanismos de espalhamento que limitam a mobilidade eletrônica são o deslocamento e os fônons ópticos e acústicos polares por deformação do potencial. Os outros mecanismos fazem pequenas contribuições para o ajuste.

Figura 4.6 – Mobilidade vs temperatura considerando todos os mecanismos de espalhamento contribuintes representados por símbolos abertos. O ajuste da mobilidade do elétron na amostra  $S_2$  (linha tracejada).

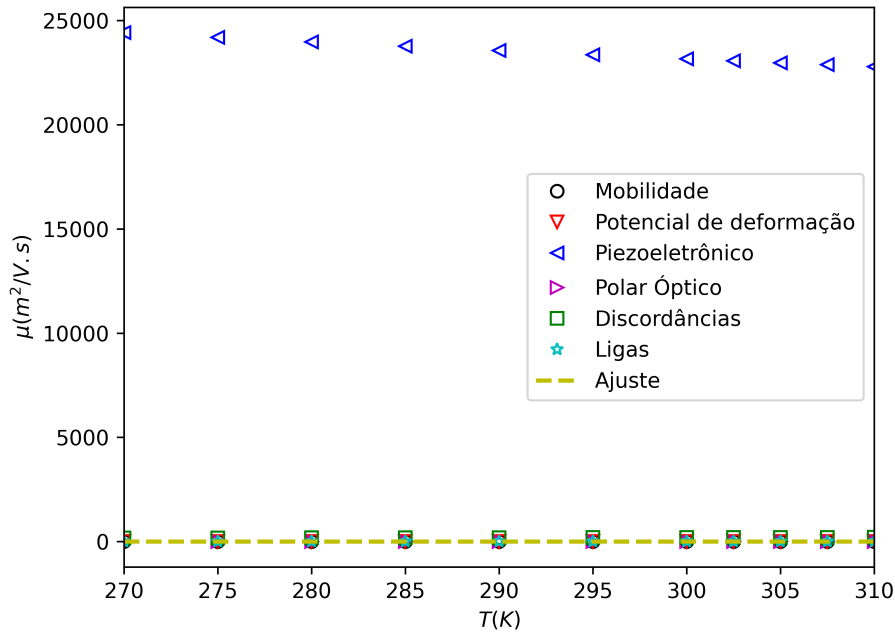


Fonte: Próprio Autor

Na Figura 4.7, verificou-se que os mecanismos de espalhamento que limitam principalmente a mobilidade  $S_3$  da amostra são devidos a ligas, discordâncias, potencial de deformação de fontes acústicas e óptica polar. O fônon acústico tem pouca contribuição na limitação da mobilidade nesta amostra. Na Tabela 4.1, é possível verificar que há uma redução na densidade de carga das discordâncias. Assim, a limitação da mobilidade devido ao espalhamento nas ligas tornou-se mais significativa na liga  $In_xGa_{(1-x)}As$  do que nas duas amostras anteriores. A amostra  $S_4$  apresenta um comportamento semelhante ao da amostra  $S_3$  (ver Figura 4.8.).

Na Figura 4.9, os ajustes da amostra  $S_5$  são mostrados. Pode-se perceber que a mobilidade eletrônica é limitada principalmente pela combinação das discordâncias e mecanismos de espalhamento de fônons. A contribuição do espalhamento por ligas é menor nesta amostra. Como nas outras amostras, a tensão residual não relaxada na rede deforma

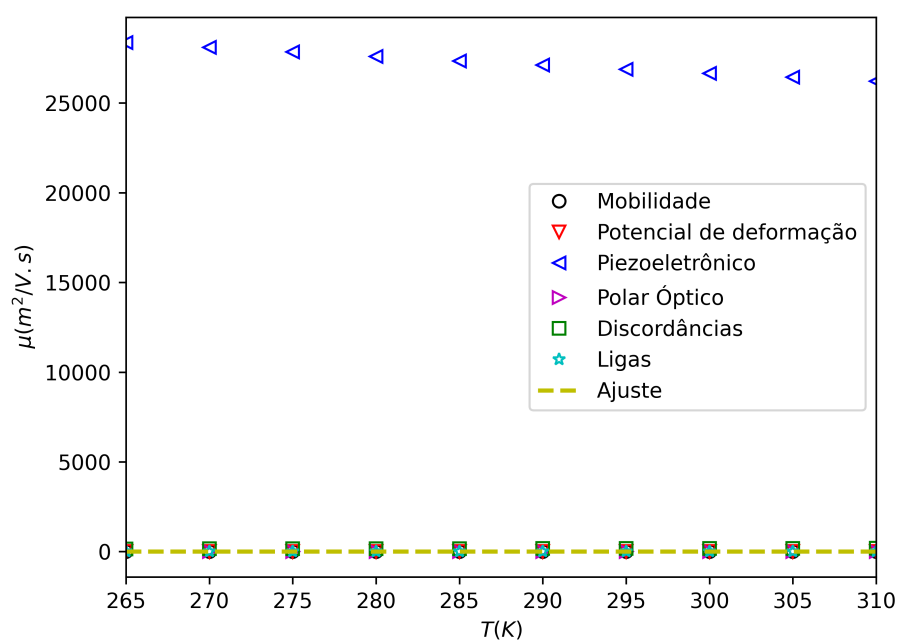
Figura 4.7 – Mobilidade vs temperatura considerando todos os mecanismos de espalhamento contribuintes representados por símbolos abertos. O ajuste da mobilidade do elétron na amostra  $S_3$  (linha tracejada).



Fonte: Próprio Autor

a estrutura da banda, causando uma redução na diferença de energia entre o vale  $\Gamma$  e os vales  $L$  e  $X$  da banda de condução. Analisando a Tabela 3.1 e a Tabela 4.1, é possível verificar que o aumento da cobertura do InAs está diretamente relacionado à densidade das cargas de deslocamento. Para espessuras maiores de InAs, a presença de linhas de discordância é menor do que quando a cobertura de InAs são menores. Apesar da redução nas linhas de discordâncias, a tensão residual na rede, próximo à interface entre InAs e GaAs, continua, resultando na deformação da estrutura da banda e um alto valor de massa efetiva que limita o transporte eletrônico. Este parâmetro deve ser avaliado cuidadosamente para que as amostras apresentem uma melhora em suas propriedades eletrônicas.

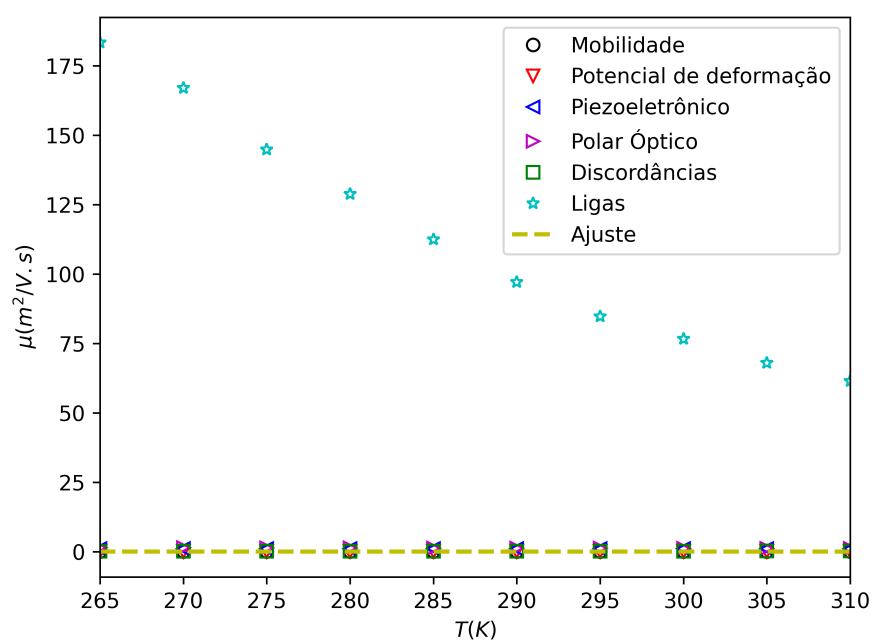
Figura 4.8 – Mobilidade vs temperatura considerando todos os mecanismos de espalhamento contribuintes representados por símbolos abertos. O ajuste da mobilidade do elétron na amostra  $S_4$  (linha tracejada).



Fonte: Próprio Autor



Figura 4.9 – Mobilidade vs temperatura considerando todos os mecanismos de espalhamento contribuintes representados por símbolos abertos. O ajuste da mobilidade do elétron na amostra  $S_5$  (linha tracejada).



Fonte: Próprio Autor

## 5 Conclusões

Um conjunto de cinco amostras InAs/GaAs foram crescidas usando MBE e caracterizadas eletricamente pela técnica de van der Pauw. A partir das medições, obteve-se a concentração de portadores e a mobilidade eletrônica em função da temperatura. Para a análise da mobilidade eletrônica, foi utilizado o método de Evolução Diferencial Auto-adaptativa, que se mostrou robusto para determinar os principais mecanismos de espalhamento que limitam a mobilidade eletrônica para este conjunto de amostras e seus parâmetros. De acordo com nossos resultados, observamos relaxamento de tensões na rede, próximo à interface InAs/GaAs, na forma de linhas de discordância e de pontos quânticos, parte do residual das tensões remanescentes afetaram a massa efetiva do portador. Isso ocorreu devido à deformação da estrutura da banda, causando uma redução na diferença de energia entre os vales  $\Gamma$  e  $L$  e  $X$  da banda de condução.

Tais evidências dos efeitos do estresse residual no crescimento de amostras de InAs/GaAs serão importantes para o crescimento ou tratamento de amostras, visando sua aplicação em dispositivos que buscam melhorar as propriedades eletrônicas e ópticas em conjunto.

Além disso, foi construído um equipamento robusto com uma placa com relés para realizar as operações das medidas de mobilidade eletrônica, resistividade e concentração de portadores pela técnica de van der Pauw. Essa construção reduziu muito os custos do equipamento e serviu como objeto de aprendizagem para os alunos que participaram da construção. A automação do sistema foi realizada através de uma placa DAQ, de comunicação via GPIB, controlada por um software em Labview, que realizava o controle da temperatura, do campo magnético, das operações com os relés e da fonte e multímetro da Keithley. O software foi inteiramente construído por alunos de graduação e pós-graduação. Após essa etapa o equipamento foi testado e de acordo com os resultados as medidas foram satisfatórias. Atualmente, o equipamento está disponível para pesquisa e sendo utilizado em disciplinas do programa de pós graduação em Materiais para Engenharia da Unifei. Além disso, está disponível para a colaboração com outros pesquisadores interessados.

Os resultados desta pesquisa estão disponíveis nesta tese e também nas referências [43, 44].

# Referências

- 1 ADACHI, S. *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*. John Wiley & Sons, Ltd, 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/0470090340>>. 17
- 2 BLOKHIN, S. A. et al. AlGaAs/GaAs photovoltaic cells with an array of InGaAs QDs. *Semiconductors*, Pleiades Publishing Ltd, v. 43, n. 4, p. 514–518, abr. 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1134/s1063782609040204>>. 17
- 3 BUENO, R. et al. SEMICONDUTORES HETEROESTRUTURADOS: UMA ABORDAGEM SOBRE OS PRINCIPAIS DESAFIOS PARA a OBTENÇÃO e APLICAÇÃO EM PROCESSOS FOTOQUÍMICOS AMBIENTAIS e ENERGÉTICOS. *Química Nova*, Sociedade Brasileira de Química (SBQ), 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170372>>. 17
- 4 RODRIGUES, C. G.; MIRANDA, B. M. Estudo do transporte eletrônico no semicondutor arseneto de gálio usando a equação de newton-langevin. *Revista Arithmós - Revista da Escola de Ciências Exatas e da Computação*, Pontificia Universidade Católica de Goiás -PUC Goiás, v. 1, n. 1, p. 47, jun. 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.18224/arithmos.v1i1.6913>>. 17
- 5 WRÓBEL, J. et al. Locally-strain-induced heavy-hole-band splitting observed in mobility spectrum of p-type InAs grown on GaAs. *physica status solidi (RRL) – Rapid Research Letters*, Wiley, v. 14, n. 4, p. 1900604, abr. 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/pssr.201900604>>. 17
- 6 LIU, A. Y. et al. Reliability of InAs/GaAs quantum dot lasers epitaxially grown on silicon. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), v. 21, n. 6, p. 690–697, nov. 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109/jstqe.2015.2418226>>. 17
- 7 PERERA, A. U. et al. InAs/GaAs quantum dot and dots-in-well infrared photodetectors based on p -type valence-band intersublevel transitions. *Infrared Physics & Technology*, Elsevier BV, v. 70, p. 15–19, maio 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.infrared.2014.10.016>>. 17
- 8 REZENDE, S. *Materiais e Dispositivos Eletrônicos*. Editora Livraria da Física, 2004. ISBN 9788588325272. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=YN07KGEfrIYC>>. 17, 20, 23
- 9 JIANG, M.-H. et al. High-speed electro-optic switch based on nonlinear polymer-clad waveguide incorporated with quasi-in-plane coplanar waveguide electrodes. *Optical Materials*, Elsevier BV, v. 75, p. 26–30, jan. 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.optmat.2017.10.020>>. 17
- 10 OLIVEIRA, A. F. et al. Main scattering mechanisms in InAs/GaAs multi-quantum-well: a new approach by the global optimization method. *Journal of Materials Science*, Springer Science and Business Media LLC, v. 51, n. 3, p. 1333–1343, set. 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10853-015-9451-9>>. 18, 50, 51, 53

- 11 TRAN, D. Q. et al. Self-catalyst growth and characterization of wurtzite GaAs/InAs core/shell nanowires. *Journal of Crystal Growth*, Elsevier BV, v. 564, p. 126126, jun. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2021.126126>>. 18
- 12 TSAO, J. Y. *Materials fundamentals of molecular beam epitaxy*. [S.l.]: Academic Press, 2012. 18
- 13 KERSKI, J. et al. Quantum sensor for nanoscale defect characterization. *Phys. Rev. Applied*, American Physical Society, v. 15, p. 024029, Feb 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.15.024029>>. 18
- 14 YAHYAOU, M. et al. The effect of strain and indium content on the optical properties of GaInAs/GaAs ternary alloys. *Solid State Sciences*, Elsevier BV, v. 111, p. 106468, jan. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2020.106468>>. 18
- 15 MOZO-VARGAS, J. et al. Lattice strain influence on conduction band nonparabolicity in GaAs and InAs: Application to intraband optical absorption in InGaAs-GaAs asymmetric step quantum wells. *Materials Science in Semiconductor Processing*, Elsevier BV, v. 123, p. 105490, mar. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.mssp.2020.105490>>. 18
- 16 MELLO, H. A.; BIASI, R. S. Introdução à física dos semicondutores. *Ed. Edgard Blucher*, p. 124, 1975. 20, 23, 24
- 17 CHUBINISHVILI, Z. et al. NUMERICAL CALCULATIONS OF IMPURITY SCATTERING MOBILITY IN SEMICONDUCTORS. *European Chemical Bulletin*, European Chemical Bulletin, v. 8, n. 1, p. 19, mar. 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.17628/ecb.2019.8.19-22>>. 24
- 18 LISESIVDIN, S. B. et al. Scattering analysis of 2deg carrier extracted by QMSA in undoped  $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$  heterostructures. *Semiconductor Science and Technology*, IOP Publishing, v. 22, n. 5, p. 543–548, mar. 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088/0268-1242/22/5/015>>. 25
- 19 ESHGHI, H.; MOOTABIAN, M. A quantitative study on the effect of nitrogen concentration on two-dimensional electron gas (2deg) mobility in a dilute nitride GaAsN/AlGaAs heterostructure. *Solid State Communications*, Elsevier BV, v. 151, n. 1, p. 80–83, jan. 2011. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2010.10.018>>. 25
- 20 KUHN, K.; DARLING, R. Mobility of strained and dislocated  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  semiconductor material. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), v. 39, n. 6, p. 1288–1294, jun. 1992. Disponível em: <<https://doi.org/10.1109/16.137306>>. 26
- 21 MARSHALL, A. et al. Misfit dislocation dissociation and lomer formation in low mismatch SiGe/si heterostructures. *Journal of Materials Research*, Cambridge University Press (CUP), v. 20, n. 2, p. 447–455, fev. 2005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1557/jmr.2005.0065>>. 26
- 22 BONEF, B.; SHAH, R. D.; MUKHERJEE, K. Fast diffusion and segregation along threading dislocations in semiconductor heterostructures. *Nano Letters*, American Chemical Society (ACS), v. 19, n. 3, p. 1428–1436, fev. 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b03734>>. 26

- 23 ROMANOV, A. E. et al. Modeling of threading dislocation density reduction in heteroepitaxial layers i. geometry and crystallography. *physica status solidi (b)*, Wiley, v. 198, n. 2, p. 599–613, dez. 1996. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/pssb.2221980205>>. 26
- 24 LOOK, D. *Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices*. Wiley, 1992. ISBN 9780471935735. Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=31U2PwAACAAJ>>. 27, 35
- 25 PRICE, P. Two-dimensional electron transport in semiconductor layers. i. phonon scattering. *Annals of Physics*, Elsevier BV, v. 133, n. 2, p. 217–239, maio 1981. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0003-4916\(81\)90250-5](https://doi.org/10.1016/0003-4916(81)90250-5)>. 29
- 26 WOLFE, C.; HOLONYAK, N.; STILLMAN, G. *Physical properties of semiconductors*. Prentice Hall, 1989. (Solid state physical electronics series). Disponível em: <<http://books.google.com.br/books?id=EjBRAAAAAMAAJ>>. 30
- 27 LISESIVDIN, S. B. et al. Scattering analysis of two-dimensional electrons in Al-GaN/GaN with bulk related parameters extracted by simple parallel conduction extraction method. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 108, n. 1, p. 013712, jul. 2010. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.3456008>>. 31
- 28 MASU, K. et al. Alloy scattering potential in p-type Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 54, n. 10, p. 5785–5792, out. 1983. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.331804>>. 31
- 29 LOOK, D. C. et al. Alloy scattering in p-type Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. *Journal of Applied Physics*, AIP Publishing, v. 71, n. 1, p. 260–266, jan. 1992. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.350752>>. 31, 37
- 30 HERNÁNDEZ-CALDERÓN, I. Epitaxial growth of thin films and quantum structures of II–VI visible-bandgap semiconductors. In: *Molecular Beam Epitaxy*. Elsevier, 2013. p. 311–346. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/b978-0-12-387839-7.00014-2>>. 42
- 31 KUM, H. et al. Epitaxial growth and layer-transfer techniques for heterogeneous integration of materials for electronic and photonic devices. *Nature Electronics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 2, n. 10, p. 439–450, out. 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41928-019-0314-2>>. 42
- 32 NIU, T. et al. Modulating epitaxial atomic structure of antimonene through interface design. *Advanced Materials*, Wiley, v. 31, n. 29, p. 1902606, jun. 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1002/adma.201902606>>. 42
- 33 OLIVEIRA, A. F. *Transporte eletrônico em amostras de InAs/GaAs e mecanismos de espalhamento. Uma nova abordagem de ajustes pelo método de otimização global*. Tese Doutorado em Materiais para Engenharia, Universidade Federal de Itajubá, 2015. Disponível em: <<https://repositorio.unifei.edu.br/jspui/handle/123456789/14>>. 44, 53
- 34 STORN, R.; PRICE, K. Differential evolution – a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of Global Optimization*, Springer Science and Business Media LLC, v. 11, n. 4, p. 341–359, 1997. Disponível em: <<https://doi.org/10.1023/a:1008202821328>>. 46

- 35 RAMLI, M. A.; BOUCHEKARA, H.; ALGHAMDI, A. S. Optimal sizing of PV/wind/diesel hybrid microgrid system using multi-objective self-adaptive differential evolution algorithm. *Renewable Energy*, Elsevier BV, v. 121, p. 400–411, jun. 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.renene.2018.01.058>>. 46
- 36 BEIRAMI, H.; SHABESTARI, A. Z.; ZERAFAT, M. M. Optimal PID plus fuzzy controller design for a PEM fuel cell air feed system using the self-adaptive differential evolution algorithm. *International Journal of Hydrogen Energy*, Elsevier BV, v. 40, n. 30, p. 9422–9434, ago. 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.05.114>>. 46
- 37 SUN, C.-H. et al. Comparison of dynamic differential evolution and self-adaptive dynamic differential evolution for buried metallic cylinder. *Research in Nondestructive Evaluation*, Informa UK Limited, v. 24, n. 1, p. 35–50, jan. 2013. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/09349847.2012.699607>>. 46
- 38 NANDI, S.; REDDY, M. J. Comparative performance evaluation of self-adaptive differential evolution with GA, SCE and DE algorithms for the automatic calibration of a computationally intensive distributed hydrological model. *H2Open Journal*, IWA Publishing, v. 3, n. 1, p. 306–327, jan. 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.2166/h2oj.2020.030>>. 46
- 39 MANJÓN, F. J. et al. Experimental and theoretical study of band structure of InSe and In<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>Se(x0.2) under high pressure: direct to indirect crossovers. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 63, n. 12, mar. 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.63.125330>>. 53
- 40 XIAO, G. et al. Pressure effects on structure and optical properties in cesium lead bromide perovskite nanocrystals. *Journal of the American Chemical Society*, American Chemical Society (ACS), v. 139, n. 29, p. 10087–10094, jul. 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/jacs.7b05260>>. 53
- 41 ERRANDONEA, D. et al. Crystal symmetry and pressure effects on the valence band structure of  $\gamma$ -InSe and  $\epsilon$ -GaSe: Transport measurements and electronic structure calculations. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 71, p. 125206, Mar 2005. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.125206>>. 53
- 42 KöPF, C.; KOSINA, H.; SELBERHERR, S. Physical models for strained and relaxed GaInAs alloys: Band structure and low-field transport. *Solid-State Electronics*, Elsevier BV, v. 41, n. 8, p. 1139–1152, ago. 1997. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/s0038-1101\(97\)00051-8](https://doi.org/10.1016/s0038-1101(97)00051-8)>. 53
- 43 RIBEIRO, L. H.; OLIVEIRA, A. F.; RUBINGER, R. M. Instrumentação para medidas de mobilidade eletrônica e concentração de portadores em amostras semicondutoras, pelo método de van der pauw. *Research, Society and Development*, Research, Society and Development, v. 10, n. 6, p. e41310615229, jun. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.33448/rsd-v10i6.15229>>. 58
- 44 RIBEIRO, L. H. et al. Investigation of electronic transport in InAs/GaAs samples. a study using the metaheuristic self-adaptive differential evolution method. *Physica B: Condensed Matter*, Elsevier BV, v. 621, p. 413293, nov. 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.physb.2021.413293>>. 58

## A Apêndice A - Publicações

## **Instrumentação para medidas de mobilidade eletrônica e concentração de portadores em amostras semicondutoras, pelo método de van der Pauw**

**Instrumentation for electronic mobility and carrier concentration measurements in semiconductor samples, using the van der Pauw method**

**Instrumentación para medidas de movilidad electrónica y concentración de portadores en muestras de semiconductores, mediante el método de van der Pauw**

Recebido: 19/04/2021 | Revisado: 16/05/2021 | Aceito: 17/05/2021 | Publicado: 04/06/2021

### **Luiz Henrique Ribeiro**

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0723-0170>  
Universidade Federal de Itajubá, Brasil  
E-mail: [luizhenriquereib@yahoo.com.br](mailto:luizhenriquereib@yahoo.com.br)

### **Adhimar Flávio Oliveira**

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-2586-7359>  
Universidade Federal de Itajubá, Brasil  
E-mail: [adhimarflavio@unifei.edu.br](mailto:adhimarflavio@unifei.edu.br)

### **Rero Marques Rubinger**

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1718-9658>  
Universidade Federal de Itajubá, Brasil  
E-mail: [rero@unifei.edu.br](mailto:rero@unifei.edu.br)

### **Resumo**

Neste trabalho apresentamos os resultados da construção de um equipamento, de baixo custo, para medidas de Hall, utilizando a técnica de van der Pauw. Para isso, foi desenvolvido um sistema composto por uma placa eletrônica controlada por uma placa DAQ que juntamente com um software em Labview realiza a automação de todas as medidas necessárias. O sistema é capaz de realizar todas as operações necessárias entre os contatos para realizar a técnica de van der Pauw e obter parâmetros como mobilidade eletrônica, concentração de portadores e resistividades elétrica em função da temperatura. Tais medidas são essenciais para estudar o comportamento eletrônico de amostras, visando sua aplicação em dispositivos eletrônicos. Para verificar o comportamento do sistema, foi utilizada uma amostra de *Indium tin oxide* (ITO). Nesses testes verificou-se que os tempos de sincronização utilizados para as medidas apresentam resultados com baixo ruído e que a montagem permite a realização de medidas didáticas para disciplinas de pós-graduação e também de pesquisas desenvolvidas pelos alunos de pós-graduação.

**Palavras-chave:** Método de van der Pauw; Mobilidade eletrônica; Concentração de portadores; Semicondutores; Automação.

### **Abstract**

In this work we present the results of the construction of low-cost equipment for Hall measurements, using the van der Pauw technique. For this, a system was developed composed of an electronic board controlled by a DAQ board that together with software in Labview performs the automation of all necessary measures. The system is capable of carrying out all the necessary switch operations between the contacts to perform the van der Pauw technique and obtain parameters such as electronic mobility, carriers concentration, and electrical resistivities as a function of temperature. Such measures are essential to study the electronic behavior of samples, aiming at their application in electronic devices. To check the behavior of the system, a sample of Indium tin oxide (ITO) was used. In these tests, it was found that the synchronization times used for the measurements show results with low noise and that the assembly allows the carrying out of didactic measures for undergraduate courses and also for research carried out by graduate students.

**Keywords:** Van der Pauw method; Electronic mobility; Concentration of carriers; Semiconductors; Automation.

### **Resumen**

En este trabajo presentamos los resultados de la construcción de un equipo de bajo costo para medidas de Hall, utilizando la técnica de van der Pauw. Para ello, se desarrolló un sistema compuesto por una placa electrónica controlada por una placa DAQ que junto con el software en Labview realiza la automatización de todas las medidas necesarias. El sistema es capaz de realizar todas las operaciones necesarias entre los contactos para realizar la técnica de van der Pauw y obtener parámetros como movilidad electrónica, concentración de portadores y resistividades eléctricas en función de la temperatura. Estas medidas son fundamentales para estudiar el comportamiento electrónico de las muestras, con el



objetivo de su aplicación en dispositivos electrónicos. Para comprobar el comportamiento del sistema se utilizó una muestra de óxido de indio y estaño (ITO). En estas pruebas se encontró que los tiempos de sincronización utilizados para las mediciones arrojan resultados con bajo nivel de ruido y que el montaje permite la realización de medidas didácticas para cursos de posgrado y también para investigaciones realizadas por estudiantes de posgrado.

**Palabras clave:** Método de Van der Pauw; Movilidad electrónica; Concentración de portadores; Semiconductores; Automatización.

## 1. Introdução

Tecnologias para a produção de materiais que estão envolvidos na geração de dispositivos eletrônicos, tem atingido enorme avanço nos últimos anos (Sousa et. al. 2021; Martins et. al. 2020). Materiais semicondutores compostos principalmente dos grupos II-VI e dos grupos III-V da tabela periódica, têm sido usados na fabricação de dispositivos eletrônicos de alta eficiência, tais como os de potência e alta frequência (Adachi, 2005; Sun et al. 2014; Zhang & David 2021). Os dispositivos atuais precisam possuir cada vez mais menor dimensionalidade e podem ser encontrados em manufaturas de dispositivos como circuitos integrados, diodos emissores de luz infravermelhos, diodos laser, LEDs detectores luminosos e células solares (Wróbel et. al, 2020; Liu et al. 2015).

Dentre os materiais semicondutores desenvolvidos com compostos dos grupos II-IV e III-V o Arseneto de Gálio (GaAs) e o Arseneto de Índio (InAs) tem se destacado devido ao seu *bandgap* direto a alta mobilidade eletrônica em comparação com outros semicondutores, como o silício (Si), maior resistência à radiação ionizante, e outras propriedades elétricas e ópticas superiores à do Si (Oliveira, 2015; Toledo, 2020). Estruturalmente eles apresentam a forma cúbica cristalina do tipo *zincblende*, sendo muito importantes na indústria microeletrônica, interessantes na fabricação de dispositivos optoeletrônicos de alta eficiência (Jiang, 2018) particularmente para a fabricação de dispositivos que interajam com a luz e a eletricidade.

A mobilidade dos portadores de carga em um cristal depende das interações desses portadores com os átomos da rede cristalina, com os átomos de impurezas, com defeitos da rede, com outros portadores, etc. Todas essas interações são conhecidas por mecanismos de espalhamento (Kraus et al. 2021).

O estudo da mobilidade eletrônica é de grande importância na investigação e compreensão dos mecanismos de espalhamento que afetam a dinâmica do movimento dos portadores em materiais semicondutores (Sze et al., 2021, Guo et. Al. 2021; Feng et. al. 2020). As investigações das características do comportamento eletrônico visam ampliar a gama de aplicações destes materiais.

Neste trabalho apresentamos os resultados de uma pesquisa experimental (Pereira et.al. 2018) da construção de um equipamento, de baixo custo, para medidas medida Hall, utilizando a técnica de van der Pauw. Para isso, foi desenvolvida uma placa de reles que é controlada via placa DAQ através de um software em Labview. Todo o sistema foi concebido no laboratório de Caracterização de Materiais (LCM) do Instituto de Física e Química (IFQ), pelos alunos de pós-graduação. Além de apresentar a montagem instrumental e o software de controle, são apresentados resultados de uma medida realizada numa amostra teste, através do qual foi possível verificar os tempos de sincronização das medidas e o controle de temperatura. Atualmente este equipamento está sendo utilizado nas aulas do programa de pós-graduação em Materiais para Engenharia e por alunos de pós-graduação em seus trabalhos.

## 2. Metodologia

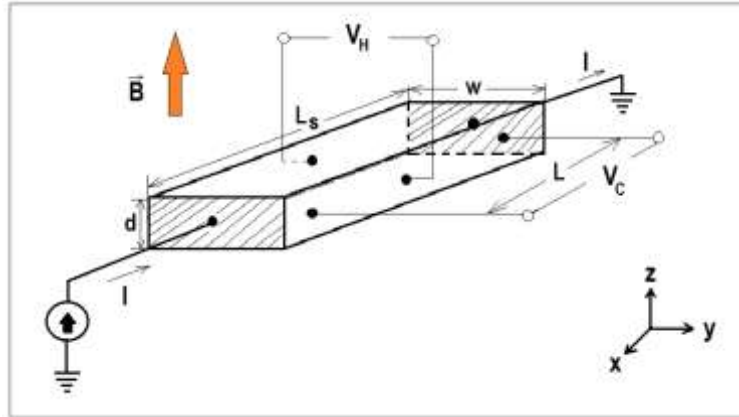
### 2.1 Efeito Hall

Considere um semicondutor no formato de uma barra ilustrada na Figura 1. Após a aplicação do campo magnético na direção  $z$ , os elétrons experimentam uma força  $-e \cdot \mathbf{v} \times \mathbf{B}$ , que terá uma componente  $y$   $-e \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{B})_y$ , logo:  $-e(v_z B_x - v_x B_z) = e \cdot v_x B_z$ . A carga elétrica se acumulará na face  $+y$  da amostra até que uma força oposta  $-e \cdot E_y$  entre em equilíbrio com a força

$e \cdot v_x B_x$ . A densidade de corrente total é, naturalmente,  $j_x = -nev_x$ , de modo que  $e \cdot E_y = ev_x \cdot B = -eB \cdot j_x / ne$ . O coeficiente Hall  $R_H$  é definido pela equação 1.

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B} = -\frac{1}{n \cdot e} \quad (1)$$

**Figura 1:** Configuração para medidas de resistividade e Efeito Hall onde  $L_s$  é o comprimento,  $w$  a largura e  $d$  a espessura da barra. Pelo comprimento da barra é percorrida uma corrente elétrica  $I$ , em que  $V_H$  é medida uma diferença de potencial denominada de tensão Hall, e  $V_c$  é a tensão de condução.



Fonte: Autores (2021).

Sendo a equação 1 válida para a maioria dos materiais semicondutores e, em particular o GaAs. Em uma análise mais precisa o coeficiente Hall é dado pela equação 2.

$$R_H = -\frac{r}{n \cdot e} \quad (2)$$

em que  $r$  é o fator Hall. Para baixos valores de  $E$ , a velocidade  $v_x$  varia linearmente com  $E_x$ , isto é,  $v_x = \mu E_x$ . O coeficiente de proporcionalidade entre  $v$  e  $E$ , chamado de mobilidade  $\mu$ . A mobilidade pode então ser medida da seguinte forma:

$$\mu = \frac{v_x}{E_x} = -\frac{j_x}{neE_x} = \frac{j_x E_y}{E_x j_x B} = \frac{1 E_y}{B E_x} = \frac{1}{B} \left( \frac{V_c w}{V_H l} \right)^{-1} = \frac{1 V_H l}{B V_c w} \quad (3)$$

em que  $V_c = E_x l$  é a tensão de condução, ou seja, a tensão entre os contatos paralelos para o fluxo de corrente, e  $V_H = E_y w$  é a tensão entre os contatos perpendiculares para o fluxo de corrente, a tensão Hall. As equações 1 e 3 constituem as equações para o experimento Hall. A condutividade é definida pela equação 4.

$$\sigma = ne\mu, \quad (4)$$

onde  $\sigma$  é a condutividade. Quando todos os elétrons têm a mesma magnitude da velocidade no eixo  $x$ , a mobilidade Hall  $\mu_H = \mu$ , e da equação 1 temos que  $R_H = -1/n_H e$ , onde  $n_H$  é a concentração de portadores Hall.

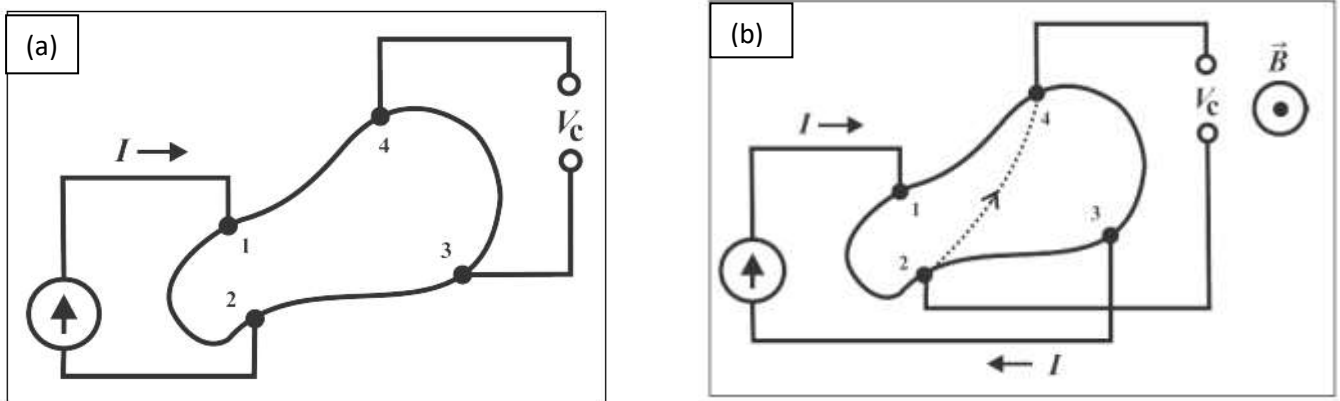
## 2.2 Método de van der Pauw

A caracterização elétrica de um material semicondutor é muito importante, pois traz informações sobre resistividade, condutividade, energia de ativação, a mobilidade eletrônica e a concentração de portadores de carga (Wolfe et al. 1989). Durante

este procedimento é importante saber as dimensões da amostra do material investigado, porém, nem sempre as amostras possuem formas regulares, o que pode dificultar os cálculos de suas propriedades. Uma forma de contornar esse problema é através do método van der Pauw (Oliveira et. al.2021). O método de van der Pauw é o mais utilizado para as medições de resistência elétrica em materiais semicondutores, por ser um método que independe do formato da amostra, sendo necessário apenas a sua espessura. Além disso, tal método contorna vários erros. Van der Pauw formulou essa técnica em 1958 para evitar os erros como desalinhamento dos contatos, efeito Seebeck, e resolver problemas de potencial (Mosbah et. al. 2021; Look, 1992)

A caracterização com 4 pontos utilizando o método de van der Pauw, na qual são realizadas medidas de resistividade pela inclusão da permutação entre os quatro contatos, dois são usados para a aplicação de uma corrente elétrica, e os outros dois na leitura de uma tensão, conforme pode ser visto na Figura 2.

**Figura 2:** Forma arbitrária de uma amostra indicando os contatos para a medida de (a) resistividade e (b) coeficiente Hall, através da técnica de van der Pauw. Na Figura 2 é a corrente elétrica e  $V_c$  a tensão de condução.



Fonte: Autores (2021).

Seja  $R_{ij,kl} = V_{kl}/I_{ij}$ , onde a corrente entra no contato  $i$  e sai pelo contato  $j$ , e  $V_{kl} = V_k - V_l$ . A resistividade, na ausência de campo magnético é dada pela Equação 5.

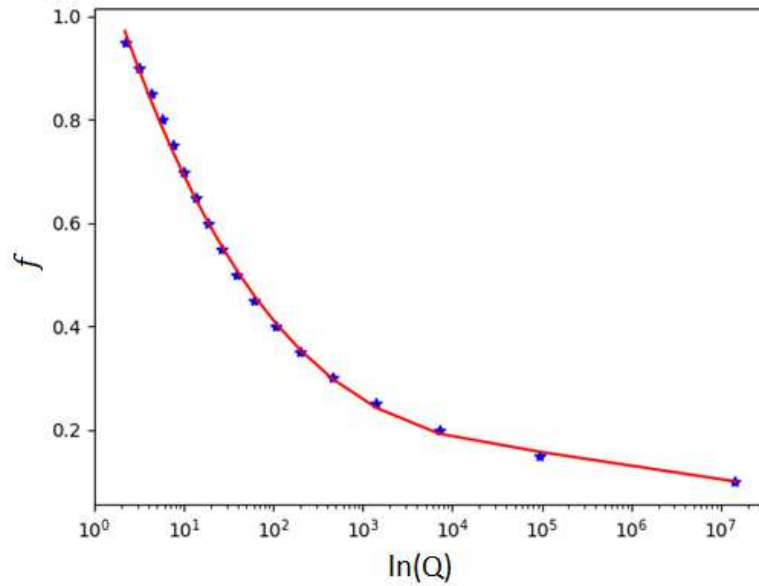
$$\rho = \frac{\pi d}{\ln 2} \cdot \left[ \frac{R_{21,34} + R_{32,41}}{2} \right] \cdot f \quad (5)$$

em que  $f$  é determinado da equação transcendental:

$$\frac{Q - 1}{Q + 1} = \frac{f}{\ln 2} \cdot \operatorname{arccosh} \left\{ \frac{1}{2} \cdot \exp \left[ \frac{\ln 2}{f} \right] \right\} \quad (6)$$

em que  $Q = R_{21,34}/R_{32,41}$  se essa relação for maior que a unidade, caso contrário  $Q = R_{32,41}/R_{21,34}$ . Uma curva de  $f$  vs  $Q$ , com precisão de 2%, é apresentada na Figura 3.

**Figura 3:** Função de taxa de resistividade usada para corrigir os resultados de van der Pauw para a forma de amostra assimétrica.



Fonte: Autores (2021).

A resistividade  $\rho$  pela técnica de van de Pauw é dada por:

$$\rho = \frac{\pi d}{\ln 2} \cdot \frac{1}{8} (R_{21,34} - R_{12,34} + R_{32,41} - R_{23,41}) \cdot f_A +$$

$$\frac{\pi d}{\ln 2} \cdot \frac{1}{8} (R_{43,12} - R_{34,12} + R_{14,23} - R_{41,23}) \cdot f_B \quad (7)$$

onde  $f_A$  e  $f_B$  são determinados de  $Q_A$  e  $Q_B$  respectivamente através das fórmulas abaixo.

$$Q_A = \frac{R_{21,34} - R_{12,34}}{R_{32,41} - R_{23,41}} \quad (8)$$

$$Q_B = \frac{R_{43,12} - R_{34,12}}{R_{14,23} - R_{41,23}} \quad (9)$$

A mobilidade Hall é determinada usando a configuração da Figura 2(b), a qual a corrente e a tensão são cruzadas. Na presença de um campo magnético, para semicondutores isotrópicos, leva à seguinte equação:

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j} + \rho \mu_H (\mathbf{j} \times \mathbf{B}) \quad (10)$$

O cálculo do coeficiente Hall foi realizado pela equação 11. Para minimizar a magnetoresistência e outros efeitos é necessária uma média do campo magnético corrente e o campo com a polaridade invertida.

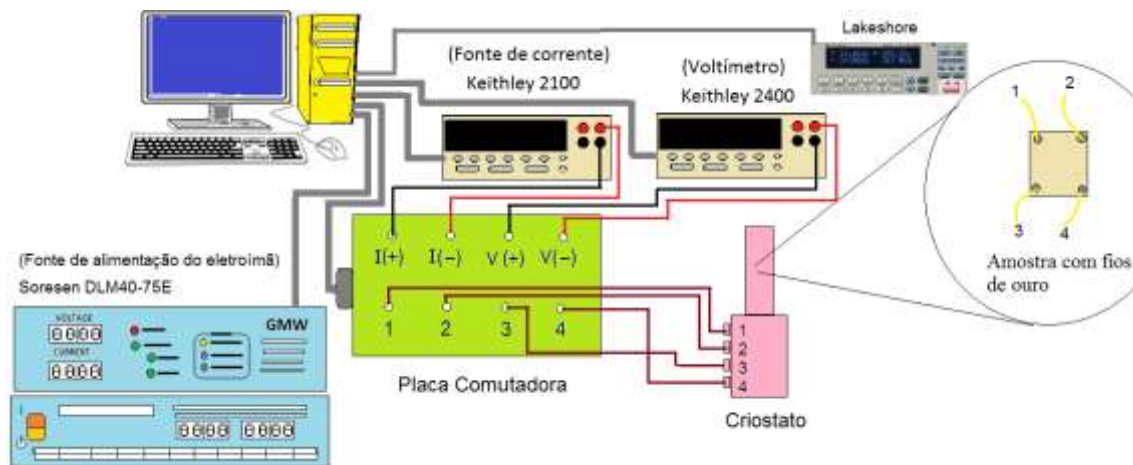
$$R_H = \frac{d}{B} \cdot \frac{1}{8} (R_{31,42}(+B) - R_{13,42}(+B) + R_{42,13}(+B) - R_{24,13}(+B)) +$$

$$\frac{d}{B} \cdot \frac{1}{8} (R_{13,42}(-B) - R_{31,42}(-B) + R_{24,13}(-B) - R_{42,13}(-B)) \quad (11)$$

### 2.3 Desenvolvimento e testes da instrumentação

Para o desenvolvimento de uma pesquisa de pós-graduação no programa de Materiais para Engenharia e para disciplinas do mesmo programa foi desenvolvido um sistema automatizado de medidas Hall pela técnica de van de Pauw no laboratório de Laboratório de Caracterização de Materiais (LCM), do Instituto de Física e Química (IFQ). Para a realização das medições foram utilizados uma Source Meter Keithley 2400, um multímetro, também da marca Keithley 2100, uma placa DAQ, uma fonte de alta corrente da marca GMW, um eletroímã, um sistema com criostato e outros equipamentos. Todo o sistema foi automatizado para a coleta automática dos dados. Para isso, foi utilizado o programa que permitiu a realização de todas as operações de variação da temperatura, inversão de campo magnético, ativação do campo elétrico e medida de corrente, apresentação de gráficos em tempo real e arquivamento dos dados para análise posterior. O esquema de montagem da instrumentação é apresentado na Figura 4.

**Figura 4:** Esquema de montagem das fontes, juntamente com o multímetro e o controle de temperatura do criostato para realização de medidas na amostra.

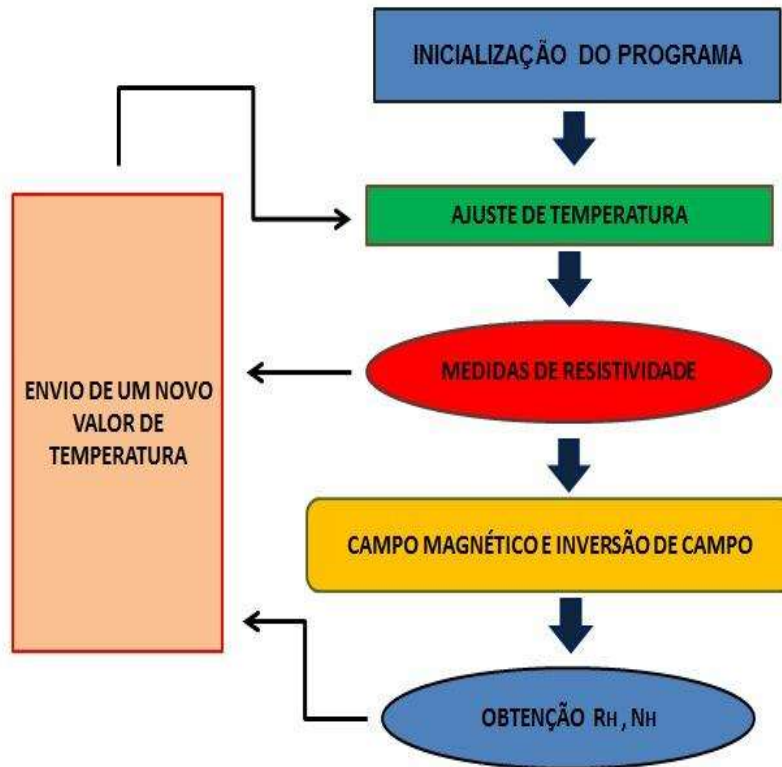


Fonte: Autores (2021).

O programa desenvolvido em Labview inicializa simultaneamente os equipamentos Keithley 2400 e 2100, Lakeshore e a fonte de eletroímã GMW. Para isso, são enviados os valores de temperatura inicial, temperatura final e o passo de varredura das temperaturas, para a criação de um vetor de temperaturas que é enviado para controlar a Lakeshore. São enviados também dados de corrente para a fonte GMW para controle do campo magnético aplicado sobre a amostra. Na fonte Keithley 2400 é configurado o limite máximo de corrente.

Após o envio do valor de temperatura para realizar a medida, o programa analisa constantemente se os sensores de temperatura na amostra estão nos valores desejados. Senão o processo continua até que o valor de temperatura, dentro de uma faixa de erro seja obtido. Após obter esse valor o programa segue para a etapa de medições. Esse processo se repete para todos os valores de temperatura enviados na inicialização do programa. Um fluxograma de funcionamento do programa é apresentado na Figura 5.

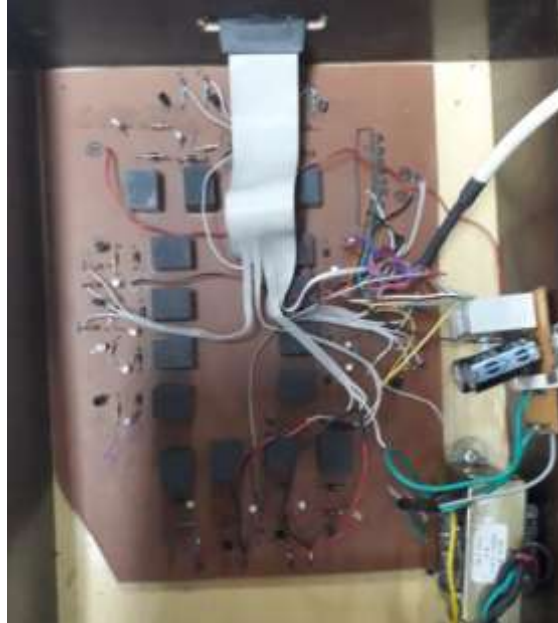
**Figura 5:** Fluxograma de funcionamento do programa, desenvolvido em Labview, para medidas de resistividade, mobilidade e concentração de portadores. No fluxograma é possível verificar as etapas com e sem a aplicação de campo magnético.



Fonte: Autores (2021).

O programa envia o comando para a placa DAQ, que controla os relés da placa Hall (Figura 6) e realiza todas as operações de medida de resistividade e  $R_H$  pela técnica de van der Pawn para aquele valor de temperatura. Esse valor é apresentado em um gráfico na tela do usuário em função da temperatura. Além disso, os dados são salvos em arquivos de dados, para análise posterior. Nesse trabalho apresentaremos os resultados para a medida de uma amostra *Indium tin oxide* (ITO) (Dietrich et. al. 2021).

**Figura 6:** Foto da placa de comutação entre os contatos da amostra. Esta placa é controlada por uma placa DAQ, que por sua vez é controlada pelo software desenvolvido em LabView. Além do controle dessa placa a placa DAQ, juntamente com o software, controla também as mudanças nos valores de campo magnético aplicados na amostra.

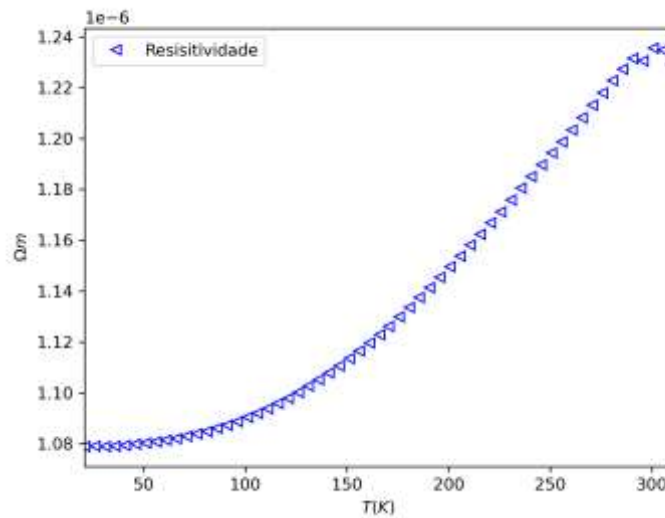


Fonte: Autores (2021).

### 3. Resultados e Discussão

Na Figura 8 é apresentado o gráfico da medida de resistividade em função da temperatura. A amostra varia sua resistividade de  $1,08 \times 10^{-6} \Omega \text{m}$ , em 10K, para  $1,24 \times 10^{-6} \Omega \text{m}$  na temperatura ambiente. Esse aumento da resistividade com a temperatura é típico de amostras metálicas, ou seja, que possui uma sobreposição entre as bandas de valência e condução [1]. Podemos verificar na medida que o equipamento se comportou bem. O intervalo de comutação escolhido para os relés, juntamente com a aplicação de corrente da Keithley 2400 e a medida de tensão pela Keithley 2100, está correto, ou seja, o sistema teve uma boa sincronização. Além disso, foi possível verificar que o software desenvolvido em Labview controlou corretamente a variação de temperatura. Como essa foi uma medida teste os intervalos de temperatura foram adotados com 5K, mas o software permite estipular intervalos de até 1K. Baixos valores no passo de variação de temperatura são importantes para amostras semicondutores, nas quais serão extraídas informações em baixos valores de temperatura. Uma variação pequena de temperatura vai permitir o sistema dentro do criostato ter maior estabilidade, deixando as medidas ainda mais confiáveis.

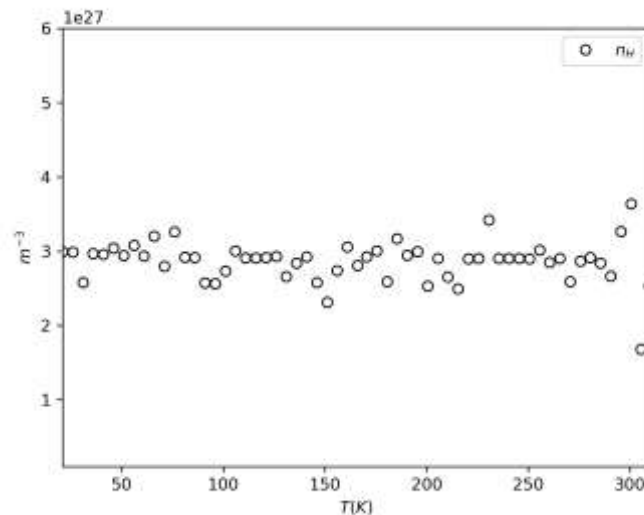
**Figura 7:** Resistividade da amostra de ITO utilizada para verificar o comportamento do instrumento entre a temperatura ambiente e a temperatura de 10K. Podemos verificar pela resistividade que essa amostra apresentou um comportamento metálico.



Fonte: Autores (2021).

Na Figura 8 é apresentado o resultado da medida de concentração de portadores em função da temperatura. Como pode ser verificado essa concentração é aproximadamente constante e da ordem de  $3 \times 10^{27} \text{ m}^{-3}$ . Tal resultado indica que a amostra possui apenas um canal de condução e não existem defeitos capturando os portadores.

**Figura 8:** Concentração de portadores em função da temperatura para amostra de ITO. No gráfico podemos verificar que a amostra possui uma quantidade aproximadamente constante de portadores, da ordem de  $3 \times 10^{27} \text{ m}^{-3}$ . Indicando que a amostra possui apenas um canal de condução.



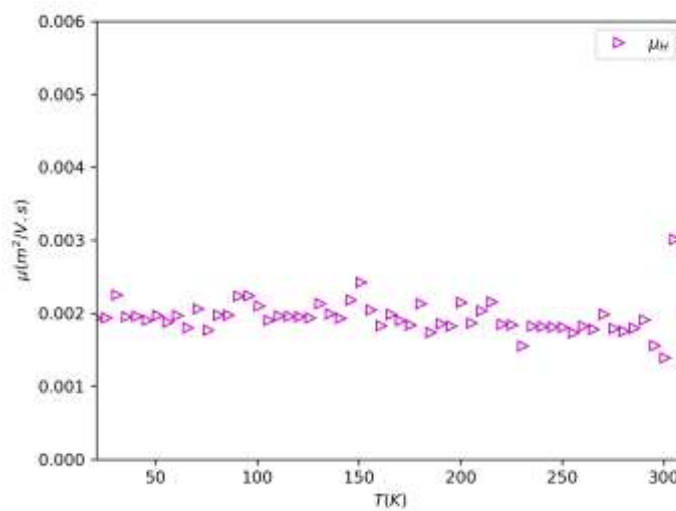
Fonte: Autores (2021).

Na Figura 9 são apresentados os resultados da mobilidade eletrônico, em  $\text{m}^2/\text{Vs}$  para a amostra de ITO. Como pode ser verificado, os dados apresentam uma pequena redução na mobilidade eletrônico a medida que a temperatura é aumentada. Esse comportamento é típico do surgimento de vibrações na rede cristalina, tais como fônons óticos e acústicos, que surgem com o



aumento da temperatura (Oliveira, 2016). Novamente os resultados mostram que a montagem ofereceu bons resultados ao logo das medidas. Lembrando que para obtenção da concentração de portadores e da mobilidade eletrônica foi necessário realizar medidas com o campo na direção positiva, negativa e sem campo magnético, juntamente com a variação dos contatos feita pela placa apresentada na Figura 6. Todas essas operações foram controladas pela placa DAQ que era controlada por um software em Labview. O software em Labview controla todo o sistema, realiza as operações matemáticas necessárias e apresenta em tempo real os comportamentos da mobilidade, temperatura, concentração de portadores e resistividade na amostra.

**Figura 9:** Mobilidade eletrônica da amostra de ITO em função da temperatura. Os dados apresentam uma pequena redução na mobilidade em função do aumento da temperatura. Este comportamento é típico de espalhamento por fônons óticos e acústicos, devido ao aumento de temperatura.



Fonte: Autores (2021).

#### 4. Conclusão

Foi construída uma placa com relés para realizar as operações das medidas de mobilidade eletrônica, resistividade e concentração de portadores pela técnica de van der Pauw. Essa construção reduziu muito os custos do equipamento e serviu como objeto de aprendizagem para os alunos que participaram da construção. A automação do sistema foi realizada através de uma placa DAQ, de comunicação via GPIB, controlada por um software em Labview, que realizava o controle da temperatura, do campo magnético, das operações com os relés e da fonte e multímetro da Keithley. O software foi inteiramente construído por alunos de graduação e pós-graduação. Após essa etapa o equipamento foi testado e de acordo com os resultados as medidas foram satisfatórias. Atualmente, o equipamento está sendo utilizado para medidas de amostras de GaAs/InAs, que são pertencentes a um trabalho de doutorado e em disciplinas do programa de pós-graduação em Materiais para Engenharia da Unifei. Além disso, está disponível para a colaboração com outros pesquisadores interessados.

Diante do sucesso na construção desse experimento, nosso grupo pretende desenvolver novos equipamentos e metodologias para a caracterização elétrica e ótica de materiais. Com isso, capacitando discentes na área de instrumentação e obtendo resultados científicos, na caracterização materiais e dispositivos, relevantes para a comunidade científica.

#### Agradecimentos

Agradecemos o apoio financeiro da Fapemig, Cnpq e Capes. Agradecemos também a Universidade Federal de Itajubá

(UNIFEI) e ao laboratório de Caracterização de Materiais (LCM) do Instituto de Física e Química (IFQ).

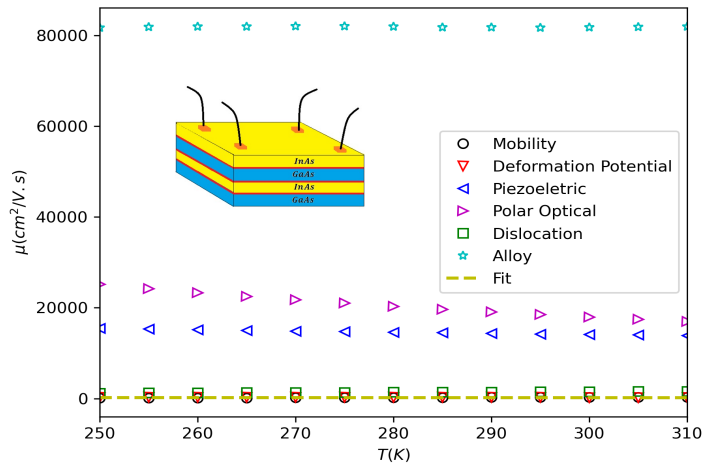
## Referências

- Adachi, S. (2005) *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*. John Wiley & Sons, Ltd
- Dietrich, S., Kusnezoff, M., Petasch, U., & Michaelis, A. (2021). Evaluation of Indium Tin Oxide for Gas Sensing Applications: Adsorption/Desorption and Electrical Conductivity Studies on Powders and Thick Films. *Sensors*, 21(2), 497.
- Feng, Z., Qin, P., Yang, Y., Yan, H., Guo, H., Wang, X., Zhou, X., Han, Y., Yi, J., Qi, D., Yu, X., Breese, M. B. H., Zhang, X., Wu, H., Chen, H., Xiang, H., Jiang, C., & Liu, Z. (2021). A two-dimensional electron gas based on a 5s oxide with high room-temperature mobility and strain sensitivity. *Acta Materialia*, 204, 116516.
- Guo, H., Chu, W., Prezhdo, O. V., Zheng, Q., & Zhao, J. (2021). Strong Modulation of Band Gap, Carrier Mobility and Lifetime in Two-Dimensional Black Phosphorene through Acoustic Phonon Excitation. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 12(16), 3960–3967.
- Kraus H., Lin Q., Giustino F., Herz L. M. & Johnston M. B. (2021) Limits to Electrical Mobility in Lead-Halide Perovskite Semiconductors. *The Journal of Physical Chemistry Letters* 12 (14), 3607-3617
- Jiang, M. H., Wang, X. B., Xu, Q., Li, M., Niu, D. H., Sun, X. Q., Wang, F., Li, Z. Y. & Zhang, D. M. (2018) High-speed electro-optic switch based on nonlinear polymer-clad waveguide incorporated with quasi-in-plane coplanar waveguide electrodes, *Optical Materials*, 75, 26-30
- Liu, A. Y., Herrick, R. W., Ueda, O., Petroff, P. M., Gossard, A. C. & Bowers, J. E., (2015) Reliability of InAs/GaAs Quantum Dot Lasers Epitaxially Grown on Silicon, in *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 21(6), 690-697
- Look, D. C. (1992) *Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices*, Wiley
- Martins, G. S., Gomes, S. A. O., Louro, S. R. W., Wajnberg, E., Alves, O. C., Almeida, D. B., Cesar, C. L. & Feder, D. (2020) Evaluation of Biological Toxicity of CdTe Quantum Dots in *Trypanosoma cruzi*. *Research, Society and Development*, 9(12), e34391211274.
- Mosbah, A., Saker, A., Mekki, D. E., & Bouzabata, B. (2021). Microstructure and Electrical Properties of the DC-sputtered Al<sub>1-x</sub>Mox Alloys. *Brazilian Journal of Physics*, 51(3), 461–468.
- Oliveira, A. F. (2015) *Transporte eletrônico em amostras de InAs/GaAs e mecanismos de espalhamento. Uma nova abordagem de ajustes pelo método de otimização global*. 108 f. Tese (Doutorado em Materiais para Engenharia) – Universidade Federal de Itajubá.
- Oliveira, A.F., Rubinger, R.M., Monteiro, H., Rubinger C. P. L., Ribeiro G. M. & de Oliveira A. G. (2016). Main scattering mechanisms in InAs/GaAs multi-quantum-well: a new approach by the global optimization method. *J Mater Sci* 51, 1333–1343
- Oliveira, F. S., Guimarães, L. G., dos Santos, C. A. M., de Lima, B. S., & da Luz, M. S. (2021). Electrical and thermodynamic study of SrTiO<sub>3</sub> reduction using the van der Pauw method. *Materials Chemistry and Physics*, 263, 124428.
- Pereira, A. S., Shitsuka, D. M., Parreira, F. J., Shitsuka, R. (2018) *Metodologia de pesquisa científica*, UFSM.
- Sousa, N. P., Silva, C. F., Medeiros, R. G. C., Freitas, P. G. M. & Zenóbio, I. R. (2021) Semiconductor thin film's topographic and roughness characterization through confocal microscopy. *Research, Society and Development*, 10(5), e22810514833.
- Sun, I. W., & Chen, P. Y. (2014) *Semiconductors Groups II-IV and III-V, Electrochemical Deposition*. In: Kreysa G., Ota K., Savinell R. F. (eds) *Encyclopedia of Applied Electrochemistry*. Springer.
- Sze, S. M., Li, Y., & Ng, K. K. (2021) *Physics of Semiconductor Devices*: John Wiley & Sons
- Toledo, R. P., Huanca, D. R., Oliveira, A. F., dos Santos Filho, S. G., & Salcedo, W. J. (2020). Electrical and optical characterizations of erbium doped MPS/PANI heterojunctions. *Applied Surface Science*, 529, 146994
- Yong-Hang, Z., & David, J. S. (2021) Heterovalent semiconductor structures and devices grown by molecular beam epitaxy, *Journal of Vacuum Science & Technology A* 39, 030803
- Wolfe, C. M., M, W. C., Wolfe, C. N., Holonyak, N., Stillman, G. E. & Holonyak, N. J. (1989) *Physical Properties of Semiconductors*, Prentice Hall
- Wróbel, J., Umana-Membreno, G. A., Boguski, J., Sztenkiel, D., Michałowski, P. P., Martyniuk, P., Faraone, L., Wróbel, J. & Rogalski, A. (2020), Locally-Strain-Induced Heavy-Hole-Band Splitting Observed in Mobility Spectrum of p-Type InAs Grown on GaAs. *Phys. Status Solidi RRL*, 14: 1900604

## Graphical Abstract

### Investigation of electronic transport in InAs/GaAs samples. A study using the metaheuristic self-adaptive differential evolution method

Luiz Henrique Ribeiro, João Ider, Adhimar Flávio Oliveira, Rero Marques Rubinger, Carla Patrícia Lacerda Rubinger, Alfredo Gontijo de Oliveira



## Highlights

### **Investigation of electronic transport in InAs/GaAs samples. A study using the metaheuristic self-adaptive differential evolution method**

Luiz Henrique Ribeiro, João Ider, Adhimar Flávio Oliveira, Rero Marques Rubinger, Carla Patrícia Lacerda Rubinger, Alfredo Gontijo de Oliveira

- Electronic transport in InAs/GaAs samples
- Optimization by the Self-adaptive Differential Evolution method
- Limitation of electronic mobility due to the presence of dislocations

# Investigation of electronic transport in InAs/GaAs samples. A study using the metaheuristic self-adaptive differential evolution method

Luiz Henrique Ribeiro<sup>a</sup>, João Ider<sup>a</sup>, Adhimar Flávio Oliveira<sup>a</sup>, Rero Marques Rubinger<sup>a</sup>, Carla Patrícia Lacerda Rubinger<sup>a</sup> and Alfredo Gontijo de Oliveira<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Universidade Federal de Itajuba, Av BPS, 1303, Pinheirinho, Itajubá, MG 37500-903, Brazil

<sup>b</sup>Universidade Federal de Minas Gerais, Av. Pres. Antônio Carlos, 662, Pampulha, Belo Horizonte, MG 31270-901, Brazil

## ARTICLE INFO

### Keywords:

Self-adaptive Differential Evolution  
electronic mobility  
Scattering mechanisms  
electronic transport  
InAs/GaAs

## ABSTRACT

This manuscript presents the study of electronic transport on a set of five multilayer molecular beam epitaxy-grown InAs/GaAs semiconductor samples. We developed an automated switch system to carry out electronic transport measurements of mobility and carrier concentration using the van der Pauw technique. Measurements were carried out as a function of temperature within the range of 260 K to 310 K. To identify which scattering mechanisms most contributed to mobility limitation, It was necessary to use the Self-adaptive Differential Evolution meta-heuristic method. This method allowed the determination of the main scattering mechanisms limiting the electronic mobility and identified as scattering by dislocations and phonons. Dislocations consist of the dominant defects in this lattice mismatch structure. Therefore, to increase carrier mobility, we propose some strategies: a change in the sample growth parameters such as substrate temperature and InAs/GaAs layer thickness. Alternatively, annealing of the samples could also be considered to improve sample mobility.

## 1. Introduction

Technologies for the production of materials involved in the generation of electronic devices have achieved enormous advances in recent years. Semiconductor materials composed mainly of groups II-VI and groups III-V of the periodic table have been used to manufacture high-efficiency electronic devices, such as those for power, highfrequency, and photovoltaic power generation [1, 3]. Current devices need to be increasingly smaller in size and can be found in manufacturers of devices such as integrated circuits, infrared light-emitting diodes, laser diodes, LED detectors, and solar cells [29, 14, 21].

Among the semiconductor materials developed with compounds from groups, II-IV and III-V are Gallium Arsenide (GaAs) and Indium Arsenide (InAs) that stand out, unlike silicon (Si), due to its direct bandgap[25], high electronic mobility compared to other semiconductors, more excellent resistance to ionizing radiation, and other superior electrical and optical properties. Structurally they have the cubic zinc blend structure which is essential for the microelectronics industry[8].

Heterostructures is a semiconductor junction which materials of different compositions or structures share the same interface [26]. For this work, semi-insulating GaAs substrates were used to start the sample growth by molecular beam epitaxy (MBE) [27]. After the growth of a GaAs buffer layer, altering the layers of InAs and GaAs spacers were deposited. Due to the difference between the lattice parameter of GaAs and InAs being that of InAs larger than the one of GaAs, the InAs layer is deposited with in-plane stress. After a critical InAs thickness is reached, the stress is relaxed, resulting in the formation of quantum dots [9]. Another relaxation process occurs in the form of intrinsic defects such

as the dislocation lines [31]. Residual stress remains, affecting the InAs band structure and its carrier effective masses cause the reduction of electronic transport and limit mobility electrons [20, 18].

The present study aimed to investigate the scattering mechanisms involved in the samples focusing on the one limited by dislocations and other ones that were identified through the use of the Self-adaptive Differential Evolution meta-heuristic method and presented in the following sections.

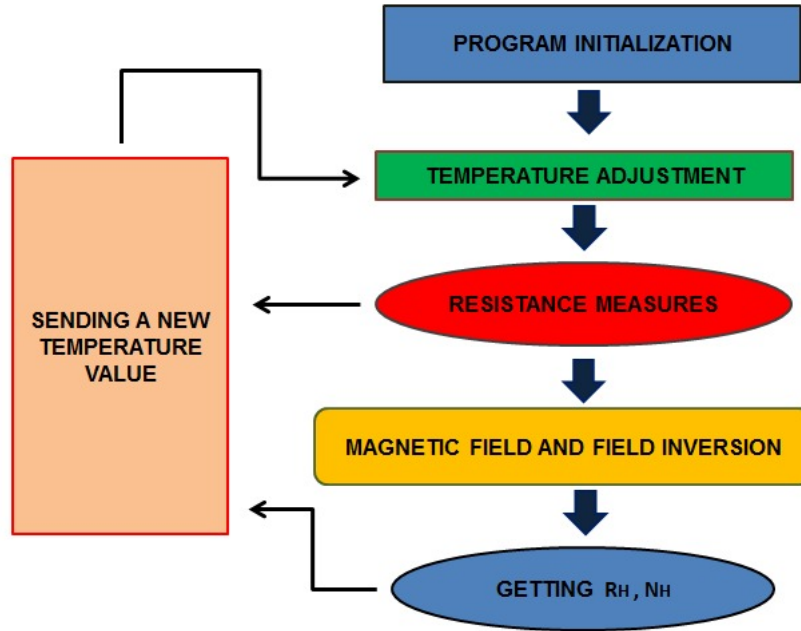
## 2. Materials and Methods

Multilayer InAs/GaAs Samples prepared by MBE, following the growth parameters indicated in Table 1. Transport properties were determined by electrical characterization using a Keithley 2400 Source Meter and a Keithley 2100 6 1/2 digital multimeter. Measurement setup considered van der Pauw technique with a GMW 5403 magnet and connected to GMW switch system and power source. The control of the magnetic field and connections between the sample and measuring instruments used a DAQ control board. The temperature was controlled by a Janis cryostat system. Van der Pauw technique was implemented with a relay circuit board activated by DAQ DIO ports for exchanging contacts and connections to both Keithkey 2400 and 2100. The entire system was automated to perform contact changes in the sample and inversions in the magnetic field. The diagram of Figure 1 shows a summary of the processes performed during Hall factor ( $R_H$ ) and carrier concentration ( $n_H$ ) measurements.

ORCID(s): 0000-0003-2586-7359 (A.F. Oliveira)

**Table 1**  
Growth parameters of InAs/GaAs semiconductor samples.

Samples	Growth temperature (°C)	InAs/GaAs periods	InAs coverage (ML)	GaAs Spacer (ML)
$S_1$	485	50	1.9	30
$S_2$	475	100	1.9	30
$S_3$	485	50	2.5	40
$S_4$	475	50	3.0	40
$S_5$	500	50	1.4	40



**Figure 1:** Block diagram summarizing the automation process for collecting electronic mobility data and the concentration of carriers, using the van der Pauw technique.

### 3. Main scattering mechanisms in GaAs and InAs

We used the main scattering mechanisms present in GaAs and InAs samples to model the experimental data. These mechanisms were combined using the Matthiessen rule given by equation 1.

$$\rho = \rho_T + \rho_i + \rho_d \quad (1)$$

where  $\rho_T$ ,  $\rho_i$  and  $\rho_d$  are resistivities due to phonons, impurities, alloys, and deformations such as dislocations. In terms of mobility, knowing that conductivity is  $\sigma = \frac{1}{\rho}$  and  $\sigma = n \cdot q \cdot \mu$ , like this:

$$\mu^{-1} = \sum \mu_i^{-1} \quad (2)$$

We present a summary of the main scattering mechanisms for the studied samples. The equations were imple-

mented as an objective function in the Self-adaptive Differential Evolution (SADE) metaheuristic method to model the experimental data.

#### 3.1. Ionized impurities

The scattering by impurities is characterized by an electrical interaction between the load of the impurity and the load of the free carrier [4]. It can be with impurities of type  $P$  or type  $N$  (our samples the impurities of type  $N$ ).

The potential of the lattice is Coulombian will depend on the atoms that form the crystalline lattice and the impurities also present on it. For a  $Ze$  charged ion, the disturbance in the potential of a perfect crystal is simply the Coulombian energy given by:

$$\Delta U = \frac{\pm Ze}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (3)$$

where  $r$  is the distance between the ion and the charge carrier.

The scattering by ionized impurities occurs mainly at low temperatures or for large concentrations of impurities. When passing through the vicinity of an ionized atom, the carrier undergoes a deviation in its trajectory due to the interaction between the electric field of the ionized atom and the charge of the carrier. Naturally, the higher the speed of the carrier, the lower the deflection suffered; thus, the scattering by ionized impurities is more relevant at low temperatures, which implies a lower thermal speed of the carriers.

The mobility ratio for impurities [12, 7] is given by:

$$\mu_{ic} = \frac{4\pi\epsilon_s^2\hbar^3k^3}{e^3m^{*2}N_{ic}I_B} \quad (4)$$

where  $N_{ic}$  is the density of impurities in the potential well due to remote impurities and/or at the interface,  $\epsilon_s$  is the low frequency dielectric constant,  $\hbar$  is the reduced Planck constant,  $k^2 = 2m^*E/\hbar^2$ , and the calculation of  $I_B$  is given by the equation:

$$I_B(\beta) = \int_0^\pi \frac{\sin^2\theta}{(\sin\theta + \beta)^2} d\theta \quad (5)$$

where  $\beta = S_0/2k$  and  $S_0$  is the shielding constant due to impurities and can be defined as:

$$S_0 = \frac{e^2n}{2\epsilon_s k_B T} \quad (6)$$

where  $n$  is the carrier density,  $k_B$  is the Boltzmann constant and  $T$  is the temperature in the kelvin lattice.

### 3.2. Dislocation lines

These defects appear when the crystal is grown. There is a great interest in the use of crystalline materials grown with this incompatibility in atomic positions to construct electronic devices [11]. The materials have different lattice parameters through the epitaxial growth of a layer of thinner material (film) over a substrate. Thus, the formation energy resulting from the offset in the atomic position will produce stress in the lattice, which can be relaxed in the form of dislocations. Mobility due to scattering due to dislocations is formula by the formula:

$$\mu_{dis} = \frac{4\pi\epsilon_s^2k^4a^2}{e^3m^{*2}N_{dis}I_t} \quad (7)$$

where  $N_{dis}$  is the charge density of dislocations, and  $I_t$  is defined by:

$$I_t = \frac{1}{2}\xi^2 \int_0^1 \frac{1}{(1 + \xi^2u^2)\sqrt{1-u^2}} du \quad (8)$$

where  $u$  is related to the electron-impurity interaction,  $\xi = ka_B$  is a dimensionless parameter and  $a_B$  is the Bohr radius, which is defined by:

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_s^2\hbar^2}{e^2m^*} \quad (9)$$

### 3.3. Piezoelectric

The atomic displacements produced by the vibrations of the lattice in acoustic mode introduce a potential if the atoms are partially ionized. These ions produce internal electric fields that change in time and space, caused mainly by longitudinal acoustic phonons (LA). The scattering related to this effect is called piezoelectric scattering, which occurs in crystals without a symmetry center, which includes all compound semiconductors.

A relaxation time can be defined for the piezoelectric potential mechanism, as the energy change during collisions is small. The relaxation time is given by:

$$\tau_{pe}(\epsilon) = \frac{2\sqrt{2\pi}\hbar^2 \cdot D \cdot s^2 \cdot \sqrt{\epsilon}}{(ehpz/\epsilon)^2 \sqrt{m^*} \cdot kT} \quad (10)$$

where  $P$  is defined by:

$$P = \sqrt{\frac{\hbar_{pz}^2}{Ds^2\epsilon}} \quad (11)$$

where  $T$  is temperature and  $\epsilon$  is energy. Mobility for relaxation time is:

$$\mu_{dp} = \frac{16\sqrt{2\pi} \cdot \epsilon\hbar^2}{3eP^2 \cdot (m^*)^{3/2} \cdot \sqrt{kT}} \quad (12)$$

### 3.4. Deformation potential

In the presence of acoustic phonons, neighboring atoms move in the same direction, thus altering the configuration of the crystalline lattice, changing its potential. This deformed potential spreads the load carrier, being proportional to the voltage in the lattice. The mobility due to the potential for deformation by acoustic phonons can be calculated by the formula 13:

$$\mu_{dp} = \frac{e\hbar^3u_l^2\delta Z_0}{m^{*2}NE_d^2k_B T} \quad (13)$$

where  $E_d$  is the deformation potential constant,  $u_l$  is the longitudinal velocity of the acoustic phonons, and  $\delta$  is the crystal density. The scattering by deformation potential has a lag of  $90^\circ$  [28] in relation to the piezoelectric acoustic scattering, making the two scattering mechanisms independent.

### 3.5. Optical phonons

Like the acoustic phonons, the expansion and contraction of the unit cell are dominated by the longitudinal optical phonons. The scattering due to optical phonons in polar mode occurs due to the electric field caused by the polarization of ions in the primitive cell inducing vibrations in the lattice in an optical mode.

Thus, when the cation and anion vibrate against each other in a longitudinal optical phonon mode, a polarization field is generated, causing a substantial disturbance of the electrons, resulting in polar dispersion of the optical phonon. The mobility due to scattering by optical phonons is given by [13, 17]:

$$\mu_{po} = \frac{4\pi\epsilon_p \hbar^3}{e\theta_{po} k_B m^* Z_0} \cdot [e^{\frac{\theta_{po}}{T}} - 1] \quad (14)$$

where  $\theta_{po}$  is the temperature of the optical phonon and  $Z_0$  is the width of the quantum well.

### 3.6. Scattering by disorder in alloys

The scattering disorder alloys [15] occur at the interface between the GaAs and InAs, forming the semiconductor alloy. In this interface, a non-periodic crystalline structure causes variations in the potential of the lattice  $V_A$  (potential due to GaAs) and  $V_B$  (potential due to InAs) scattering the load carrier.

The electronic mobility is given by Equation 15.

$$\mu_{al} = \frac{16}{3b} \frac{e\hbar^3}{x(x-1)m^* \Omega_0 \Delta V_{al}^2} \quad (15)$$

where  $\Omega_0$  is the volume occupied by an atom in the alloy,  $\Delta V_{al}^2$  is the potential difference between the components of the alloy,  $x$  is the fraction of the alloy and  $b$  is the Fang-Howard factor that can be calculated by the formula;

$$b = \left( \frac{33e^2 m^* n}{8\epsilon_s \hbar^2} \right)^{1/3} \quad (16)$$

where  $\epsilon_s$  is a low frequency dielectric constant.

## 4. Self-adaptative Differential Evolution

Through the main scattering mechanisms and SADE, it was possible to extract the fitting parameters of the mechanisms that robustly limit electronic mobility. The meta-heuristic method called Differential Evolution (DE) was proposed by Storn and Price [23] and is an evolutionary algorithm based on natural selection mechanisms and population genetics. For this, the DE uses mutation, crossing and selection operators to generate new individuals in searching for the most adapted. Initially, the DE algorithm was applied to solve continuous variable systems [23] and soon proved to be efficient for a wide range of problems [22, 2, 24, 19]. Later, it received an update, no longer dependent on control

parameters that became self-adaptive [5], receiving the name of SADE. Initially, at SADE, individuals are randomly generated within predefined physical intervals, generating the initial population that will evolve through the generations. Each individual is a candidate for the solution that minimizes the objective function. In this work, we found the recombination using the rule described by equation (17).

$$P_{i,j}^{G=1} = P_L^{G=1} + R_{i,j}(0,1) (P_U^{G=1} - P_L^{G=1}), \quad (17)$$

where the  $i$  and  $j$  index is the population size and the number of parameters to be fitted, ranging from 1 to 100 and from 1 to 13, respectively. In our model, the fitted parameters refer to the solution of the equations of the different scattering mechanisms that limit electronic mobility. Besides,  $R_{i,j}(0,1)$  is a random number between 0 and 1, with uniform distribution;  $P_L$  and  $P_U$  are the lower and upper limits for individuals, respectively.  $G$  refers to the generation number, between 1 and 50000 in this work.

In the mutation stage, we obtained a donor vector through equation 18.

$$D_i^G = P_i^G + F (P_{best}^G - P_i^G) + F (P_{r1}^G - P_{r2}^G), \quad (18)$$

where  $P_{best}^G$  is the individual who best minimizes the objective function and  $P_{r1}^G$  and  $P_{r2}^G$  are individuals chosen at random, different ones from others and the current individual  $P_i^G$ .  $F$  is the mutation factor that is adjusted by Equation 19.

$$F_i^{G+1} = \begin{cases} F_l + R_1 F_u & \text{if } R_2 < \tau_1 \\ F_i^G & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (19)$$

At recombination or crossing, the donor vector is mixed with the vector  $P_i^G$ , generating a temporary vector  $T_i^G$ . In this work, recombination was done using the rule described by Equation 20.

$$T_{i,j}^G = \begin{cases} D_{i,j} & \text{if } R(0,1)_j \leq CR \text{ or } j = j_R \\ P_{i,j}^G & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (20)$$

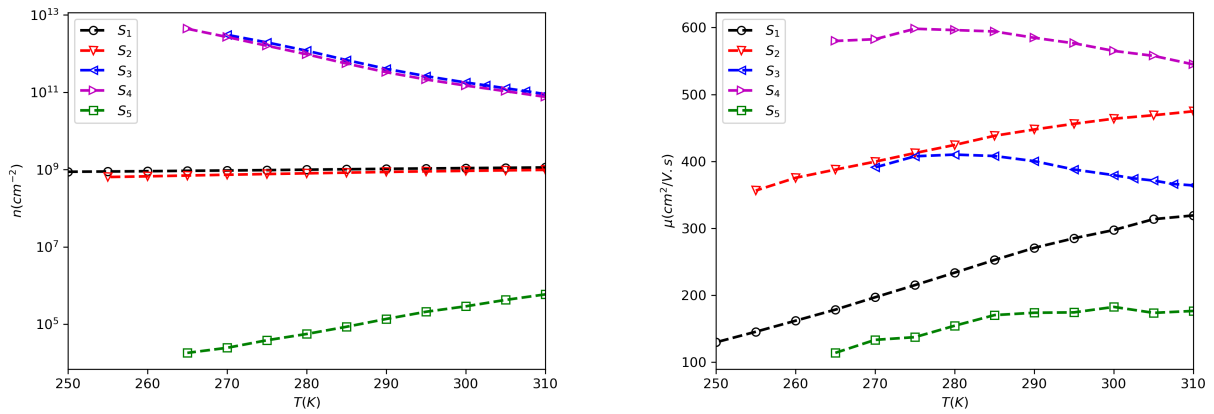
where  $j_R$  is a random integer between 1 and 13, according to the number of parameters to be fitted. The crossover rate,  $CR$ , is a real number, defined by Equation 21.

$$CR_i^{G+1} = \begin{cases} R_3 & \text{if } R_4 < \tau_2, \\ CR_i^G & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (21)$$

where  $R_4$  are 4 random numbers between 0 and 1.  $\tau_1$  and  $\tau_2$  represent the probabilities of fitting  $F$  and  $CR$ . Finally, in the selection step, we compare the temporary vector  $T_i^G$ , and the vectors that best minimize the objective function are chosen, using the 22 relationships.

$$P_i^{G+1} = \begin{cases} T_i^G, & \text{if } f(T_i) < f(P_i), \\ P_{i,j}^G, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (22)$$





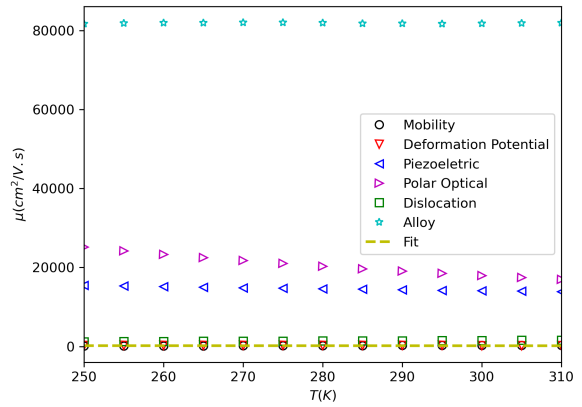
**Figure 2:** Carrier concentration and electronic mobility as a function of temperature for studied samples.

This process repeats until reaching end of generations, or some predefined criterion is satisfied.

## 5. Results and discussion

Figure 2 shows mobility and carrier concentration measured for the five samples as a function of temperature. These samples presented low electronic mobility, and high resistivity such that the measurements occur in the temperature range between 250 K and 310 K. We modeled these data using the distinct scattering mechanisms, and the SADE method presented previously, estimating the parameters that characterize the studied samples. The behavior of the concentration of carriers in this temperature range indicates that electronic transport occurs in a single conduction channel.  $S_3$  and  $S_4$  have an average carrier concentration of  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , slightly negative slope increasing temperature.  $S_1$  and  $S_2$ , they have an approximately constant concentration of carriers with an average value of  $10^9 \text{ cm}^{-2}$ , and sample  $S_5$  has an average value of  $10^5 \text{ cm}^{-2}$ , with a positive slope. The electronic mobility in this temperature range is limited mainly by phonons and lattice defects [20]. This result is confirmed in the different mechanisms limiting mobility, where the ionized impurities do not affect electronic mobility in the measured temperature range.

Figure 3 shows the fittings of electronic mobility as a function of the temperature between 250 K and 310 K for sample  $S_1$ . We can verify that the main mechanisms that limit electronic mobility are phonons due to deformation for the potential and dislocations. The other scattering mechanisms such as piezoelectric, polar, and alloy phonons contribute to fine-tuning mobility. The scattering due to dislocations arises due to the difference between the lattice constants of InAs and GaAs. Such difference also results in the formation of quantum dots, and part of the stress is still present in the lattice. The main fitting parameters are shown in Table 2, in which an increase in effective mass in all samples is noticeable. This increase is justified due to residual unrelaxed stress in the lattice at the interface between GaAs



**Figure 3:** Mobility vs temperature considering all contributing scattering mechanisms represented by open symbols. The fit of electron mobility in sample  $S_1$  (dashed line).

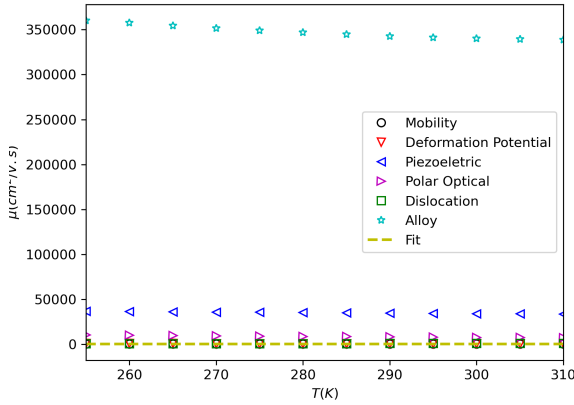
and InAs. The effect of stress on the lattice is equivalent to subjecting the lattice to high pressure. It is known that the effect of pressure in semiconductors, such as GaAs and InAs, deforms the band structure, causing a reduction in the energy difference between the  $\Gamma$  valley and the  $L$  and  $X$  valleys of the conduction band [16, 30, 6, 10].

Figure 4 presents the mobility fittings of sample  $S_2$  in the same temperature range. For the  $S_1$  sample, the main scattering mechanisms that limit electronic mobility are dislocation and polar optical and acoustic phonons by deformation of the potential. The other mechanisms make small contributions to the fitting.

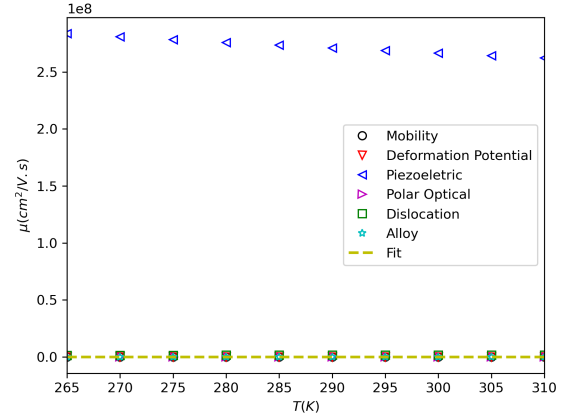
In Figure 5, we verify that the scattering mechanisms mainly limiting sample  $S_3$  mobility are due to alloys, dislocations, acoustic phonons deformation potential, and polar optical. The acoustic phonon has little contribution in limiting mobility in this sample. In Table 2, it is possible to verify that there is a reduction in the charge density of dislocations.

**Table 2**  
Main fitting parameters obtained through the SADE method.

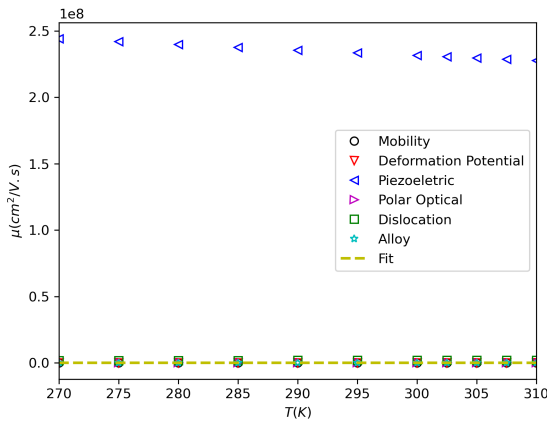
Sample	$m^*$	$N_{dis}$ (cm <sup>-2</sup> )	$x$	$\epsilon_\infty$	$\epsilon$
$S_1$	0.31	$1.0 \times 10^{10}$	0.35	12.5	12.9
$S_2$	0.30	$1.0 \times 10^{10}$	0.36	10.4	12.9
$S_3$	0.39	$1.0 \times 10^7$	0.41	10.4	14.4
$S_4$	0.36	$1.0 \times 10^7$	0.44	10.5	12.9
$S_5$	0.38	$1.0 \times 10^{10}$	0.35	12.5	12.9



**Figure 4:** Mobility vs temperature considering all contributing scattering mechanisms represented by open symbols. The fit of electron mobility in sample  $S_2$  (dashed line).



**Figure 6:** Mobility vs temperature considering all contributing scattering mechanisms represented by open symbols. The fit of electron mobility in sample  $S_4$  (dashed line).



**Figure 5:** Mobility vs temperature considering all contributing scattering mechanisms represented by open symbols. The fit of electron mobility in sample  $S_3$  (dashed line).

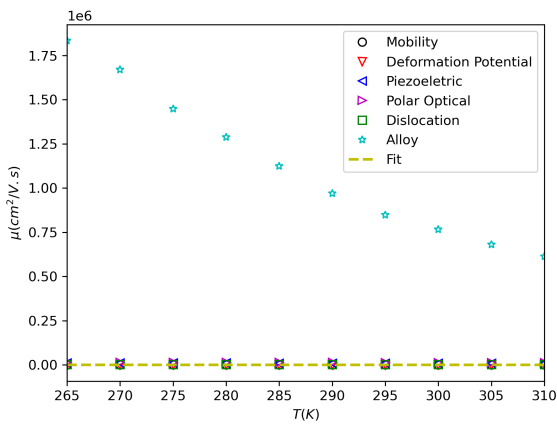
Thus, the limitation of mobility due to scattering in alloys became more significant in the alloy  $In_xGa_{(1-x)}As$  than in the two previous samples. The sample  $S_4$  presents a similar behavior to the sample  $S_3$  (see Figure 6.).

In Figure 7, the fittings of the sample  $S_5$  is shown. We can see that electronic mobility is limited mainly by the combination of dislocations and phonons scattering mechanisms.

The contribution of scattering by alloys is lower in this sample. As in the other samples, the residual unrelaxed stress in the lattice deforms the band structure, causing a reduction in the energy difference between the  $\Gamma$  valley and the  $L$  and  $X$  valleys of the conduction band. Analyzing Table 1 and Table 2, it is possible to verify that the increase in InAs coverage is directly related to the density of dislocations loads. For greater thicknesses of InAs, the presence of lines of dislocations is less than when the coverage of InAs. Despite the reduction in the lines of discrepancies, the residual stress in the lattice, close to the interface between InAs and GaAs, continues, resulting in the deformation of the band structure and a high value of effective mass that limits electronic transport. This parameter needs to be carefully evaluated so that the samples show an improvement in their electronic properties.

## 6. Conclusions

A set of five GaAs/InAs samples were grown using MBE and characterized electrically by the van der Pauw technique. The apparatus for the measurements were assembled and automated during this research. From the measurements, we obtained the carrier concentration and electronic mobility as a function of temperature. For the analysis of electronic mobility, the Self-adaptative Differential Evolution method was used, which proved robust to determine the main scat-



**Figure 7:** Mobility vs temperature considering all contributing scattering mechanisms represented by open symbols. The fit of electron mobility in sample  $S_5$  (dashed line).

tering mechanisms that limit electronic mobility for this set of samples and their parameters. According to our results, we observed lattice stress relaxation, close to the interface InAs/GaAs, in the form of stress still remained which affected carrier effective mass and quantum dots, part of the residual. This occurred due to the band structure deformation, causing a reduction in the energy difference between the  $\Gamma$  and the  $L$  and  $X$  valleys of the conduction band.

Such evidence of the effects of residual stress on the growth of GaAs/InAs samples will be important for the growth or treatment of samples, aiming at their application in devices that seek to improve electronic and optical properties together.

## Acknowledgement

We are grateful for the financial support of Fapemig, Cnpq, and Capes.

## References

- [1] Adachi, S., 2005. Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors. John Wiley & Sons, Ltd. URL: <https://doi.org/10.1002/0470090340>, doi:10.1002/0470090340.
- [2] Beirami, H., Shabestari, A.Z., Zerafat, M.M., 2015. Optimal PID plus fuzzy controller design for a PEM fuel cell air feed system using the self-adaptive differential evolution algorithm. International Journal of Hydrogen Energy 40, 9422–9434. URL: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.05.114>, doi:10.1016/j.ijhydene.2015.05.114.
- [3] Blokhin, S.A., Sakharov, A.V., Nadtochy, A.M., Pauysov, A.S., Maximov, M.V., Ledentsov, N.N., Kovsh, A.R., Mikhrin, S.S., Lantratov, V.M., Mintairov, S.A., Kaluzhnyi, N.A., Shvarts, M.Z., 2009. AlGaAs/GaAs photovoltaic cells with an array of InGaAs QDs. Semiconductors 43, 514–518. URL: <https://doi.org/10.1134/s1063782609040204>, doi:10.1134/s1063782609040204.
- [4] Chubinishvili, Z., Kobaidze, R., Khutsishvili, E., Kekelidze, N., 2019. NUMERICAL CALCULATIONS OF IMPURITY SCATTERING MOBILITY IN SEMICONDUCTORS. European Chemical Bulletin 8, 19. URL: <https://doi.org/10.17628/ecb.2019.8.19-22>, doi:10.17628/ecb.2019.8.19-22.

- [5] Das, S., Mullick, S.S., Suganthan, P., 2016. Recent advances in differential evolution – an updated survey. Swarm and Evolutionary Computation 27, 1–30. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210650216000146>, doi:<https://doi.org/10.1016/j.swevo.2016.01.004>.
- [6] Errandonea, D., Segura, A., Manjón, F.J., Chevy, A., Machado, E., Tobias, G., Ordejón, P., Canadell, E., 2005. Crystal symmetry and pressure effects on the valence band structure of  $\gamma$ -InSe and  $\epsilon$ -gase: Transport measurements and electronic structure calculations. Phys. Rev. B 71, 125206. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.125206>, doi:10.1103/PhysRevB.71.125206.
- [7] Eshghi, H., Mootabian, M., 2011. A quantitative study on the effect of nitrogen concentration on two-dimensional electron gas (2deg) mobility in a dilute nitride GaAsN/AlGaAs heterostructure. Solid State Communications 151, 80–83. URL: <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2010.10.018>, doi:10.1016/j.ssc.2010.10.018.
- [8] Jiang, M.H., Wang, X.B., Xu, Q., Li, M., Niu, D.H., Sun, X.Q., Wang, F., Li, Z.Y., Zhang, D.M., 2018. High-speed electro-optic switch based on nonlinear polymer-clad waveguide incorporated with quasi-in-plane coplanar waveguide electrodes. Optical Materials 75, 26–30. URL: <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2017.10.020>, doi:10.1016/j.optmat.2017.10.020.
- [9] Kerski, J., Lochner, P., Ludwig, A., Wieck, A., Kurzmann, A., Lorke, A., Geller, M., 2021. Quantum sensor for nanoscale defect characterization. Phys. Rev. Applied 15, 024029. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.15.024029>, doi:10.1103/PhysRevApplied.15.024029.
- [10] Köpf, C., Kosina, H., Selberherr, S., 1997. Physical models for strained and relaxed GaInAs alloys: Band structure and low-field transport. Solid-State Electronics 41, 1139–1152. URL: [https://doi.org/10.1016/s0038-1101\(97\)00051-8](https://doi.org/10.1016/s0038-1101(97)00051-8), doi:10.1016/s0038-1101(97)00051-8.
- [11] Kuhn, K., Darling, R., 1992. Mobility of strained and dislocated in/sub x/ga/sub 1-x/as semiconductor material. IEEE Transactions on Electron Devices 39, 1288–1294. URL: <https://doi.org/10.1109/16.137306>, doi:10.1109/16.137306.
- [12] Lisesivdin, S.B., Acar, S., Kasap, M., Ozcelik, S., Gokden, S., Ozbay, E., 2007. Scattering analysis of 2deg carrier extracted by QMSA in undoped al0.25ga0.75n/gaN heterostructures. Semiconductor Science and Technology 22, 543–548. URL: <https://doi.org/10.1088/0268-1242/22/5/015>, doi:10.1088/0268-1242/22/5/015.
- [13] Lisesivdin, S.B., Yildiz, A., Balkan, N., Kasap, M., Ozcelik, S., Ozbay, E., 2010. Scattering analysis of two-dimensional electrons in AlGaIn/GaN with bulk related parameters extracted by simple parallel conduction extraction method. Journal of Applied Physics 108, 013712. URL: <https://doi.org/10.1063/1.3456008>, doi:10.1063/1.3456008.
- [14] Liu, A.Y., Herrick, R.W., Ueda, O., Petroff, P.M., Gossard, A.C., Bowers, J.E., 2015. Reliability of InAs/GaAs quantum dot lasers epitaxially grown on silicon. IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics 21, 690–697. URL: <https://doi.org/10.1109/jstqe.2015.2418226>, doi:10.1109/jstqe.2015.2418226.
- [15] Look, D.C., Lorange, D.K., Szelove, J.R., Stutz, C.E., Evans, K.R., Whitson, D.W., 1992. Alloy scattering inp-type AlxGa1-xAs. Journal of Applied Physics 71, 260–266. URL: <https://doi.org/10.1063/1.350752>, doi:10.1063/1.350752.
- [16] Manjón, F.J., Errandonea, D., Segura, A., Muñoz, V., Tobías, G., Ordejón, P., Canadell, E., 2001. Experimental and theoretical study of band structure of InSe andIn1-xGaxSe(x0.2)under high pressure: direct to indirect crossovers. Physical Review B 63. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.63.125330>, doi:10.1103/physrevb.63.125330.
- [17] Masu, K., Tokumitsu, E., Konagai, M., Takahashi, K., 1983. Alloy scattering potential inp-type ga1-xAlxAs. Journal of Applied Physics 54, 5785–5792. URL: <https://doi.org/10.1063/1.331804>, doi:10.1063/1.331804.
- [18] Mozo-Vargas, J., Mora-Ramos, M., Correa, J., Duque, C., 2021. Lattice strain influence on conduction band nonparabolicity in GaAs and InAs: Application to intraband optical absorption in InGaAs-GaAs

- asymmetric step quantum wells. *Materials Science in Semiconductor Processing* 123, 105490. URL: <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2020.105490>, doi:10.1016/j.mssp.2020.105490.
- [19] Nandi, S., Reddy, M.J., 2020. Comparative performance evaluation of self-adaptive differential evolution with GA, SCE and DE algorithms for the automatic calibration of a computationally intensive distributed hydrological model. *H2Open Journal* 3, 306–327. URL: <https://doi.org/10.2166/h2oj.2020.030>, doi:10.2166/h2oj.2020.030.
- [20] Oliveira, A.F., Rubinger, R.M., Monteiro, H., Rubinger, C.P.L., Ribeiro, G.M., de Oliveira, A.G., 2015. Main scattering mechanisms in InAs/GaAs multi-quantum-well: a new approach by the global optimization method. *Journal of Materials Science* 51, 1333–1343. URL: <https://doi.org/10.1007/s10853-015-9451-9>, doi:10.1007/s10853-015-9451-9.
- [21] Perera, A.U., Lao, Y.F., Wolde, S., Zhang, Y., Wang, T., Kim, J., Schuler-Sandy, T., Tian, Z.B., Krishna, S., 2015. InAs/GaAs quantum dot and dots-in-well infrared photodetectors based on p-type valence-band intersublevel transitions. *Infrared Physics & Technology* 70, 15–19. URL: <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2014.10.016>, doi:10.1016/j.infrared.2014.10.016.
- [22] Ramli, M.A., Boucekara, H., Alghamdi, A.S., 2018. Optimal sizing of PV/wind/diesel hybrid microgrid system using multi-objective self-adaptive differential evolution algorithm. *Renewable Energy* 121, 400–411. URL: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2018.01.058>, doi:10.1016/j.renene.2018.01.058.
- [23] Storn, R., Price, K., 1997. *Journal of Global Optimization* 11, 341–359. URL: <https://doi.org/10.1023/a:1008202821328>, doi:10.1023/a:1008202821328.
- [24] Sun, C.H., Chiu, C.C., Ho, M.H., Li, C.L., 2013. Comparison of dynamic differential evolution and self-adaptive dynamic differential evolution for buried metallic cylinder. *Research in Nondestructive Evaluation* 24, 35–50. URL: <https://doi.org/10.1080/09349847.2012.699607>, doi:10.1080/09349847.2012.699607.
- [25] Sze, S., Ng, K.K., 2006. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, Inc. URL: <https://doi.org/10.1002/0470068329>, doi:10.1002/0470068329.
- [26] Tran, D.Q., Islam, M.E., Higashimine, K., Akabori, M., 2021. Self-catalyst growth and characterization of wurtzite GaAs/InAs core/shell nanowires. *Journal of Crystal Growth* 564, 126126. URL: <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2021.126126>, doi:10.1016/j.jcrysgro.2021.126126.
- [27] Tsao, J.Y., 1993. *Materials Fundamentals of Molecular Beam Epitaxy*. Elsevier. URL: <https://doi.org/10.1016/c2009-0-22426-3>, doi:10.1016/c2009-0-22426-3.
- [28] Wolfe, C., Holonyak, N., Stillman, G., 1989. *Physical properties of semiconductors*. Solid state physical electronics series, Prentice Hall. URL: <http://books.google.com.br/books?id=EjBRAAAMAAJ>.
- [29] Wróbel, J., Umana-Membreno, G.A., Boguski, J., Sztenkiel, D., Michałowski, P.P., Martyniuk, P., Faraone, L., Wróbel, J., Rogalski, A., 2020. Locally-strain-induced heavy-hole-band splitting observed in mobility spectrum of p-type InAs grown on GaAs. *physica status solidi (RRL) – Rapid Research Letters* 14, 1900604. URL: <https://doi.org/10.1002/pssr.201900604>, doi:10.1002/pssr.201900604.
- [30] Xiao, G., Cao, Y., Qi, G., Wang, L., Liu, C., Ma, Z., Yang, X., Sui, Y., Zheng, W., Zou, B., 2017. Pressure effects on structure and optical properties in cesium lead bromide perovskite nanocrystals. *Journal of the American Chemical Society* 139, 10087–10094. URL: <https://doi.org/10.1021/jacs.7b05260>, doi:10.1021/jacs.7b05260.
- [31] Yahyaoui, M., Amdouni, S., Kallel, T., Saron, K., Boujdaria, K., 2021. The effect of strain and indium content on the optical properties of GaInAs/GaAs ternary alloys. *Solid State Sciences* 111, 106468. URL: <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2020.106468>, doi:10.1016/j.solidstatesciences.2020.106468.