

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

Adhimar Flávio Oliveira

Transporte eletrônico em amostras de InAs/GaAs e mecanismos de espalhamento. Uma nova abordagem de ajustes pelo método de otimização global.

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

Área de Concentração: Não Metais

Orientador: Prof. Dr. Rero Marques Rubinger

OUTUBRO DE 2015

ITAJUBÁ

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

Adhimar Flávio Oliveira

Transporte eletrônico em amostras de InAs/GaAs e mecanismos de espalhamento. Uma nova abordagem de ajustes pelo método de otimização global.

Tese aprovada por banca examinadora em 26 de Outubro de 2015, conferindo ao autor o título de **Doutor em Ciências em Materiais para Engenharia.**

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Rero Marques Rubinger (Orientador)

Prof. Dr. Hektor Sthenos Alves Monteiro (Co-orientador)

Prof^a. Dr^a Yara Galvão Gobato

Prof. Dr. Hugo Bonette de Carvalho

Prof. Dr. Alan Bendasoli Pavan

”É possível que certos fenômenos físicos nos escapem totalmente, talvez pela falta de meios apropriados de detecção. Todavia, se forem conhecidos, poderão fundar novos ramos da física, que parecerão tão estranhos, como por exemplo a física nuclear para um cientista do século passado. Pode-se afirmar, sem muito erro, que em física, como em todas as outras ciências, o que conhecemos é muito pouco, comparado ao que ignoramos.”

Louis De Broglie

*A minha esposa Vanêssa,
a minha filha Rafaela Maria,
aos meus pais Adhimar e Eva
e ao meu irmão Alexandre*

Agradecimentos

Ao finalizar esta tarefa, é fácil reconhecer a colaboração que sempre recebi, durante todo o tempo que dediquei à elaboração deste trabalho. Agradeço ao orientador, professor Rero pelo constante incentivo, sempre indicando a direção a ser tomada nos momentos de maior dificuldade. Pela liderança dedicação, perseverança e jovialidade contagiante.

Ao meu co-orientador Hektor pelas inúmeras dicas que contribuíram muito para meu desenvolvimento científico.

Ao suporte financeiro das agencias **CAPES**, **CNPq** e **FAPEMIG**.

Resumo

Neste trabalho foi realizada a caracterização elétrica de um conjunto de seis amostras semicondutoras de InAs/GaAs, crescidas pela técnica de epitaxia de feixe molecular (MBE). O crescimento de amostras por MBE, com materiais de diferentes parâmetros de rede, pode induzir a formação de estruturas tais como discordâncias, defeitos pontuais e pontos quânticos. As medidas elétricas foram realizadas através do efeito Hall pela técnica de van de Pauw, obtendo a mobilidade e a concentração de portadores em função da temperatura entre 10 K e 310 K. Os dados obtidos do experimento Hall foram submetidos a um processo de separação em dois canais de condução devido a presença de duas sub-bandas na heteroestrutura semicondutora. Este conjunto de dados foram analisados através do ajuste de um conjunto de mecanismos de espalhamento em duas dimensões utilizando o método de otimização global, chamado cross-entropy. Com isso, os principais mecanismos de espalhamento que limitam a mobilidade neste conjunto de amostras foram estimados de forma robusta juntamente com o conjunto de parâmetros físicos necessários para o ajuste. Como resultado foi possível verificar efeitos associados às tensões nas interfaces InAs/GaAs e seu relaxamento da camada ativa sobre os parâmetros de ajuste. Além disso, os ajustes também podem atuar como fonte de informação sobre as densidades de impurezas e estresse nas amostras. Assim, o Cross-entropy em conjunto com alterações nas características constitutivas podem ser utilizados para melhorar as características elétricas das amostras.

Palavras-chave

Estresse, Otimização global, Multi-poços quânticos e Caracterização elétrica.

Abstract

This work was carried out electrical characterization of a semiconductor set of six samples of InAs/GaAs grown by molecular beam epitaxy (MBE). The MBE samples growth with materials with different lattice parameters , can induce the formation of structures such as dislocations, point defects and quantum dots. The electrical measurements were performed using the Hall Effect by van de Pauw technique, obtaining mobility and carrier concentration as a function of temperature between 10 K and 310 K. The data obtained from the Hall experiment were subjected to a splitting process into two conduction channels due to the presence of two sub-bands in the semiconductor heterostructure. This data set was analyzed by fitting a set of scattering mechanisms in two dimensions using the global optimization method, called cross-entropy. Thus, the main scattering mechanisms that limits mobility in this set of samples were estimated robustly with the set of physical parameters required for the fittings. As a result it is observed effects associated to stresses in InAs/GaAs interfaces and its relaxation effects on the active layer and on the setting parameters. Furthermore, fittings may also act as a source of information on the impurity densities and stress in the samples. Thus, the cross-entropy in conjunction with changes in the constituent features can be used to improve the electrical characteristics of the samples.

Keywords

Stress, Global Optimization, multi-quantum well and electrical characterization

Conteúdo

Resumo	IV
Abstract	V
Lista de Figuras	VII
Lista de Tabela	XIV
Lista de Abreviaturas e Siglas	XV
Lista de Símbolos	XVII
Introdução	22
1 Transporte eletrônico	25
1.1 Mobilidade eletrônica	25
1.1.1 Massa efetiva	28
1.2 Mecanismos de Espalhamento em duas dimensões	29
1.2.1 Poço quântico aproximadamente triangular	30
1.2.2 Impurezas ionizadas	32
1.2.3 Discordâncias	33
1.2.4 Fônons óticos de modo polar	35
1.2.5 Fônons acústicos	35
1.2.6 Espalhamento por desordem em ligas	38
2 Materiais e métodos	40

2.1	Amostras	40
2.2	O efeito Hall pelo método de van der Pauw	43
2.3	Separação em dois canais de condução	47
3	O método de otimização global - <i>Cross Entropy</i>	49
3.1	O CE aplicado ao ajuste de mobilidades	50
3.2	<i>Bootstrap</i>	56
3.3	Validação do método	59
4	Resultados e discussões	61
	Conclusões e Perspectivas Futuras	85
	Bibliografia	87
	Anexo A - Estrutura das amostras	95
	Anexo B - Algoritmo de Otimização	98
	Anexo C - Publicação	109

Lista de Figuras

1.1	Ilustração do movimento térmico de um elétron individual	26
1.2	Ilustração dos espalhamentos sofridos por um portador em um semiconductor.	26
1.3	Ilustração do poço de potencial triangular $V(z) = e\varepsilon_z$, mostrando os níveis de energia e as funções de onda.	31
1.4	Ilustração da discordância do tipo <i>misfit</i> , que ocorre devido a incompatibilidade das constantes de rede.	34
1.5	Ilustração da discordância do tipo <i>threading</i> que atravessam a camada de InAs terminando na superfície.	34
1.6	Deslocamento de uma cadeia diatômica por fônons LA e TA no centro da zona de Brillouin.	36
1.7	Deslocamento de uma cadeia diatômica por fônons LA e TA na fronteira da zona de Brillouin.	37
2.1	Ilustração da disposição das camadas sobre o substrato de GaAs. Na cor azul, são representados o substrato e os espaçadores de GaAs e na cor cinza as coberturas de InAs.	41
2.2	MBE Riber 2300 da UFMG (ICEEx).	42
2.3	Configuração de uma barra Hall para medidas de resistividade.	44
2.4	Forma arbitrária de uma amostra indicando os contatos para a medida de resistividade através da técnica de van der Pauw.	45
2.5	Forma arbitrária de uma amostra indicando os contatos para a medida de efeito Hall através da técnica de van der Pauw.	46

2.6	Ilustração da geometria utilizadas para a medida de efeito Hall pela técnica de van der Pauw neste trabalho. Na Figura l_s é o comprimento da amostra e l_c o comprimento do contato.	46
3.1	Gráficos da evolução dos parâmetros de ajustes a) massa efetiva m^* e b) Largura do poço quântico Z_0 em função do número de iterações do CE. . .	53
3.2	Gráficos da evolução dos parâmetros de ajustes a) Densidade de impurezas no poço de potencial 2DEG devido às impurezas remotas e/ou na interface N_{ic} e b) Densidade de discordâncias N_{dis} em função do número de iterações do CE.	54
3.3	Gráfico da evolução do parâmetro de ajuste Fração molar da liga x em função do número de iterações do CE.	55
3.4	Distribuição das soluções do parâmetro fração molar, x , em função da massa efetiva, m^* , devido a utilização do <i>bootstrap</i> , para a amostra A1.	57
3.5	Distribuição das soluções do parâmetro tamanho do poço bidimensional, Z_0 , em função da massa efetiva, m^* , devido a utilização do <i>bootstrap</i> , para a amostra A1.	57
3.6	Distribuição das soluções do parâmetro densidade de impurezas no poço de potencial bidimensional, N_{ic} , em função da massa efetiva, m^* , devido a utilização do <i>bootstrap</i> , para a amostra A1.	58
3.7	Distribuição das soluções do parâmetro densidade de cargas nas discordâncias, N_{dis} , em função da massa efetiva, m^* , devido a utilização do <i>bootstrap</i> , para a amostra A1.	58

3.8	Ajuste realizado em um conjunto de dados sintéticos para avaliar a robustez do método. Os dados sintéticos são representados por pontos pretos e, a linha continua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	59
4.1	Medidas Hall obtidos pelo método de van der Pauw da mobilidade em função da temperatura das amostras A1, A2, A3, A4, A5 e A6, com os respectivos simbolos indicados. Para uma melhor visualização, o gráfico é mostrado na escala logarítmica.	62
4.2	Concentração de portadores, n , como função da temperatura, T , obtida através das medidas Hall, pelo método de van der Pauw, para amostras A1, A2, A3, A4, A5 e A6. Os Símbolos são indicados na legenda da figura.	62
4.3	Resultados das curvas mobilidade após a separação de canais para o canal 1, μ_1 . Como na Figura 4.1, os símbolos correspondentes às amostras estão indicados no gráfico. Para uma melhor visualização, o gráfico é mostrado na escala logarítmica.	63
4.4	Resultados da concentração de portadores após a separação de canais para o canal 1, n_1 . Os símbolos correspondentes as amostras estão indicados na figura.	64
4.5	Resultados da mobilidade após a separação de canais para o canal 2, μ_2 . Como nas figuras anteriores, os símbolos correspondentes as amostras estão indicados no gráfico. Para uma melhor visualização, o gráfico é mostrado na escala logarítmica.	64
4.6	Resultados da concentração de portadores após a separação de canais para o canal 2, n_2 . Os símbolos correspondentes as amostras estão indicados na figura.	65

4.7	Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A1, no canal 1 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha continua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	66
4.8	Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A1, no canal 2 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha continua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	67
4.9	Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A2, no canal 1 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha continua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	69
4.10	Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A2, no canal 2 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha continua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	69

4.11	Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A3, no canal 1 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha continua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	71
4.12	Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A3, no canal 2 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha continua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	71
4.13	Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A4, no canal 1 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha continua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	72
4.14	Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A4, no canal 2 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha continua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	73

4.15	Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A5, no canal 1 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	75
4.16	Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A5, no canal 2 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	75
4.17	Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A6, no canal 1 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	76
4.18	Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A6, no canal 2 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.	77

4.19	Massa efetiva obtida no ajuste das amostras de InAs/GaAs utilizando o método de otimização global - CE, os símbolos utilizados para os canais 1 e 2 são indicados na Figura.	79
4.20	Fração molar da liga, x , obtida no ajuste das amostras de InAs/GaAs utilizando o método de otimização global - CE, os símbolos utilizados para os canais 1 e 2 são indicados na Figura.	80
4.21	Largura do poço quântico, Z_0 , obtida no ajuste das amostras de InAs/GaAs utilizando o método de otimização global - CE, os símbolos utilizados para os canais 1 e 2 são indicados na Figura.	81
4.22	Densidade de impurezas no poço de potencial 2DEG devido às impurezas remotas e/ou na interface, N_{ic} , obtida no ajuste das amostras de InAs/GaAs utilizando o método de otimização global - CE, os símbolos utilizados para os canais 1 e 2 são indicados na Figura.	81
4.23	Densidade de discordâncias, N_{dis} , obtida no ajuste das amostras de InAs/GaAs utilizando o método de otimização global - CE, os símbolos utilizados para os canais 1 e 2 são indicados na Figura.	82
A1	Mapa de crescimento da amostra A1	95
A2	Mapa de crescimento da amostra A2	95
A3	Mapa de crescimento da amostra A3	96
A4	Mapa de crescimento da amostra A4	96
A5	Mapa de crescimento da amostra A5	97
A6	Mapa de crescimento da amostra A6	97

Lista de Tabelas

2.1	Parâmetros de crescimento das amostras semicondutoras de InAs/GaAs. . .	41
3.1	Espaço de Parâmetros utilizado para os ajustes	51
3.2	Parâmetros utilizados para a geração de uma amostra sintética para a validação do método de ajuste das mobilidades eletrônicas.	59
3.3	Principais parâmetros obtidos no ajuste da mobilidade em função da temperatura no conjunto de dados sintéticos, utilizando o método de otimização CE.	60
4.1	Principais parâmetros obtidos no ajuste da mobilidade em função da temperatura no canal 1, utilizando o método de otimização CE.	82
4.2	Principais parâmetros obtidos no ajuste da mobilidade em função da temperatura no canal 2, utilizando o método de otimização CE.	83

Lista de Abreviaturas e Siglas

MBE: Epitaxia de feixe molecular (Do inglês: *Molecular Beam Epitaxy*)

QD: Pontos quânticos (Do inglês: *Quantum Dots*)

InAs: Arseneto de Índio

GaAs: Arseneto de Gálio

CE: *Cross-entropy*

MRU: Movimento retilíneo uniforme

ML: Monocamadas (Do inglês: *Monolayer*)

RHEED: *Reflection High-Energy Electron Diffraction*

2DEG: Gás de elétrons Bidimensional (Do inglês: *Bidimensional electron Gas*)

Lista de Símbolos

\vec{v}_T Velocidade térmica

$\vec{\epsilon}$ Campo elétrico

m^* Massa efetiva

τ Tempo livre médio

I Corrente elétrica

n Densidade de portadores

v_d Velocidade de deriva

\vec{J} Vetor densidade de corrente

σ Condutividade

μ Mobilidade eletrônica

ρ Resistividade

n Concentração de portadores

E Energia

\hbar Constante de planck $h/2\pi$

$m_{\alpha,\beta}$ Tensor massa efetiva

λ_{deB} Comprimento de onda de de Broglie do elétron

N_{ic} Densidade de impurezas no poço de potencial 2DEG devido às impurezas remotas
e/ou na interface

ϵ_s Constante dielétrica em baixa frequência

S_0 Constante de blindagem

T Temperatura

k_B Constante de Boltzmann

N_{dis} Densidade de cargas nas discordâncias

a_B raio efetivo de Bohr

θ_{po} Temperatura do fônon ótico

Z_0 Largura do poço quântico

ϵ_∞ Constante dielétrica em altas frequências

u_t Velocidade transversal dos fônons acústicos

u_l Velocidade longitudinal dos fônons acústicos

E_d Constante do potencial de deformação

δ Densidade do cristal

h_{14} Constante piezoelétrica

x Fração molar da liga

Ω_0 Volume ocupado por uma átomo na liga

ΔV_{al} Diferença de potencial entre os componentes da liga

\vec{B} Campo magnético

R_H Coeficiente Hall

r_H Fator Hall

Y Constante de elasticidade

ϵ Tensão na liga

Introdução

Materiais semicondutores compostos do grupo II-VI e do grupo III-V da tabela periódica, têm sido usados atualmente na fabricação de dispositivos opticamente ativos como diodos emissores e diodos lasers no espectro do infravermelho [1, 2]. Em particular, investigações focando o crescimento de amostras de InAs/GaAs, para a construção de dispositivos eletrônicos de alta potência, alta frequência e contendo poços quânticos (*Quantum Dots* QD) na camada de InAs tem recebido uma atenção considerável [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]. Principalmente devido a sua ampla aplicação na construção de dispositivos de baixa dimensionalidade, tais como células solares de QD [11, 12], dispositivos, incluindo lasers, diodos de alta frequência e moduladores fotônicos [13], além de guias de onda ópticos [14].

Com os avanços nas técnicas de crescimento de materiais semicondutores, como por Epitaxia de Feixe Molecular (*Molecular Beam Epitaxy* MBE) tem oferecido a possibilidade de obtermos novas estruturas de baixa dimensionalidade [15], tais como heteroestruturas. As heteroestruturas oferecem novas opções para os projetistas de dispositivos semicondutores, uma vez que permite o controle dos níveis de impurezas e as posições das bandas de valência e de condução. A compreensão dos fenômenos físicos relacionados com este tipo de estrutura é importante para a fabricação e otimização de novos dispositivos, tais como os de optoeletrônica e portas quânticas para experimentos de computação quântica. As heteroestruturas semicondutoras são camadas de dois ou mais semicondutores diferentes depositadas de forma coerente para formar uma única estrutura cristalina [16].

Nos últimos anos, tem havido um interesse crescente nas propriedades elétricas de heteroestruturas baseadas em canais de $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$. Estas heteroestruturas mostram melhor desempenho elétrico do que aquelas baseadas em canais de GaAs [17]. Nos canais de InGaAs os elétrons estão confinados devido a presença de um poço quântico de InGaAs

entre as camadas de InAs e GaAs. Isso resulta em um maior confinamento e uma concentração elevada de portadores. No entanto, nos canais formados por ligas de InGaAs, a mobilidade eletrônica é limitada devido a espalhamentos associados as impurezas, discordâncias, fônons e a desordens na liga.

Neste trabalho foram utilizadas seis amostras semicondutoras contendo multicamadas de InAs/GaAs, que foram crescidas através da técnica de MBE. O crescimento das amostras ocorreram sobre substratos de GaAs semi-isolantes. Durante o crescimento de amostras com multicamadas pode existir uma incompatibilidade de rede entre os semicondutores utilizados. Tal incompatibilidade pode acarretar em vários defeitos na rede cristalina, tais como o surgimento de defeitos pontuais, discordâncias na amostra, e ou a autogeração de pontos quânticos. Além disso, é possível que após a formação de tais defeitos ainda exista uma tensão residual devido a incompatibilidade nas redes dos semicondutores utilizados para o crescimento do material [18, 19, 20]. A presença de tensões na rede acarreta na redução do transporte elétrico das amostras, como será discutido neste trabalho.

A fim de melhorar as características eletrônicas deste tipo de amostras semicondutoras e ampliar a gama de aplicações para estes materiais é importante investigar tais efeitos. Assim, este estudo dedicou-se a análise dos efeitos causados pelas tensões nestas amostras identificados através dos efeitos nos mecanismos de espalhamento de portadores de carga e sua dependência com as características constituintes, tais como largura do poço quântico, espessura e outras características de crescimento das amostras.

Este trabalho tem como objetivo investigar um conjunto de amostras semicondutoras de InAs/GaAs, contendo QD no formato piramidal na camada de InAs [21, 22]. Apresentamos os resultados do uso do método de otimização global nomeado Cross-entropy para identificar os principais mecanismos de espalhamento presentes nas amostras de InAs/GaAs e os parâmetros fundamentais utilizados para o ajuste do modelo. No Capítulo 1 deste trabalho é feita uma revisão sobre transporte eletrônico em um gás bidimensional de elétrons através do modelo de Drude. Além disso, é apresentada uma breve introdução sobre o que é a massa efetiva em um semicondutor e os principais mecanismos de espalhamento bidimensionais presentes em amostras de InAs/GaAs.

O Capítulo 2 é dedicado à metodologia deste trabalho. Inicialmente, é apresentada a forma como as amostras foram crescidas, em seguida é apresentada a técnica que foi utilizada para realização das medidas de mobilidade e concentração de portadores das amostras, onde se verificou que as amostras apresentam maior valor de mobilidade em temperaturas próximas a 80 K e o menor em baixas temperaturas. Sendo que, em aproximadamente 80 K as amostras apresentam valores entre $1100 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ e $2700 \text{ cm}^2/\text{V.s}$. A concentração de portadores varia entre as amostras e com a temperatura, possuindo uma ordem de grandeza de 10^9 cm^{-2} .

Em seguida, é mostrado o processo de separação dos dados em dois canais de condução devido a presença de duas sub-bandas na heteroestrutura semicondutora. Finalmente, no Capítulo 3 é apresentado o método de otimização global utilizado para ajustar os dados e determinar os parâmetros físicos de ajuste com suas devidas incertezas. Tal método, que recebe o nome de *Cross-entropy* (CE), permitiu trabalhar de forma robusta com o ajuste de vários parâmetros simultaneamente e com a utilização de várias variáveis.

Por fim, são apresentados os resultados obtidos a partir do CE e a discussão destes. Os principais resultados são a identificação de uma massa efetiva elevada causada pela alta tensão não relaxada, como discutido no trabalho, que é a principal causa da baixa mobilidade em temperatura ambiente. Os resultados deste trabalho foram aceitos para publicação em Oliveira *et al.* [23].

Capítulo 1

Transporte eletrônico

1.1 Mobilidade eletrônica

Por volta de 1900 Drude criou uma teoria para explicar a condução elétrica e térmica em metais. Na teoria de Drude [24] os elétrons livres em um metal podem ser considerados como um gás de elétrons, permitindo a utilização da teoria cinética dos gases para desenvolver um modelo de condução difusivo. O modelo de Drude para os metais considera que os átomos são formados por núcleos imóveis e com carga positiva, ao redor do qual estão os elétrons fortemente ligados ao núcleo e o gás de elétrons formado pelos elétrons de valência estão desacoplados, ou seja, livres para se mover ao longo do material, sendo estes denominados elétrons de condução. Em seu modelo, Drude fez as seguintes considerações:

1. Na ausência de campo elétrico externo, os elétrons se movem em movimento retilíneo uniforme (MRU), entre as colisões;
2. As colisões mudam abruptamente a velocidade dos elétrons;
3. O elétron experimenta uma colisão com probabilidade por unidade de tempo inversamente proporcional ao tempo. Ou seja, em média, o elétron viaja um tempo antes de colidir, este tempo também é conhecido como tempo livre médio;
4. Os elétrons alcançam o equilíbrio térmico através das colisões.

Para um semiconductor, na ausência de campo elétrico, os elétrons se movem rapidamente em todas as direções. O movimento térmico de um elétron individual pode ser visualizado como uma sucessão de espalhamentos aleatórios por colisões com átomos da estrutura, impurezas e outros centros de espalhamentos, como ilustrado na Figura 1.1 [25]. Assim a probabilidade de os elétrons se moverem em uma direção é igual a qualquer outra fazendo com que a média do vetor velocidade térmica $\langle \vec{v}_T \rangle$, seja zero, e como esperado não há densidade de corrente líquida.

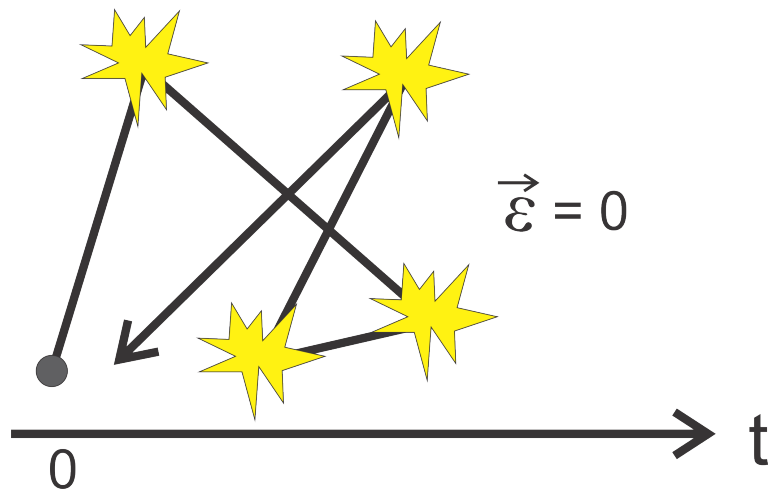


Figura 1.1: Ilustração do movimento térmico de um elétron individual

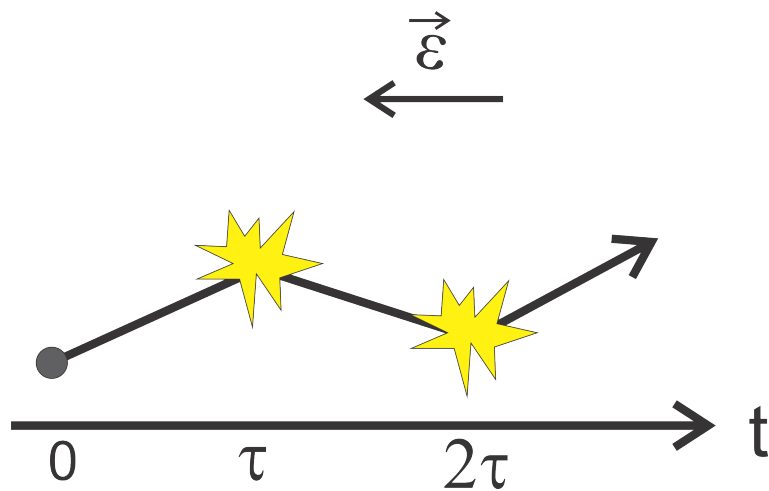


Figura 1.2: Ilustração dos espalhamentos sofridos por um portador em um semiconductor.

Quando um pequeno campo elétrico, $\vec{\epsilon}$, é aplicado sobre a amostra semicondutora, cada elétron irá experimentar uma força $-q\vec{\epsilon}$ devido ao campo e ser acelerada em sentido oposto ao campo, durante o intervalo entre duas colisões. Portanto, uma componente de

velocidade adicional será sobreposta ao movimento térmico dos elétrons. Esta componente adicional é a velocidade de deriva (Figura 1.2):

$$v_d = a\tau = \frac{F}{m^*}\tau = \frac{-e\varepsilon}{m^*}\tau \quad (1.1)$$

em que m^* é a massa efetiva do portador, que será explicada na Seção 1.1.1.

Sendo I a corrente que passa pelo material que apresenta uma densidade volumétrica de carga n , temos

$$I = n(-e)Av_d \quad (1.2)$$

Com isso, o módulo do vetor densidade de corrente é

$$|\vec{J}| = \frac{I}{A} = nev_d \quad (1.3)$$

ou ainda,

$$\vec{J} = \frac{ne^2\tau}{m^*}\vec{\varepsilon} \quad (1.4)$$

em que a condutividade elétrica é

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*} = ne\mu \quad (1.5)$$

onde

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*} \quad (1.6)$$

é a mobilidade eletrônica.

Apesar do modelo de Drude relacionar inúmeras propriedades de condução, ele possui deficiências importantes. Uma delas é a previsão de um livre caminho médio da ordem da distância interatômica, consistente com a hipótese de que os elétrons se chocam com íons imóveis. Mais tarde descobriu-se que os elétrons são capazes de viajar distâncias muito maiores no cristal, pois não se chocam com os íons da rede, sendo espalhados na realidade por impurezas e defeitos.

Em geral, os eventos de espalhamento são independentes permitindo o uso da regra de Matthiessen [26] para combiná-los, a fim de definir melhor cenário para os dados experimentais da montagem. A regra de Matthiessen é apresentada em função das resistividades da forma

$$\rho = \rho_T + \rho_i + \rho_d \quad (1.7)$$

em que ρ_T , ρ_i e ρ_d , são resistividades devido a fônons, impurezas e ou ligas e devido a deformações, tais como discordâncias. Sendo a condutividade $\sigma = 1/\rho$ e $\sigma = nq\mu$, podemos escrever a regra de Matthiessen em função das mobilidades.

$$\mu^{-1} = \sum \mu_i^{-1} \quad (1.8)$$

1.1.1 Massa efetiva

Para este trabalho um dos principais parâmetros a serem determinados nos ajustes utilizando os modelos de espalhamento e o método de otimização global nos dados obtidos pela técnica de van der Pauw no experimento Hall é a massa efetiva. Por isso, nesta seção será dada uma breve explicação teórica deste parâmetro.

Em um material semiconductor o elétron é descrito como um pacote de onda com velocidade $v_g = \partial\omega/\partial k$. Sendo a energia do elétron dada por $E = \hbar\omega$, assim,

$$\frac{\partial E}{\partial k} = \hbar v_g \quad (1.9)$$

Se o elétron for submetido a um campo elétrico $\vec{\varepsilon}$, provocando o surgimento de uma força \vec{F} , sua energia irá variar dE durante um percurso dx , sendo $dE = Fdx$. Da Equação 1.9 temos

$$Fdx = \hbar v_g dk. \quad (1.10)$$

Sendo $dx = v_g dt$, encontramos

$$F = \hbar \frac{dk}{dt} \quad (1.11)$$

Lembrando que $\hbar k$ é o momento do elétron. Na Equação 1.11, temos que a rede

não afeta a forma da equação da variação do momento. O que ocorre é a alteração da dependência da energia com o momento, que corresponde a mudar a massa do elétron [27]. Expressando a aceleração do elétron em função da energia e do módulo do vetor de onda na Equação 1.9, obtém-se

$$a = \frac{dv_g}{dt} = \hbar^{-1} \frac{\partial^2 E}{\partial k \partial t} = \hbar^{-1} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \frac{dk}{dt} \quad (1.12)$$

Relacionando as Equações 1.12 e 1.11, obtém-se

$$F = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2} a \quad (1.13)$$

Lembrado que na segunda lei de Newton, tem-se que sob a ação de uma força externa o elétron no cristal possui uma massa efetiva

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2} \quad (1.14)$$

A Equação 1.14 foi obtida supondo o módulo do vetor de onda \vec{k} , sendo que ela também depende da direção de \vec{k} . De forma geral a massa não é um escalar, e sim uma grandeza tensorial dada por

$$m_{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_\alpha \partial k_\beta}. \quad (1.15)$$

1.2 Mecanismos de Espalhamento em duas dimensões

Em um semicondutor o espalhamento de portadores é geralmente modelado por uma Hamiltoniana contendo um potencial de espalhamento que age de acordo com os portadores de carga ao interagir com uma impureza, ou um defeito de estrutura, ou uma vibração estrutural como fônons, magnon, polarons, polaritons entre outros [28, 29]. A perturbação contendo o potencial é então integrada com a função de onda de Bloch, ou seja, função de onda para um portador em um ambiente de repetição periódica, mais comumente um

elétron em um cristal, a fim de definir tempos de espalhamento. A mobilidade (μ) é definida pelo tempo de espalhamento (τ) e a massa efetiva dos portadores de carga (m^*) por $\mu = e\tau/m^*$, como indicado na Seção 1.1.

Usando a regra de Matthiessen e o método de otimização global CE aplicado aos diferentes mecanismos de espalhamento é possível escolher dentre eles os mais relevantes para as amostras investigadas. Agora, procede-se à descrição da mobilidade definida pelo espalhamento por tipos distintos de eventos considerados para este trabalho. Todas as amostras utilizadas no presente trabalho contêm pelo menos um poço quântico aproximadamente triangular na interface InAs/GaAs. Portanto, todos os mecanismos de espalhamento considerados para um gás bidimensional de elétrons (*Bidimensional Electron Gas* 2DEG) [30].

Os efeitos quânticos dominam o transporte eletrônico em poços quânticos e outros sistemas de baixa dimensionalidade, tais como fios quânticos e pontos quânticos, quando o comprimento de onda de de Broglie do elétron, λ_{deB} , excede as dimensões da estrutura de comprimento característico L_Z ($\lambda_{deB} > L_Z$) [28]

$$\lambda_{deB} = \frac{h}{\sqrt{2m^*E}} \quad (1.16)$$

onde E é a energia cinética do elétron. Por exemplo, em $T = 300$ K um elétron possui uma energia $E = 0,026$ eV, e portanto, um comprimento λ_{deB} de aproximadamente 300 Å.

Uma importante e nova classe de materiais tem surgido nos últimos anos em que os elétrons são confinados devido a camadas com espessuras da ordem de 100 Å. Nesses casos, os elétrons são quantizados ao longo de uma dimensão e se movem livremente nas duas dimensões restantes.

1.2.1 Poço quântico aproximadamente triangular

O poço triangular esboçado na Figura 1.3 dá uma descrição simples de um poço bidimensional na interface de uma heterojunção. Neste, existe uma barreira infinita para $z < 0$ com um potencial linear $V(z) = e\varepsilon_z z$ para $z > 0$, ou seja, uma carga e num campo elétrico $\vec{\varepsilon}$.

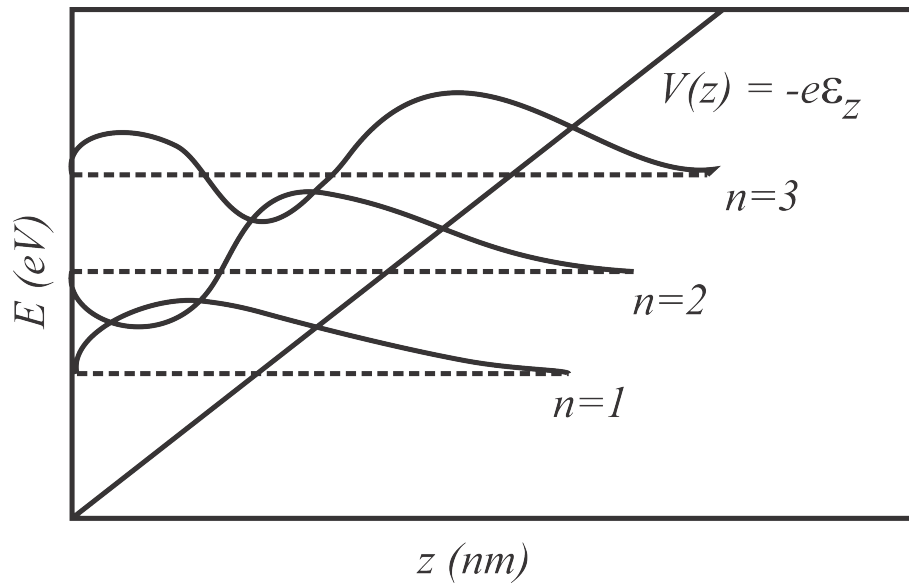


Figura 1.3: Ilustração do poço de potencial triangular $V(z) = e\mathcal{E}_z$, mostrando os níveis de energia e as funções de onda.

A equação de Schrödinger para este poço é

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + e\varepsilon z \right] \psi(z) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi(z) \quad (1.17)$$

sujeita as condições de contorno $\psi(z=0) = 0$ imposta pela barreira infinita. Em uma manipulação semelhante ao do oscilador harmônico as escalas de distância e energia são

$$z_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2me\varepsilon} \right)^{1/3}, \quad (1.18)$$

$$E_0 = \left[\frac{(e\varepsilon\hbar)^2}{2m} \right]^{1/3}. \quad (1.19)$$

As energias permitidas são

$$E_n = c_n \left[\frac{(e\varepsilon\hbar)^2}{2m} \right]^{1/3}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.20)$$

onde $c_n \sim \left[\frac{3}{2}\pi \left(n - \frac{1}{4} \right) \right]^{2/3}$

$$\phi_n = Ai \left(\frac{e\varepsilon z - E}{E_0} \right) \quad (1.21)$$

em que

$$Ai(z) \sim \pi^{-1/2} z^{-1/4} \exp \left(-\frac{2}{3} z^{3/2} \right), \quad (1.22)$$

$$Ai(-z) \sim \frac{1}{2} \pi^{-1/2} z^{-1/4} \cos \left(\frac{2}{3} z^{3/2} - \frac{1}{4} \pi \right), \quad (1.23)$$

1.2.2 Impurezas ionizadas

O espalhamento por impurezas ionizadas é dominado por interações elétricas entre os portadores. Devido ao fato de o canal 2DEG ser formado na hetero-interface do InAs/GaAs, ocorre espalhamento devido a impurezas de fundo, ou seja, impurezas não necessariamente localizadas no canal 2DEG, bem como devido à carga na interface. A relação para o limite teórico de mobilidade para impurezas é [31, 32, 33]

$$\mu_{ic} = \frac{4\pi\epsilon_s^2 \hbar^3 k^3}{e^3 m^{*2} N_{ic} I_B} \quad (1.24)$$

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

$$I_B(\beta) = \int_0^\pi \frac{\text{sen}^2\theta}{(\text{sen}\theta + \beta)^2} d\theta \quad (1.25)$$

onde $\beta = S_0/2k$ e S_0 é a constante de blindagem devido a impurezas e outros centros de carga coulombianas para o caso não degenerado, que é definida como [34]

$$S_0 = \frac{e^2 n}{2\epsilon_s k_B T} \quad (1.26)$$

com n sendo a densidade de portadores 2DEG, k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura na rede.

1.2.3 Discordâncias

Existe um grande interesse no uso de materiais cristalinos crescidos com incompatibilidade nas posições atômicas para dispositivos eletrônicos [35]. Se uma camada espessa de material cristalino é crescida sobre outra camada espessa de material cristalino com uma constante de rede diferente, então a energia de deformação resultante do desfaseamento na posição atômica irá gerar tensões na rede que podem ser relaxadas na forma de QD e/ou Discordâncias. Se nenhuma tensão permanece no filme após a formação da discordância, a camada é denominada totalmente relaxada. No entanto, se uma camada muito fina cristalina é crescida epitaxialmente sobre topo de uma camada cristalina espessa com constante de rede diferente, então os átomos na camada fina serão forçados a adotar o espaçamento da camada mais espessa, permanecendo uma tensão na rede. Para as amostras investigadas neste trabalho ocorrem, durante o relaxamento das tensões na rede discordâncias do tipo *misfit* [36] devido o desajuste da rede cristalina como ilustrado na Figura 1.4, e *threading*, que atravessam a camada de InAs e termina na superfície [37, 38], ilustrada na Figura 1.5.

A mobilidade devido ao espalhamento por discordâncias é definida por [32, 30]

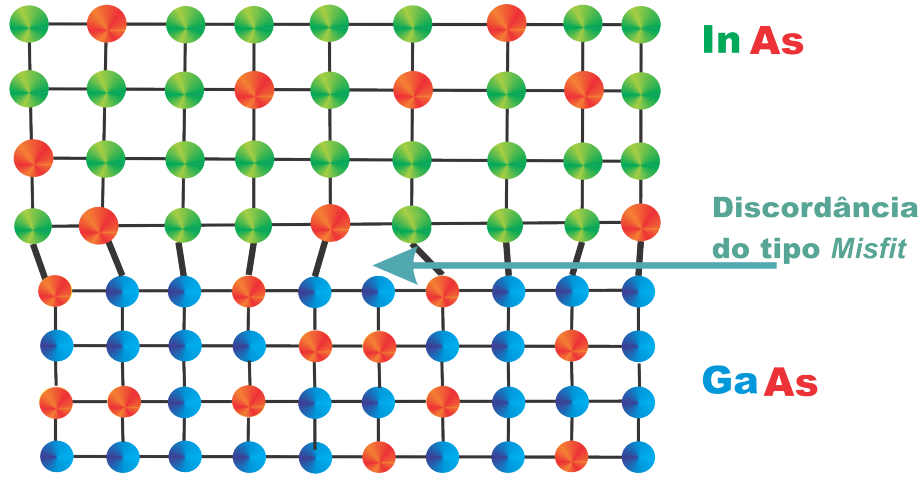


Figura 1.4: Ilustração da discordância do tipo *misfit*, que ocorre devido a incompatibilidade das constantes de rede.

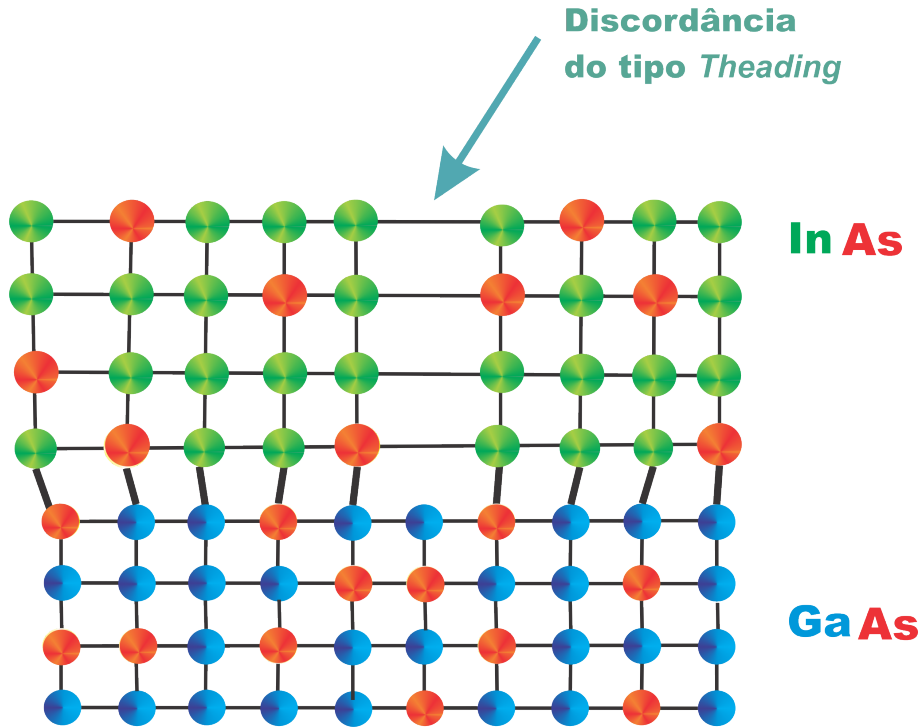


Figura 1.5: Ilustração da discordância do tipo *threading* que atravessam a camada de InAs terminando na superfície.

$$\mu_{dis} = \frac{4\pi\epsilon_s^2 k^4 a^2}{e^3 m^{*2} N_{dis} I_t} \quad (1.27)$$

em que N_{dis} é a densidade de cargas nas discordâncias, a é a constante de rede e I_t é

$$I_t = \frac{1}{2}\xi^2 \int_0^1 \frac{1}{(1 + \xi^2 u^2)\sqrt{1 - u^2}} du, \quad (1.28)$$

onde ξ é um parâmetro adimensional dado por $\xi = ka_B$, com $a_B = \frac{4\pi\epsilon_s \hbar^2}{e^2 m^*}$ sendo o raio

efetivo de Bohr do material e u está relacionada com interação elétron-impureza e é uma grandeza adimensional [32, 33].

1.2.4 Fônons óticos de modo polar

O espalhamento devido a fônons óticos de modo polar ocorre devido ao campo elétrico causado pela polarização de íons na célula primitiva induzindo vibrações na rede de modo ótico. Esta polarização é causada principalmente pela componente longitudinal e é equivalente a polarização iônica. A mobilidade devido ao espalhamento por fônons óticos de modo polar é dada por [39, 40]

$$\mu_{po} = \frac{4\pi\epsilon_p\hbar^3}{e\theta_{po}k_B m^{*2} Z_0} \left[e^{\frac{\theta_{po}}{T}} - 1 \right] \quad (1.29)$$

em que θ_{po} é a temperatura do fônon ótico, Z_0 é a largura do poço quântico e $\epsilon_p^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_s^{-1}$; aqui ϵ_∞ é a constante dielétrica em altas frequências.

1.2.5 Fônons acústicos

Fônons acústicos podem espalhar portadores em um cristal por dois processos diferentes e independentes. Estes são chamados de espalhamento por potencial de deformação e espalhamento piezoelétrico. Estes mecanismos de espalhamento podem ser examinados, qualitativamente, através das Figuras 1.6 e 1.7, onde os deslocamento, $u(r)$, de uma cadeia de átomos de seus locais nas redes Bravais são mostrados para fônons acústicos longitudinais (LA) e transversais (TA) no centro da zona de Brillouin (Figura 1.6) e na fronteira da zona de Brillouin (Figure 1.7).

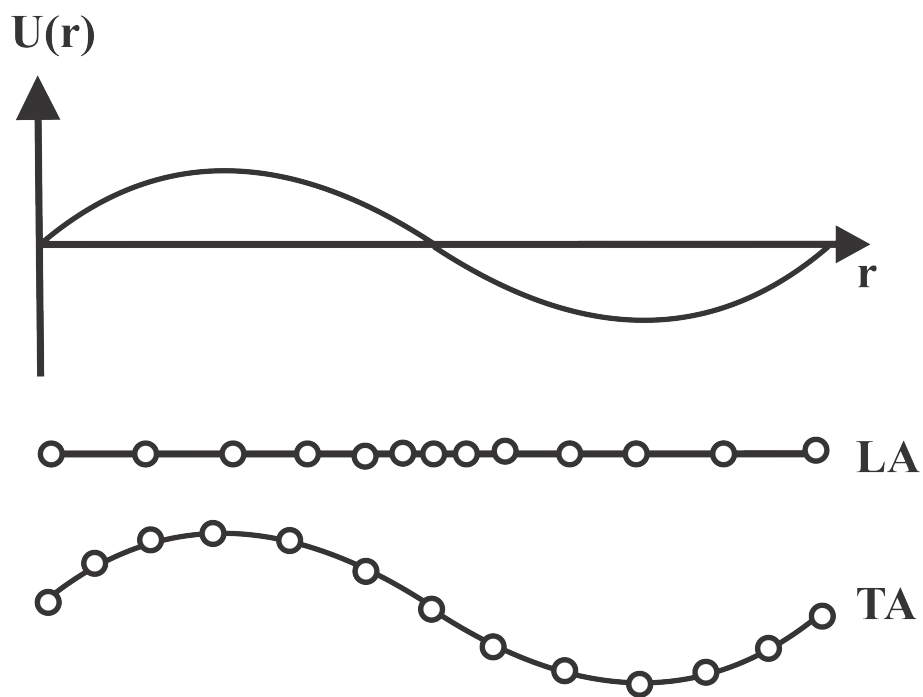


Figura 1.6: Deslocamento de uma cadeia diatômica por fônons LA e TA no centro da zona de Brillouin.

Como pode ser visto, a distância entre átomos adjacentes é fortemente afetada por fônons LA, e pouco afetada por fônons TA. Os fônons LA vão produzir uma modulação das bandas de condução e valência. Esta modulação no espaço e no tempo vão perturbar a periodicidade do potencial do cristal e produzir o conhecido espalhamento por potencial de deformação para buracos e elétrons.

Para alguns semicondutores com dois ou mais átomos por célula unitária, não há inversão de simetria no cristal. Nestes cristais a tensão, causada predominantemente por fônons LA, polariza os íons e produz campos elétricos internos que variam no tempo e no espaço. O espalhamento de portadores causado por estes campos elétricos é chamado espalhamento piezoelétrico.

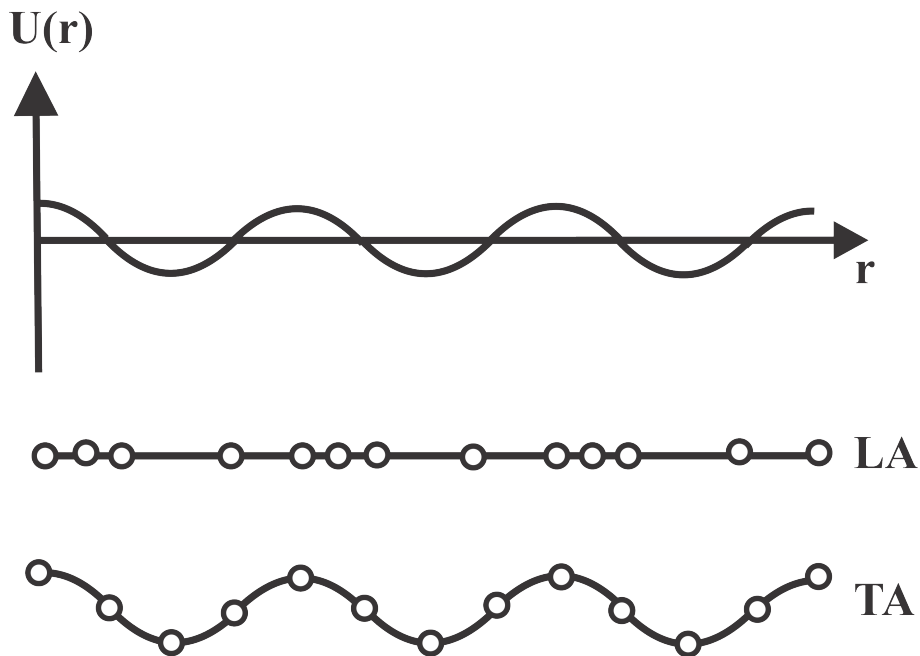


Figura 1.7: Deslocamento de uma cadeia diatômica por fônons LA e TA na fronteira da zona de Brillouin.

Fônons acústicos por potencial de deformação

Os fônons acústicos devido ao potencial de deformação mudam as posições atômicas da célula primitiva do cristal causando uma mudança na periodicidade da estrutura, o que, por sua vez, espalha os portadores de carga. Para o estudo da mobilidade devido ao potencial de deformação por fônons acústicos foi utilizada a Equação 1.30 [41]

$$\mu_{dp} = \frac{e\hbar^3 \delta u_l^2 Z_0}{m^{*2} E_d^2 k_B T} \quad (1.30)$$

em que u_l é a velocidade longitudinal dos fônons acústicos, E_d é a constante do potencial de deformação e δ é a densidade do cristal.

Fônons acústicos por espalhamento piezométrico

O espalhamento devido a fônons acústicos piezométricos, que ocorre em cristais sem simetria de inversão, produz polarização e a geração de campos elétricos internos que variam no tempo e no espaço. A mobilidade devido aos fônons acústicos piezométricos é dada por [41]

$$\mu_{pz} = \frac{\pi k E_d^2}{Z_0 e^2 h_{14}^2} \left[\frac{9}{32} + \frac{13}{32} \left(\frac{u_l}{u_t} \right)^2 \frac{I(u_t)}{I(u_l)} \right]^{-1} \mu_{dp} \quad (1.31)$$

em que h_{14} é a constante piezométrica, u_t é a velocidade dos fônons acústicos transversais e

$$I(u_t) = \left[\left(\frac{8\hbar u_t k}{3\pi k_B T} \right)^2 + 1 \right]^{1/2} \quad (1.32)$$

$$I(u_l) = \left[\left(\frac{8\hbar u_l k}{3\pi k_B T} \right)^2 + 1 \right]^{1/2} \quad (1.33)$$

Os espalhamentos por potencial de deformação e piezométricos possuem uma defasagem de 90° , o que faz com que os dois mecanismos de espalhamento sejam independentes [29].

1.2.6 Espalhamento por desordem em ligas

Em uma liga [31, 42, 40], composta por dois componentes A (*e.g.* InAs) e B (*e.g.* GaAs), onde o potencial A é V_A e o potencial B é V_B , o espalhamento devido a desordem na banda de condução é chamado espalhamento por ligas. A mobilidade devido a liga é dada por [31, 43]

$$\mu_{al} = \frac{16}{3b} \frac{e\hbar^3}{x(1-x)m^{*2}\Omega_0\Delta V_{al}^2} \quad (1.34)$$

em que x é a fração molar da liga, Ω_0 é o volume ocupado por uma átomo na liga, ΔV_{al} é a diferença de potencial entre os componentes da liga e o fator b é a expressão de Fang-Howard das funções de onda para a aproximação do poço triangular e é dada por

$$b = \left(\frac{33e^2 m^* n}{8\epsilon_s \hbar^2} \right)^{1/3} \quad (1.35)$$

A partir do conjunto de mecanismos de espalhamentos apresentados, e do método de otimização CE que será abordado na Seção 3.1 e que foi implementado com o objetivo de determinar de forma estatística e robusta, os parâmetros de ajuste associados aos mecanismos de dispersão dominantes nas amostras de InAs/GaAs. Em resumo, foram realizados experimentos de resistividade e efeito Hall, pela técnica de quatro pontos, para a obtenção da concentração de portadores e da mobilidade das amostras. Tais experimentos foram realizados com a variação da temperatura e com aplicação de campo magnético constante e homogêneo sobre toda a amostra. Em seguida, foi desenvolvido uma rotina baseada no método de otimização global CE, em que foi fornecido um conjunto de limites para os parâmetros, de acordo com características físicas das amostras. A partir deste ponto, a rotina segue os processos descritos no Capítulo 3. As incertezas nos ajustes são obtidas através do procedimento *bootstrap* [44], que realiza uma re-amostragem dos dados experimentais. Com isso, foi possível determinar o melhor ajuste e obter os parâmetros de ajustes com suas devidas incertezas.

Capítulo 2

Materiais e métodos

2.1 Amostras

Neste trabalho foram utilizadas seis amostras semicondutoras contendo multicamadas de InAs/GaAs, como ilustrado na Figura 2.1. Elas foram crescidas através da técnica de Epitaxia de Feixe Molecular (MBE), no sistema MBE Riber 2300 da UFMG (ICEEx) [22, 45]. O crescimento das amostras ocorreram sobre substratos de GaAs semi-isolantes. Uma camada de $1 \mu\text{m}$ de GaAs foi crescida a temperatura de 600°C . Em seguida, a temperatura foi reduzida e mantida constante durante o crescimento das camadas de InAs/GaAs de acordo com a Tabela 2.1. O número de períodos de InAs/GaAs variou entre 0 e 50. A cobertura de InAs variou entre 1,35 e 2,3 monocamadas (ML), seguida por uma camada espaçadora de 30 ou 40 ML de GaAs. Sendo que, para o Arseneto de Índio (InAs) 1 ML equivale a $6,0583 \text{ \AA}$ e para o Arseneto de Gálio (GaAs) 1 ML equivale a $5,65325 \text{ \AA}$. Para esta série de amostras foi utilizada uma taxa de deposição de $1,0 \text{ ML/s}$ para o GaAs e $0,158 \text{ ML/s}$ para as camadas de InAs. A quantidade de MLs de uma camada não representa valor da espessura da camada, mas sim a quantidade de material depositado, uma vez que após o crescimento possa ocorrer interdifusão e reconstrução entre as camadas, devido a temperatura do substrato. Os parâmetros de crescimento são resumidos na Tabela 2.1.

Basicamente, o MBE é uma câmara de aço-inox de diâmetro entre 360 e 450 mm, com uma pressão interna residual de aproximadamente 2×10^{-10} torr. Os elementos que

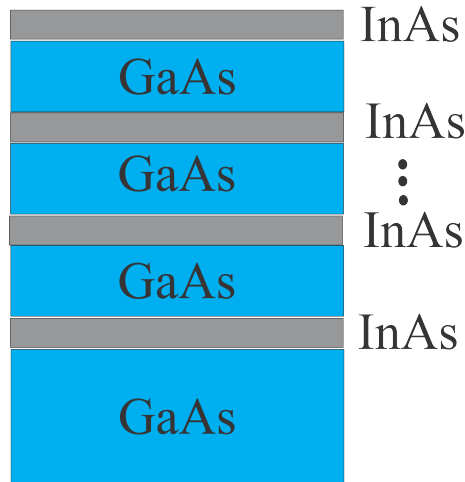


Figura 2.1: Ilustração da disposição das camadas sobre o substrato de GaAs. Na cor azul, são representados o substrato e os espaçadores de GaAs e na cor cinza as coberturas de InAs.

Tabela 2.1: 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)
A1	545	0	1,9	30
A2	540	5	1,9	30
A3	500	10	1,9	30
A4	505	50	1,9	30
A5	545	50	2,3	40
A6	505	50	1,35	40

se deseja depositar são colocados em forma sólida nas células de efusão e evaporados através de um sistema de filamentos resistivos. Controladores eletrônicos de potência e sensores termopares são usados para manter constante a temperatura das células de modo a gerar um fluxo estável de material. Na frente das células estão localizados os obturadores mecânicos que permitem que os feixes sejam interrompidos quando necessário, permitindo o crescimento de camadas alternadas de diferentes materiais (Exemplo: Ga, As e In). Na Figura 2.2 é apresentada uma foto do MBE utilizado para o crescimento destas 6 amostras.

A disposição geométrica das células na câmara de vácuo é feita de forma que todos os feixes se cruzem na posição em que o substrato é colocado. Um pequeno fluxo de átomos ou moléculas que ao entrar em contato com o substrato é aderido. Na superfície do substrato ocorrem todos os processos químicos e físicos relacionados ao crescimento. O controle do fluxo de cada elemento é obtido através da temperatura das células de efusão.

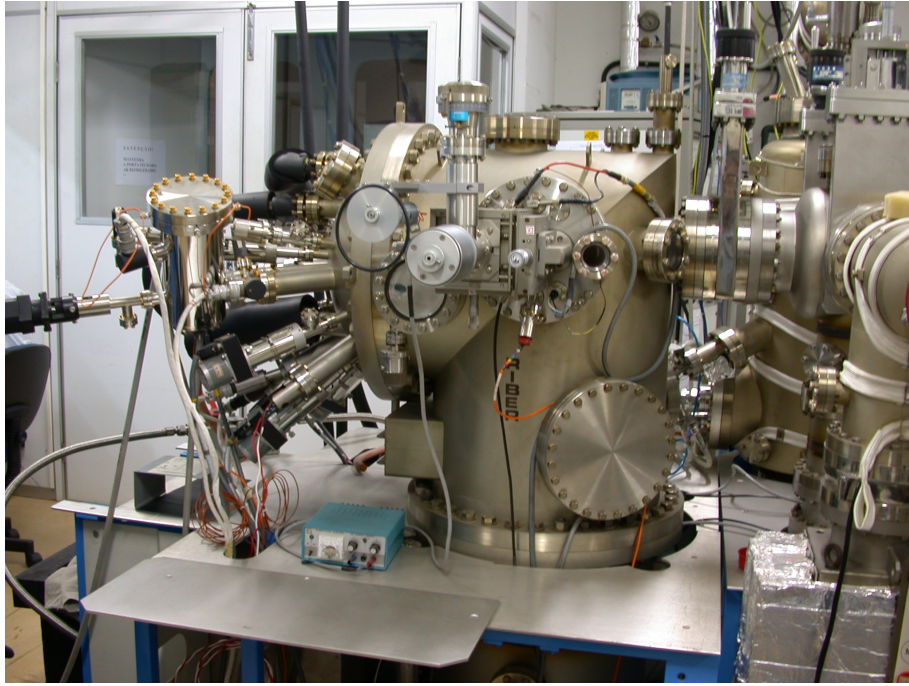


Figura 2.2: MBE Riber 2300 da UFMG (ICEEx).

A espessura da camada a ser crescida é controlada pelo tempo de abertura das células de efusão, em função do crescimento do material em específico.

O porta-substrato é feito de molibdênio de alta pureza, que permite uma boa condução térmica, este recebe o nome de *Molyblock*. A temperatura no substrato precisa ser controlada, pois qualquer variação pode fazer com que as moléculas sejam desorvidas da superfície da amostra, influenciando diretamente no coeficiente de agregação das amostras. Isto é feito através de um termopar que é acoplado ao encaixe do porta-substrato, em contato com a superfície inferior do *molyblock*. A temperatura do substrato é o parâmetro de crescimento controlado com menor precisão no sistema MBE.

O sistema MBE permite a instalação de várias ferramentas. Uma delas é a difração de elétrons refletidos de alta energia (RHEED, *Reflection High-Energy Electron Diffraction*) é uma ferramenta de grande importância para monitoramento das condições de crescimento, pois as oscilações na intensidade do máximo de reflexão especular indicam a rugosidade da superfície que está sendo crescida. Sendo esta técnica sensível apenas à superfície da amostra, apresentando um padrão de difração bidimensional composto de várias franjas de difração.

2.2 O efeito Hall pelo método de van der Pauw

Um dado semiconductor submetido a um campo magnético estático e perpendicular à direção de movimento de deriva das cargas, tem suas cargas defletidas lateralmente, criando um acúmulo de cargas que resultam numa diferença de potencial transversal [27, 28]. Supondo o semiconductor com geometria equivalente a apresentada na Figura 2.3. Assumindo que os portadores de carga são elétrons e que eles viajam com uma velocidade \vec{v} na direção x , após a aplicação de um campo magnético, $\vec{B} = B\hat{z}$, na direção z , os elétrons vão experimentar uma força

$$\vec{F} = -e\vec{v} \times \vec{B} \quad (2.1)$$

que terá uma componente y , $-e(\vec{v} \times \vec{B})_y = -e(v_z B_x - v_x B_z) = ev_x B_z$, ocorrendo um acúmulo de cargas na face $+y$ da amostra provocando o surgimento de uma força elétrica oposta $-e\varepsilon_y$ que entra em equilíbrio com a força $ev_x B_z$. Com esse equilíbrio, o elétron não terá mais uma componente y na velocidade, tal como ocorre quando $B = 0$, isto é, a corrente na direção y é nula. A densidade de corrente total é $j_x = -nev_x$, de modo que $e\varepsilon_y = ev_x B = -eBj_x/ne$. O coeficiente Hall R_H é definido como

$$R_H = \frac{\varepsilon_y}{j_x B_z} = -\frac{1}{ne} \quad (2.2)$$

O coeficiente de proporcionalidade entre \vec{v} e $\vec{\varepsilon}$, chamado de mobilidade μ , pode ser obtido da expressão

$$\mu \equiv \frac{v_x}{\varepsilon_x} = -\frac{j_x}{ne\varepsilon_x} = \frac{j_x}{\varepsilon_x} \frac{\varepsilon_y}{j_x B} = \frac{1}{B} \frac{\varepsilon_y}{\varepsilon_x} = \frac{1}{B} \frac{V_H l}{V_c w} \quad (2.3)$$

onde $V_c = \varepsilon_x l$ é tensão de condução, paralela ao fluxo de corrente e $V_H = \varepsilon_y w$ é a tensão entre os contatos perpendiculares ao fluxo de corrente, chamada de tensão Hall.

A mobilidade Hall μ se difere da mobilidade por condutividade μ_c pelo fator Hall [29]

$$\mu = r_H \mu_c \quad (2.4)$$

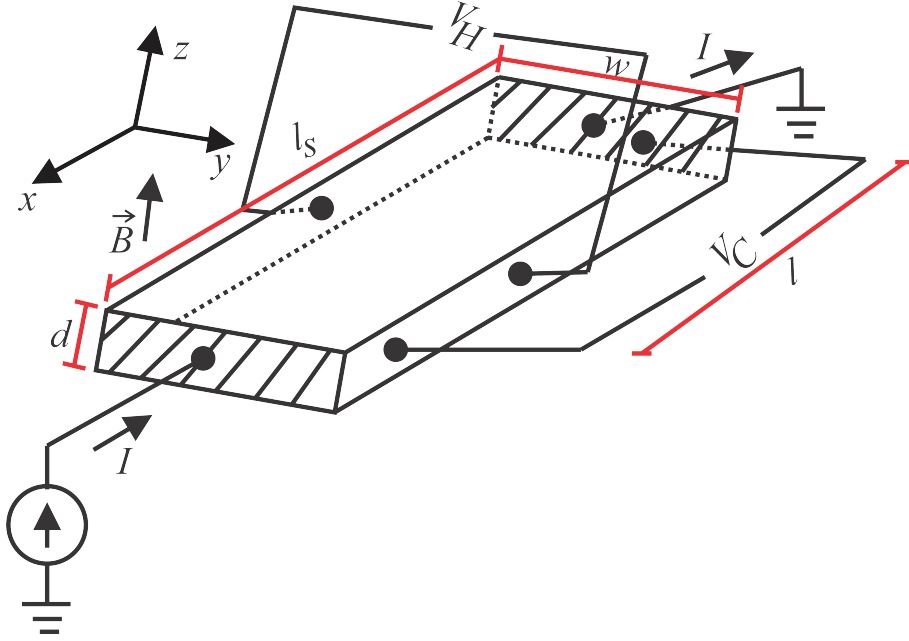


Figura 2.3: Configuração de uma barra Hall para medidas de resistividade.

em que $r_H \equiv \langle \tau^2 \rangle / \langle \tau \rangle^2$. Para semicondutores não degenerados o fator Hall é dado por

$$r_H = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \frac{(2r + \frac{3}{2})!}{[(r + \frac{3}{2})!]^2} \quad (2.5)$$

Os valores de r_H variam entre 1 e 1.93, dependendo dos mecanismos de espalhamento envolvidos [46]. Por exemplo, para espalhamentos por fônons acústicos, $r = -1/2$ e o fator Hall é igual a $3\pi/8$, e para espalhamentos por impurezas ionizadas com $r = 3/2$ o fator Hall é $315\pi/512$ ($\sim 1,93$).

Van der Pauw formulou em 1958 uma técnica que resolveu os problemas de potencial, permitindo medidas de efeito Hall em amostras de forma arbitrária, sem a necessidade de medir todas as dimensões da amostra, apenas a espessura d .

Pela técnica de van der Pauw é usual uma média da resistividade ρ pela inclusão da permutação entre os quatro contatos, ilustrados na Figura 2.4, e a inversão de corrente para as quatro permutações sobre a amostra. Seja $R_{ij,kl} = V_{kl}/I_{ij}$, onde a corrente entra no contato i e sai no contado j e $V_{kl} = V_k - V_l$. Resistividade torna-se

$$\rho = \frac{1}{8} \frac{\pi d}{\ln 2} (R_{21,34} - R_{12,34} + R_{32,41} - R_{23,41}) f_A + \frac{1}{8} \frac{\pi d}{\ln 2} (R_{43,12} - R_{34,12} + R_{14,23} - R_{41,23}) f_B \quad (2.6)$$

em que f_A e f_B são determinados através da equação transcendental

$$\frac{Q-1}{Q+1} = \frac{f}{\ln 2} \operatorname{arccos} h \left[\frac{1}{2} \exp \left(\frac{\ln 2}{f} \right) \right] \quad (2.7)$$

onde Q_A e Q_B são respectivamente

$$Q_A = \frac{R_{21,34} - R_{12,34}}{R_{32,41} - R_{23,41}}, \quad (2.8)$$

$$Q_B = \frac{R_{43,12} - R_{31,12}}{R_{14,23} - R_{41,23}}. \quad (2.9)$$

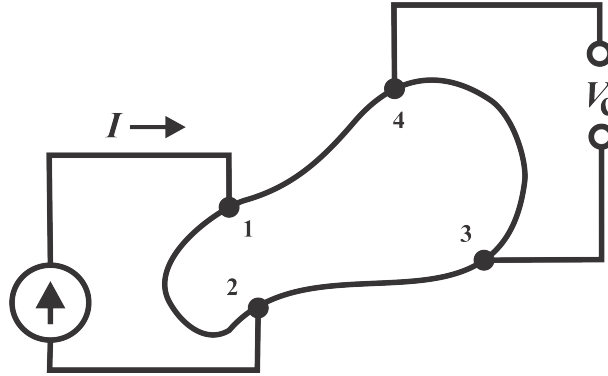


Figura 2.4: Forma arbitrária de uma amostra indicando os contatos para a medida de resistividade através da técnica de van der Pauw.

A mobilidade Hall é determinada utilizando a configuração da Figura 2.5, em que os contatos de corrente e tensão são cruzados. Em geral, para minimizar a magnetorresistência e outros efeitos é usual a média entre as correntes e as direções dos campos magnéticos. Então

$$R_H = \frac{1}{8} \frac{d}{B} (R_{31,42}(+B) - R_{13,42}(+B) + R_{42,13}(+B) - R_{24,13}(+B)) + \frac{1}{8} \frac{d}{B} (R_{13,42}(-B) - R_{31,42}(-B) + R_{24,13}(-B) - R_{42,13}(-B)) \quad (2.10)$$

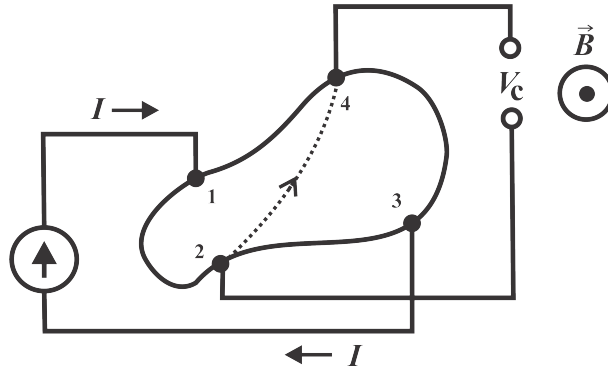


Figura 2.5: Forma arbitrária de uma amostra indicando os contatos para a medida de efeito Hall através da técnica de van der Pauw.

Embora o esquema de van der Pauw seja aplicado a qualquer forma arbitrária na prática formas simétricas são quase sempre usadas. Para este trabalho foi utilizado um formato que se aproxima de um quadrado, como ilustrado na Figura 2.6.

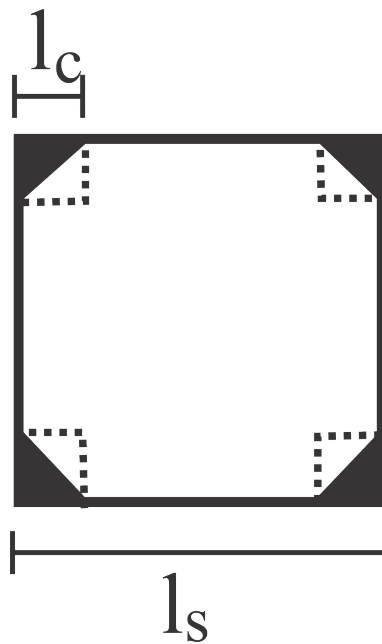


Figura 2.6: Ilustração da geometria utilizadas para a medida de efeito Hall pela técnica de van der Pauw neste trabalho. Na Figura l_s é o comprimento da amostra e l_c o comprimento do contato.

Para a dedução de seu método, van der Pauw considera contatos pontuais e que estão localizados na borda da amostra. Posteriormente, ele calcula o erro cometido com a área finita dos contatos reais, na prática o erro é igual à soma dos erros sobre cada contato. Para este trabalho em que a geometria quadrada é adotada para as amostras ocorre uma redução na resistividade inferior a 2% e uma incerteza na voltagem Hall em torno de 15% [47].

Todas as medidas de efeito Hall pela técnica de van der Pauw foram realizadas no laboratório de transporte do departamento de física da UFMG. Para tais medidas foram utilizados:

- multímetros (Keithley 196) e picoamperímetros (Keithley 485);
- fontes de corrente (Keithley 220) e de tensão (Keithley 230), fonte corrente/tensão (Keithley 237);
- eletroímã com fontes de corrente automatizadas (KEPCO BOP20/20);
- sistema de medidas Hall automático (Keithley 7001) e (Keithley 7065);
- criostato com controlador de temperatura (Oxford ITC503);
- cabos com conexões triaxiais, especiais para medidas elétricas de alta resistividade e baixo ruído;
- microcomputadores com softwares próprios para aquisição e tratamento de dados em ambiente LabVIEW.

2.3 Separação em dois canais de condução

As amostras utilizadas neste trabalho apresentaram o comportamento de duas sub-bandas na hetero-interface semicondutora. Para a realização dos ajustes foi utilizado um modelo de duas sub-bandas [48] que permitiu uma melhor adaptação das medidas Hall. Em um cenário de multi-poços-quânticos, a densidade Hall e a mobilidade Hall, em um regime de baixos campos magnéticos são respectivamente

$$n_H = \frac{(\sum n_i \mu_i)^2}{\sum n_i \mu_i^2} \quad (2.11)$$

$$\mu_H = \frac{\sum n_i \mu_i^2}{\sum n_i \mu_i} \quad (2.12)$$

em que n_i e μ_i é a concentração de portadores e a mobilidade da i -ésima sub-banda.

De acordo com as características das amostras, foi assumido que a concentração total n_t é independente da temperatura, constante e dada pela soma das concentrações n_1 e n_2 que são as populações das duas sub-bandas. Além disso, o modelo assume que a transferência de portadores entre as sub-bandas é dada por

$$n_1 = n_1^0 \left(1 - e^{-\frac{E}{k_B T}} \right). \quad (2.13)$$

Na temperatura $T = 0$ K a concentração de portadores no canal n_1 é definido por n_1^0 .

Capítulo 3

O método de otimização global -

Cross Entropy

O CE foi introduzido por Rubinstein [49], com o objetivo de estimar probabilidade de eventos raros em redes estocásticas complexas e logo após realizando algumas modificações para tratar de problemas contínuos e de otimização combinatória discreta. O CE vem sendo empregado como método de otimização em diversas áreas do conhecimento, tais como: Astrofísica, Biologia, Física e outras [50, 51, 52, 53, 54], se mostrando robusto na resolução de problemas. O CE usa conceitos de amostragem, sendo uma técnica de redução de variância, mas que não necessita do conhecimento a priori dos parâmetros referentes a distribuição. O CE consiste em um procedimento adaptativo simples para estimar parâmetros. Além disso, o procedimento CE baseia-se num espaço de solução, com uma regra evolutiva na qual uma fração do espaço é selecionada em cada iteração baseado em algum critério de seleção.

Para exemplificar, considere um conjunto de dados experimentais x, y obtidos que possuem o comportamento linear, ou seja, $y = ax + b$. Para determinar os coeficientes a e b da reta podemos utilizar o CE. O procedimento a ser adotado seria:

1. Geração aleatória de uma amostra inicial de parâmetros $a = a_0, a_1, \dots, a_{i-1}$ e $b = b_0, b_1, \dots, b_{i-1}$, sendo i o tamanho da amostra, que deve ser definida inicialmente. Estes valores devem obedecer uma distribuição uniforme de probabilidades e pertencerem a um intervalo definido a priori, de acordo com o modelo utilizado.

2. Cada par de valores (a_i, b_i) é testado por meio de uma função objetiva. Neste trabalho foi feita a opção por minimizar o χ^2 . Com isso, para os valores (a_i, b_i) foi gerado um conjunto $\chi^2 = \{\chi_0^2, \chi_1^2, \dots, \chi_i^2\}$ em que $\chi_i^2 = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{(a_i x_j + b_i - y_j)^2}{\sigma_{y_j}}$, em que N é o número de medidas e σ_{y_j} é a incerteza associada a medida y_j . A partir destes valores de χ^2 os pares (a_i, b_i) são ordenados de forma crescente e uma porcentagem pré-definida dos pares é escolhida.
3. A partir dos pares escolhidos no passo anterior é gerado uma nova amostra aprimorada dos parâmetros. Novamente é utilizada uma distribuição normal de probabilidade para gerar uma amostra de parâmetros do mesmo tamanho da anterior, porém em um intervalo menor para a construção dos conjuntos a e b . Note que a resolução do conjunto é um pouco maior. Além disso, é atribuída a distribuição um fator de mistura para que não ocorra o problema de a solução ficar estacionada em um mínimo local.
4. O processo de otimização repete os passos 2 e 3 até que um critério pré-definido de parada seja obtido.

Assim que ocorre a convergência, o conjunto de parâmetros procurados são obtidos. Na Seção 3.1 é apresentado a aplicação deste método no ajuste de mobilidades eletrônicas.

3.1 O CE aplicado ao ajuste de mobilidades

Para o ajuste da mobilidade em função da temperatura das amostras utilizadas neste trabalho, foi utilizado o método de otimização global CE. Este método permitiu trabalhar de forma robusta com o ajuste de vários parâmetros de forma simultânea e com a utilização de várias variáveis. Tradicionalmente, este ajuste era feito de forma não estatística e os parâmetros não eram obtidos de forma estatística, nem simultânea.

Para o ajuste da mobilidade (μ) nas seis amostras semicondutoras de InAs/GaAs foi construído um algoritmo apresentado em Anexo, na linguagem de programação IDL. Neste algoritmo, foi utilizada uma amostra inicial de 1000 entes para cada um dos doze parâmetros a serem ajustados, cujo o espaço de parâmetros é apresentado na Tabela 3.1.

Estes valores foram obtidos através de uma distribuição uniforme de probabilidades e pertencerem a um intervalo definido a priori, de acordo com as características físicas e estruturais das amostras.

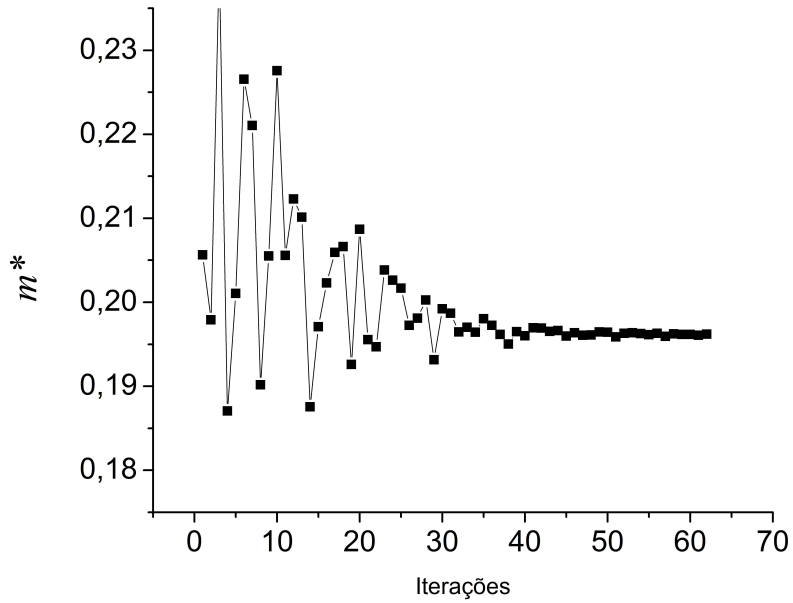
Tabela 3.1: Espaço de Parâmetros utilizado para os ajustes

Parâmetro	Limite inferior	Limite Superior
m^*	0,02	0,4
ρ	5,0 g/cm ³	5,7 g/cm ³
u_l	4,5×10 ⁵ cm/s	5,2×10 ⁵ cm/s
u_t	42,0×10 ⁵ cm/s	3,0×10 ⁵ cm/s
E_d	6,0 eV	10,0 eV
h_{14}	1,0 ×10 ⁷	1,0 ×10 ⁹
ϵ_∞	10,8	12,5
ϵ_s	12,9	15,3
x	0	1
Z_0	1,0 ML	4,0 ML
N_{ic}	1×10 ⁷ cm ⁻¹	1×10 ¹¹ cm ⁻¹
N_{dis}	1×10 ⁷ cm ⁻¹	1×10 ¹⁰ cm ⁻¹

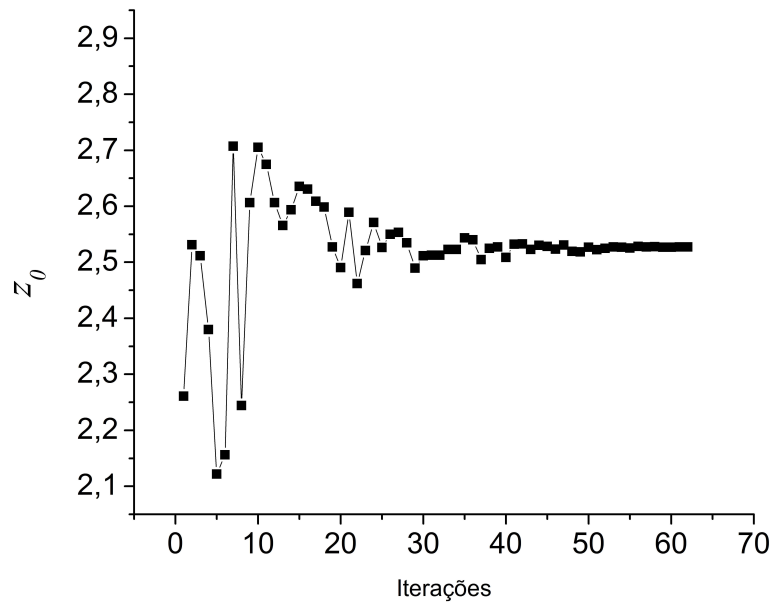
Todos os entes de cada parâmetro foram testados através de uma função objetiva, que basicamente consiste da geração de curvas sintéticas de mobilidade em função da temperatura, através da regra de Matthiessen (Seção 1.1) aplicada a todos mecanismos de espalhamentos apresentados na Seção 1.2. Estas curvas são comparadas através da função de mérito $\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(\mu_{i(experimental)} - \mu_{i(modelo)})^2}{erro_i^2(experimental)}$ e os parâmetros utilizados para sua geração são ranqueados. Em seguida ocorre a ordenação dos conjuntos de entes de cada parâmetro de forma crescente e a seleção de 10% das melhores soluções. Como descrito anteriormente, a partir dos conjuntos de parâmetros escolhidos é gerado uma nova amostra aprimorada dos parâmetros. Novamente é utilizada uma distribuição normal de probabilidade para gerar uma amostra de parâmetros do mesmo tamanho da anterior, porém em um intervalo menor para a construção dos conjuntos. Para o ajuste de mobilidades foram utilizadas três formas de interrupção:

1. o resíduo entre a curva sintética e os dados experimentais seja menor que um valor pré-estabelecido para aquela amostra;
2. o resíduo repita o mesmo valor um número pré-estabelecido de vezes;
3. o número de iterações ultrapasse o limitado de 300 iterações.

Para exemplificar a evolução das iterações ao longo do processo de otimização do CE no ajuste de mobilidades são apresentados gráficos da Figuras 3.1, 3.2 e 3.3 da evolução das melhores soluções dos parâmetros durante o ajuste da mobilidade da amostra A2. Para a construção destes gráficos não foi adotado o procedimento *Bootstrap*, que será abordado na Seção 3.2.

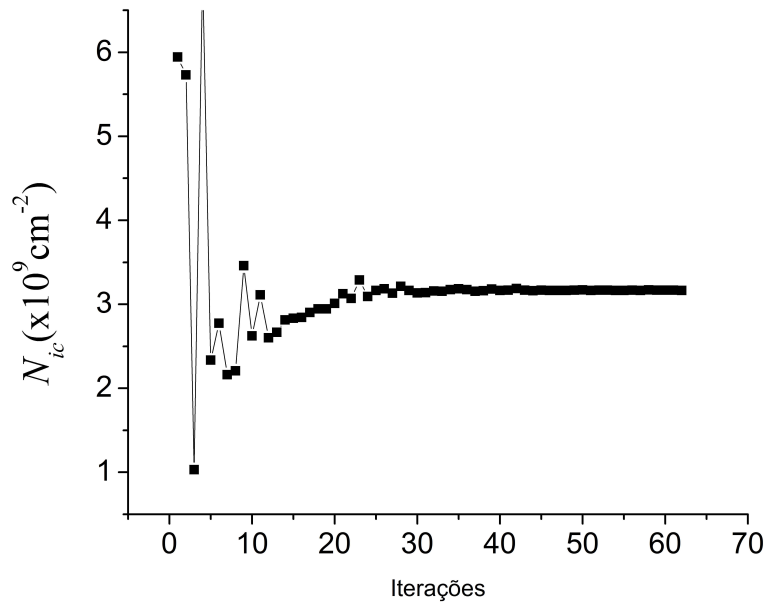


(a)

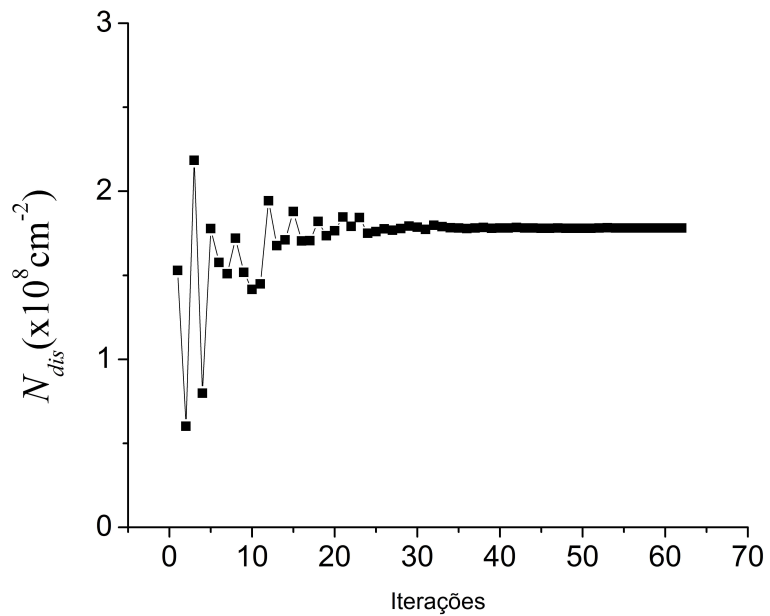


(b)

Figura 3.1: Gráficos da evolução dos parâmetros de ajustes a) massa efetiva m^* e b) Largura do poço quântico Z_0 em função do número de iterações do CE.



(a)



(b)

Figura 3.2: Gráficos da evolução dos parâmetros de ajustes a) Densidade de impurezas no poço de potencial 2DEG devido às impurezas remotas e/ou na interface N_{ic} e b) Densidade de discordâncias N_{dis} em função do número de iterações do CE.

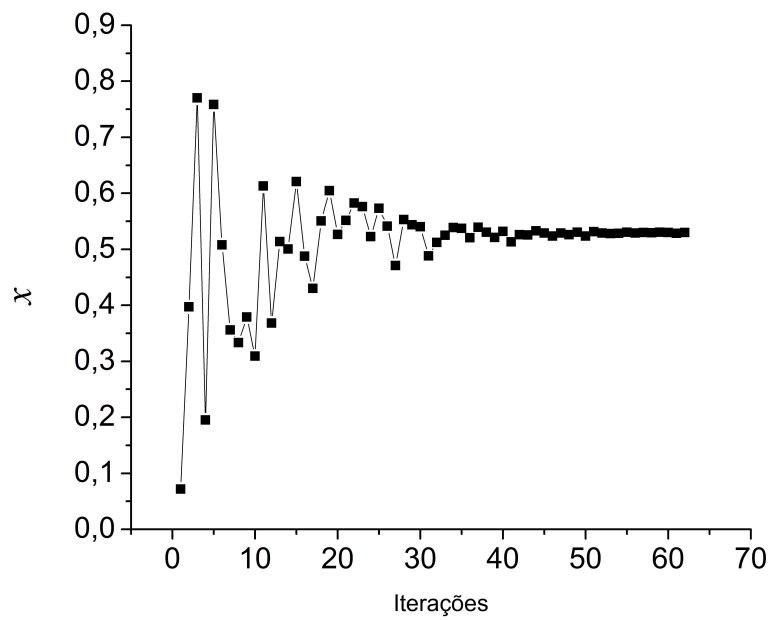


Figura 3.3: Gráfico da evolução do parâmetro de ajuste Fração molar da liga x em função do número de iterações do CE.

3.2 *Bootstrap*

Afim de tornar o procedimento mais robusto, o ajuste foi repetido 2500 vezes com diferentes conjuntos da amostra de dados experimentais. Em cada repetição alguns dados são aleatoriamente removidos e outros inseridos mais de uma vez. Esta técnica é conhecida como bootstrap [44, 55]. Nas Figuras 3.4, 3.5, 3.6 e 3.7 são apresentadas as soluções obtidas para a fração molar da liga, x , densidade de impurezas no poço de potencial bidimensional, N_{ic} , densidade de cargas nas discordâncias, N_{dis} , e tamanho do poço bidimensional, Z_0 , em função da massa efetiva, m^* , devido a utilização do procedimento bootstrap para a amostra A1. Nestas distribuições foram utilizadas a média \bar{M} , como medida de tendência central, representada pela cruz na cor branca e os dados são apresentados em diferentes cores, sendo que, na cor vermelha o intervalo das soluções $\bar{M} \pm \sigma$ correspondendo a 67% das soluções, na cor verde o intervalo das soluções $\bar{M} \pm 2\sigma$ das soluções obtidas através *bootstrap* correspondendo a 95% e na cor azul o intervalo das soluções $\bar{M} \pm 3\sigma$ correspondendo a 99,7% das soluções.

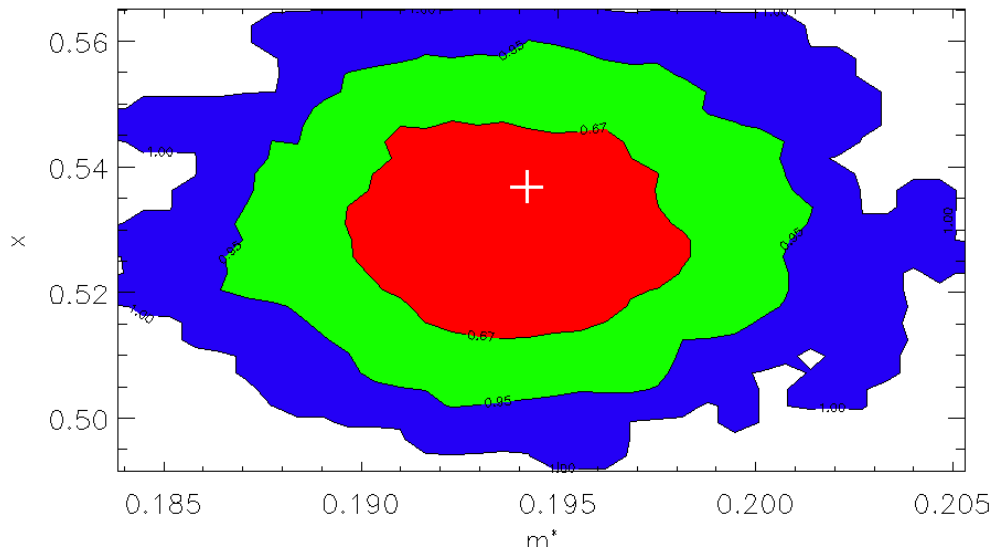


Figura 3.4: Distribuição das soluções do parâmetro fração molar, x , em função da massa efetiva, m^* , devido a utilização do *bootstrap*, para a amostra A1.

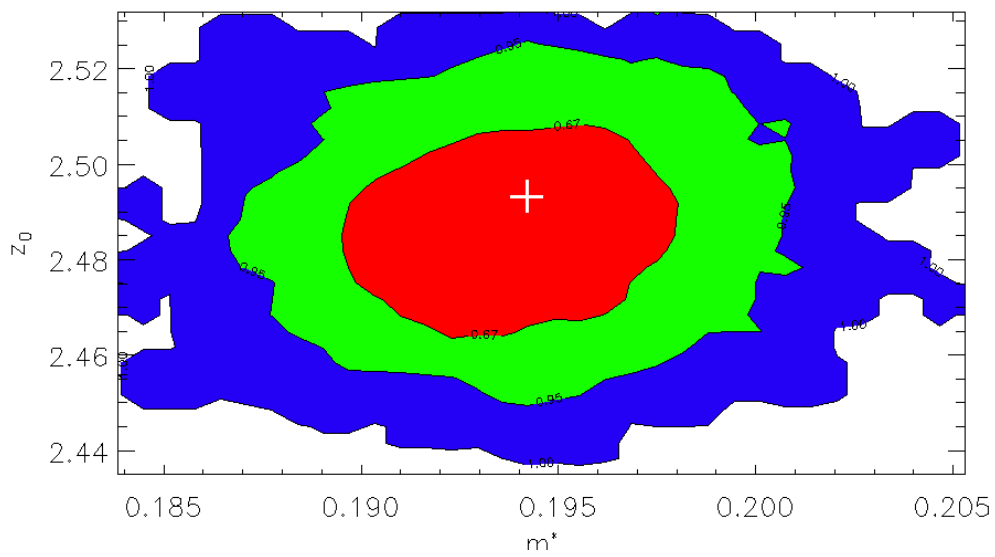


Figura 3.5: Distribuição das soluções do parâmetro tamanho do poço bidimensional, Z_0 , em função da massa efetiva, m^* , devido a utilização do *bootstrap*, para a amostra A1.

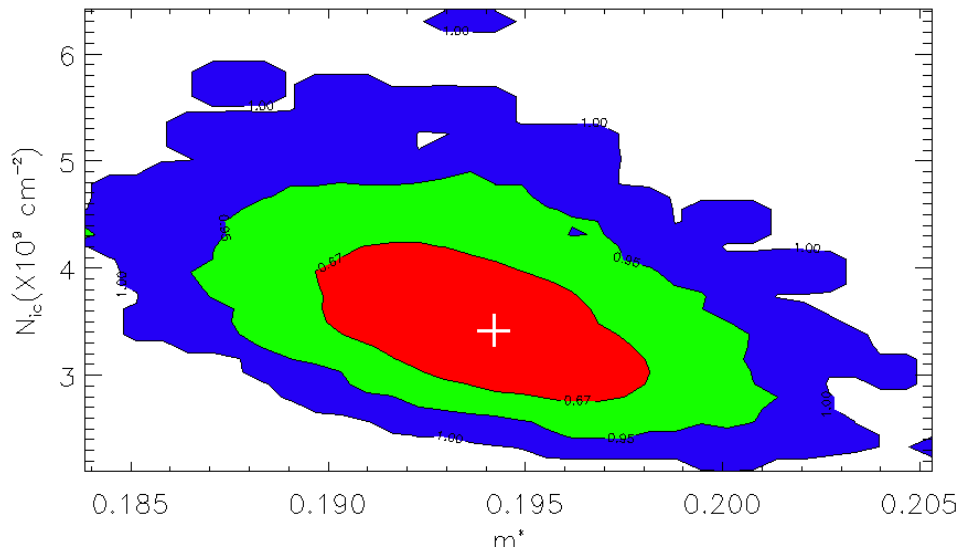


Figura 3.6: Distribuição das soluções do parâmetro densidade de impurezas no poço de potencial bidimensional, N_{ic} , em função da massa efetiva, m^* , devido a utilização do *bootstrap*, para a amostra A1.

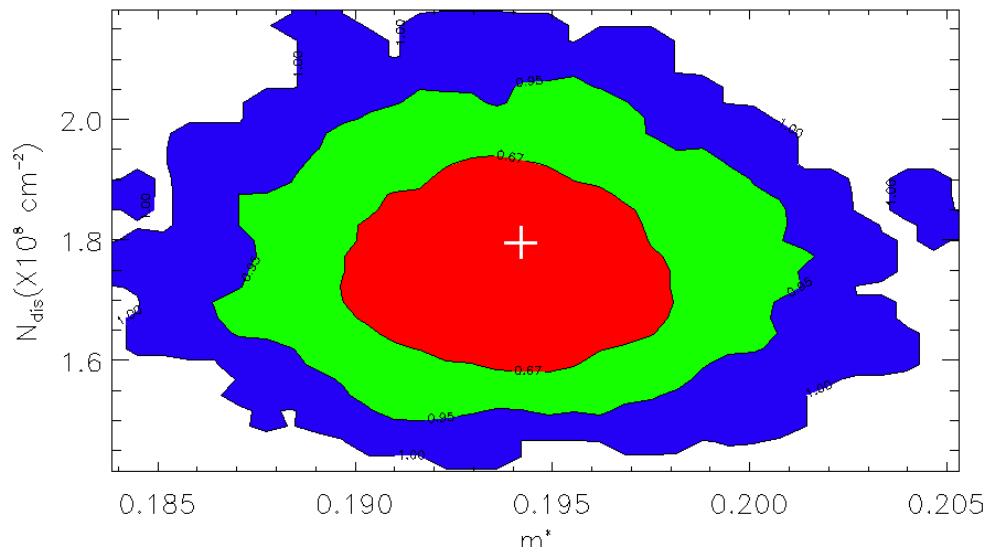


Figura 3.7: Distribuição das soluções do parâmetro densidade de cargas nas discordâncias, N_{dis} , em função da massa efetiva, m^* , devido a utilização do *bootstrap*, para a amostra A1.

3.3 Validação do método

Para a avaliação do método foi criado um conjunto de dados artificiais considerando um poço de potencial 2DEG formado apenas por InAs, com uma concentração de portadores constante $n = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Para a construção deste conjunto de dados foram considerados os parâmetros de entrada apresentados na Tabela 3.2. Além disso, foi inserido um ruído aleatório de 1% do valor obtido na mobilidade. Em seguida os dados foram ajustados através do algoritmo apresentado na Seção 3.1. Os resultados dos ajustes são apresentados na Figura 3.8 e na Tabela 3.3, onde é possível verificar que o CE foi efetivo em recuperar os parâmetros utilizados para a construção da amostra sintética.

Tabela 3.2: Parâmetros utilizados para a geração de uma amostra sintética para a validação do método de ajuste das mobilidades eletrônicas.

m^*	x	Z_0 (ML)	N_{ic} ($\times 10^9 \text{ cm}^{-2}$)	N_{dis} ($\times 10^6 \text{ cm}^{-2}$)
0,023	1,0	2,0	1,0	1,0

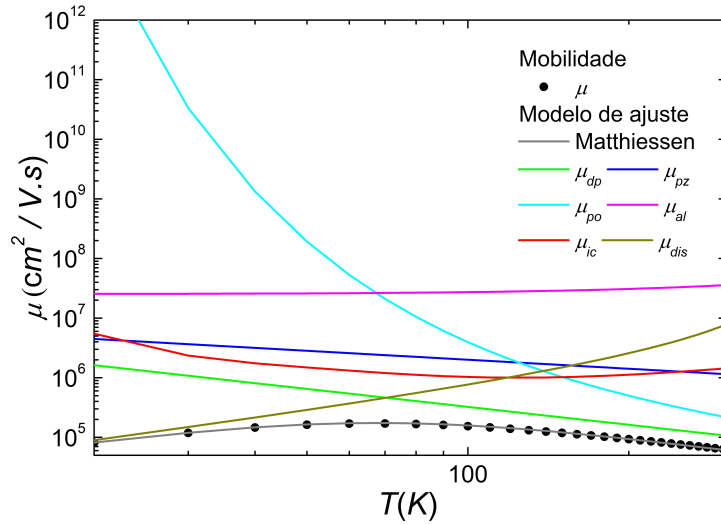


Figura 3.8: Ajuste realizado em um conjunto de dados sintéticos para avaliar a robustez do método. Os dados sintéticos são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

Tabela 3.3: Principais parâmetros obtidos no ajuste da mobilidade em função da temperatura no conjunto de dados sintéticos, utilizando o método de otimização CE.

m^*	x	Z_0 (ML)	N_{ic} ($\times 10^9 \text{cm}^{-2}$)	N_{dis} ($\times 10^6 \text{cm}^{-2}$)
$0,026 \pm 0,003$	$0,97 \pm 0,03$	$2,3 \pm 0,4$	$1,1 \pm 0,6$	$1,1 \pm 0,5$

Capítulo 4

Resultados e discussões

Nas Figuras 4.1 e 4.2 apresenta-se os dados obtidos através do experimento Hall, através do método de van der Pauw. Na Figura 4.1, são mostradas as curvas de mobilidade μ ($\text{cm}^2/\text{V.s}$) como função da temperatura $T(\text{K})$ para as amostras A1, A2, A3, A4, A5 e A6 com seus respectivos símbolos e cores indicados, as características de crescimento das amostras são apresentadas na Tabela 2.1. Na Figura 4.2, é apresentada a densidade de portadores $n(\text{cm}^{-2})$ em função da temperatura $T(\text{K})$ para as mesmas amostras. Para melhor visualização o gráfico apresentado na Figura 4.1 é mostrado na escala logarítmica. Para a Figura 4.1, temos que o pico de mobilidade corresponde a um mínimo na concentração de portadores devido a transferência de portadores entre as sub-bandas, Figura 4.2, que ocorre em temperaturas em torno de 100 K. Em baixas temperaturas e até aproximadamente 100 K, os dados apresentam uma inclinação positiva na mobilidade que caracteriza a transferência de portadores entre os dois canais. Acima de 100 K, ocorre uma região de inclinação negativa que é característico da combinação de espalhamentos por fônons óticos e acústicos simultâneos e, sendo a seleção das contribuições mais significativas uma tarefa complicada de ser realizada através de procedimentos convencionais. No entanto, a utilização do método de otimização global aqui proposto permite que este processo se defina de forma estatística. Na Figura 4.2, pode-se verificar que a amostra A1 se distingue das outras com relação a concentração de portadores de aproximadamente uma ordem de magnitude, atingindo valores de concentração de aproximadamente 10^{11} cm^{-2} , sendo que esta amostra se distingue das outras devido a presença de apenas uma interface de

InAs/GaAs, com descrito na Tabela 2.1.

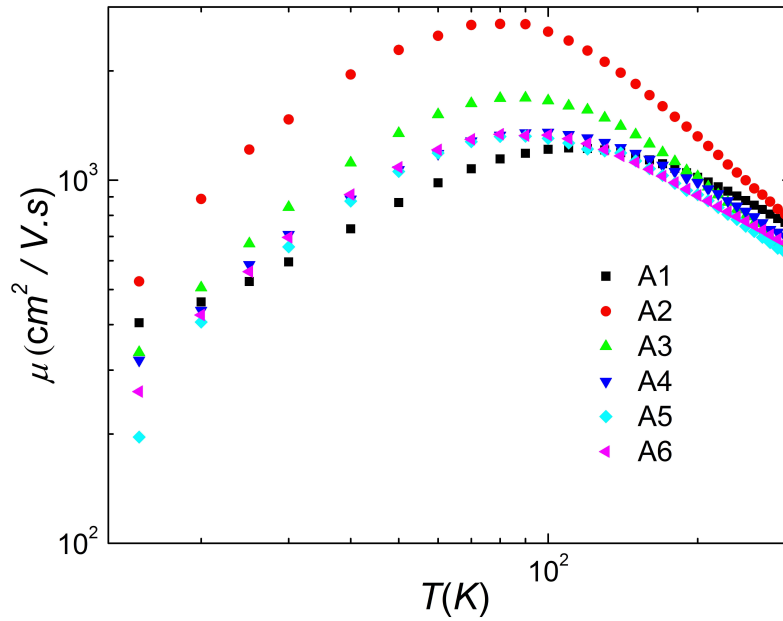


Figura 4.1: Medidas Hall obtidos pelo método de van der Pauw da mobilidade em função da temperatura das amostras A1, A2, A3, A4, A5 e A6, com os respectivos símbolos indicados. Para uma melhor visualização, o gráfico é mostrado na escala logarítmica.

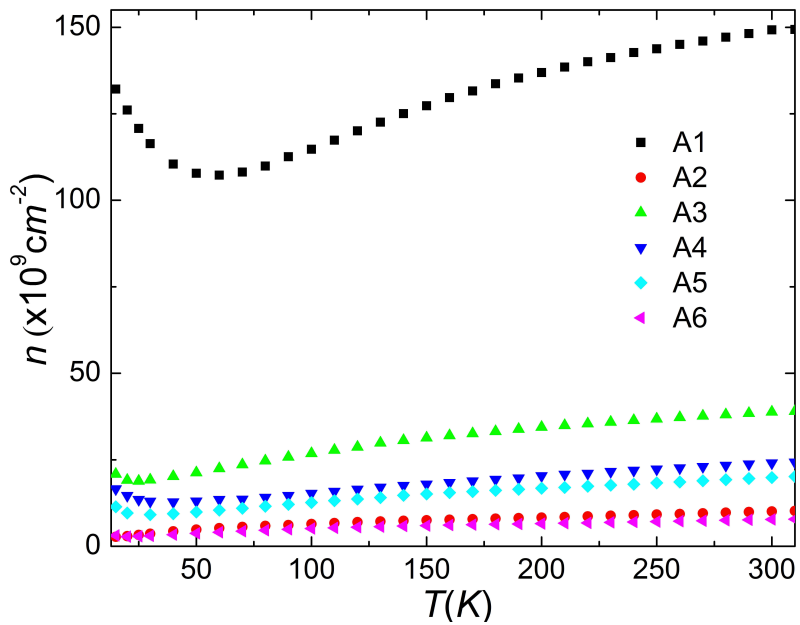


Figura 4.2: Concentração de portadores, n , como função da temperatura, T , obtida através das medidas Hall, pelo método de van der Pauw, para amostras A1, A2, A3, A4, A5 e A6. Os Símbolos são indicados na legenda da figura.

Nas Figuras 4.3, 4.4, 4.5 e 4.6 são apresentados os resultados os dados das Figuras 4.1 e 4.2 após o processo de separação em dois canais de condução usando o modelo apresentado na Seção 2.3. Este processo de separação permite que a concentração de portadores tenha uma única dependência com a temperatura em cada um dos canais de densidade de portadores n_i , ou seja, decrescente monotonicamente para n_1 e crescente monotonicamente para n_2 como descrito pelas Equações 2.11 e 2.12. Sendo que, ambas as densidades de portadores alcançam valores assintóticos em altas temperaturas. Em uma comparação entre as Figuras 4.3, 4.4, 4.5 e 4.6 verifica-se que para todas as amostras do canal 2 a mobilidade μ_2 é maior que a mobilidade μ_1 , do canal 1. Em adicional, μ_1 possui seu valor máximo localizado entre os valores de 110 K e 200 K, enquanto μ_2 possui seu máximo localizado em um valor de temperatura inferior, em torno de 90 K.

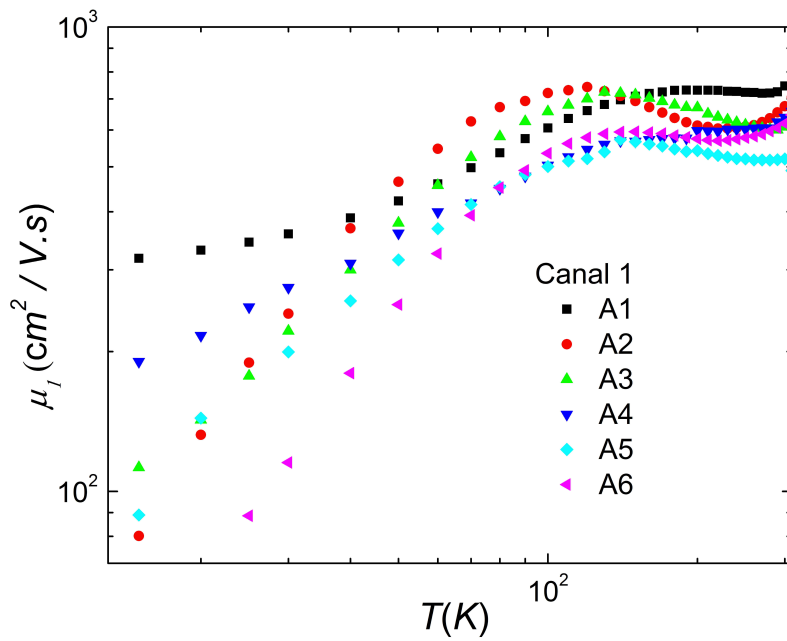


Figura 4.3: Resultados das curvas mobilidade após a separação de canais para o canal 1, μ_1 . Como na Figura 4.1, os símbolos correspondentes às amostras estão indicados no gráfico. Para uma melhor visualização, o gráfico é mostrado na escala logarítmica.

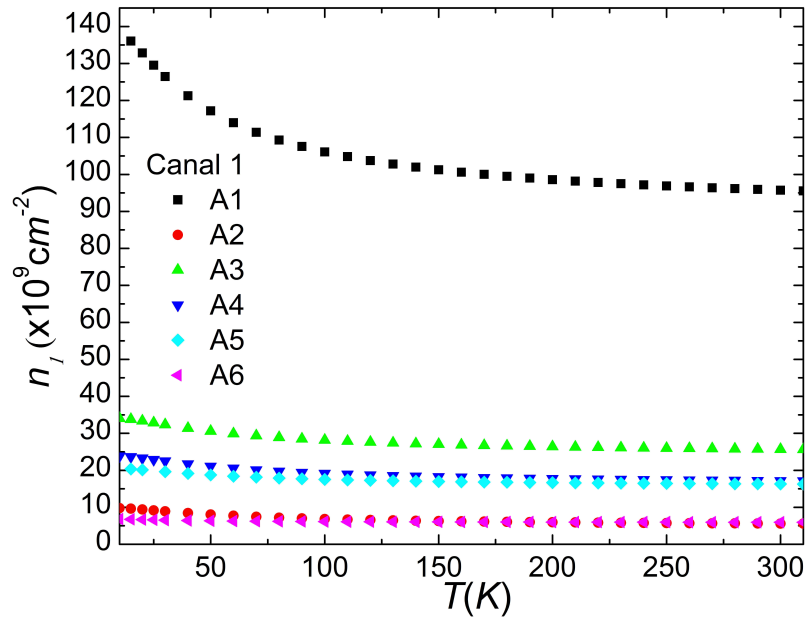


Figura 4.4: Resultados da concentração de portadores após a separação de canais para o canal 1, n_1 . Os símbolos correspondentes as amostras estão indicados na figura.

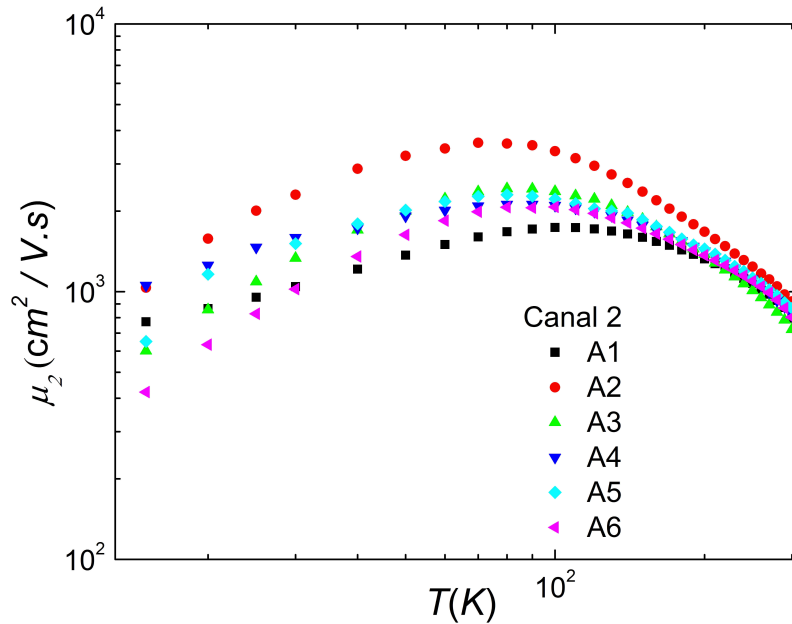


Figura 4.5: Resultados da mobilidade após a separação de canais para o canal 2, μ_2 . Como nas figuras anteriores, os símbolos correspondentes as amostras estão indicados no gráfico. Para uma melhor visualização, o gráfico é mostrado na escala logarítmica.

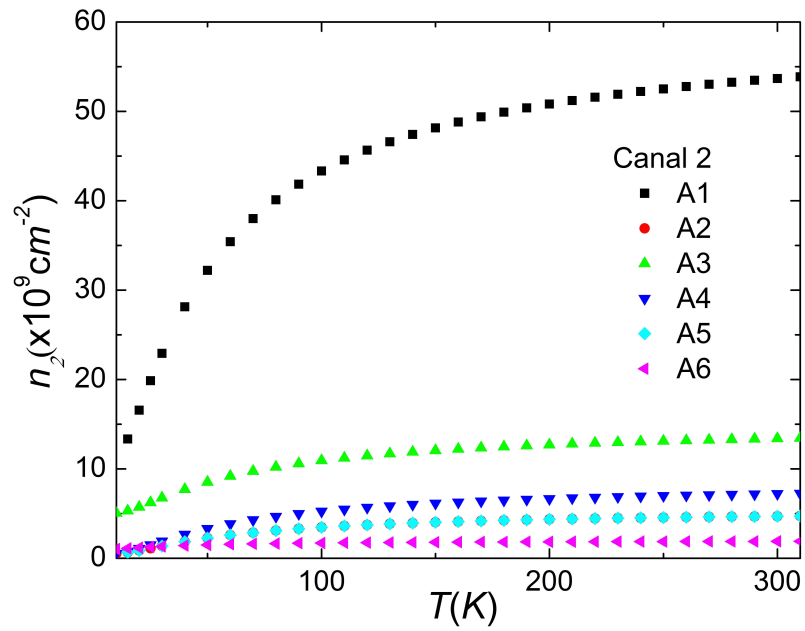


Figura 4.6: Resultados da concentração de portadores após a separação de canais para o canal 2, n_2 . Os símbolos correspondentes as amostras estão indicados na figura.

Como foi discutido no Capítulo 2 desta tese, todos os ajustes foram realizados considerando mecanismos de espalhamento 2DEG e a regra de Matthiessen (Equação 1.8) para a combinação dos mecanismos distintos para cada amostra e cada um dos canais de condução. Na Figura 4.7 é apresentado o resultado do ajuste, utilizando o CE, para a amostra A1, no canal 1. De acordo com os resultados dos ajustes, nota-se que os mecanismos de espalhamento por impurezas ionizadas (μ_{ic}) localizadas na interface e ou remotas e por discordâncias (μ_{dis}) dominam a mobilidade no canal 1 da amostra A1 entre as temperaturas de 10 e 150 K. Abaixo de 40 K o espalhamento por discordância é mais importante na limitação da mobilidade, acima de 40 K ocorre uma inversão tornando o espalhamento por impurezas o mecanismo mais importante na limitação da mobilidade. Para temperaturas acima de 150 K o espalhamento por fônons por potencial de deformação (μ_{dp}) torna-se mais relevante para definir a mobilidade, em combinação com as impurezas. Os outros mecanismos apresentados no gráfico também contribuem para o ajuste fino da mobilidade da amostra.

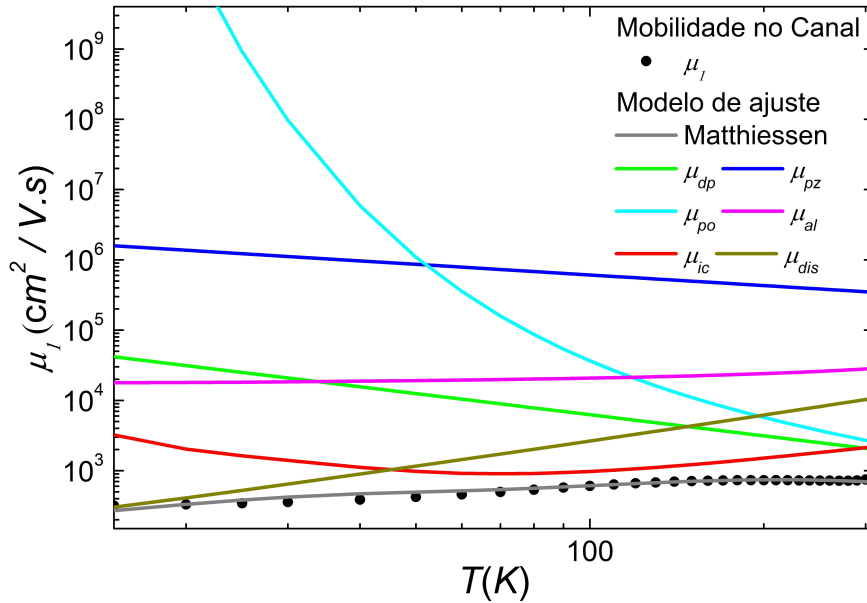


Figura 4.7: Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A1, no canal 1 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

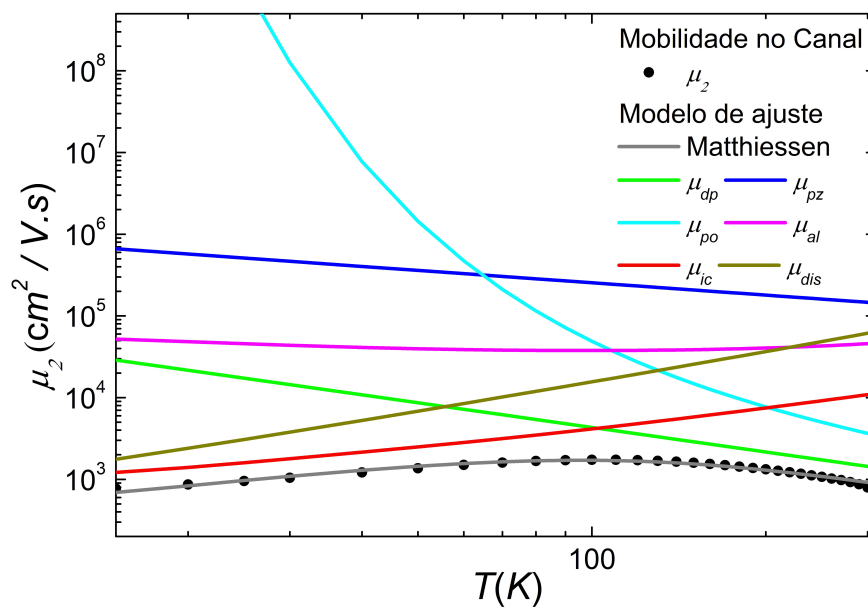


Figura 4.8: Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A1, no canal 2 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Mattheiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

No gráfico da Figura 4.8 são apresentados os resultados dos ajustes do canal 2 para a amostra A1. De acordo com os resultados dos ajustes utilizando o CE, novamente os principais mecanismos que limitam a mobilidade em baixas temperaturas, abaixo de 60 K, ocorrem devido a presença de impurezas ionizadas (μ_{ic}) localizadas na interface e discordâncias (μ_{dis}). Acima de 100 K, a mobilidade passa a ser limitada principalmente pelo espalhamento devido a fônons por potencial de deformação (μ_{dp}) e acima de 200 K a mobilidade é definida principalmente por uma combinação entre fônons acústicos devido ao potencial de deformação (μ_{dp}) e fônons ópticos de modo polar (μ_{po}).

Na Figura 4.9 é apresentado o resultado do ajuste de mobilidade da amostra A2, no canal 1. De acordo com os resultados dos ajustes utilizando o CE, para temperaturas abaixo de 110 K a mobilidade neste canal é limitada principalmente por impurezas ionizadas (μ_{dp}) localizadas na interface e por discordâncias (μ_{dis}), assim como ocorre com a amostra A1. Em temperaturas mais elevadas, acima de 110 K, o mecanismo de espalhamento mais relevante passa a ser devido a fônons acústicos por potencial de deformação (μ_{dp}). Para este canal os fônons ópticos de modo polar (μ_{po}) têm um papel secundário no ajuste da mobilidade em temperaturas acima de 230 K.

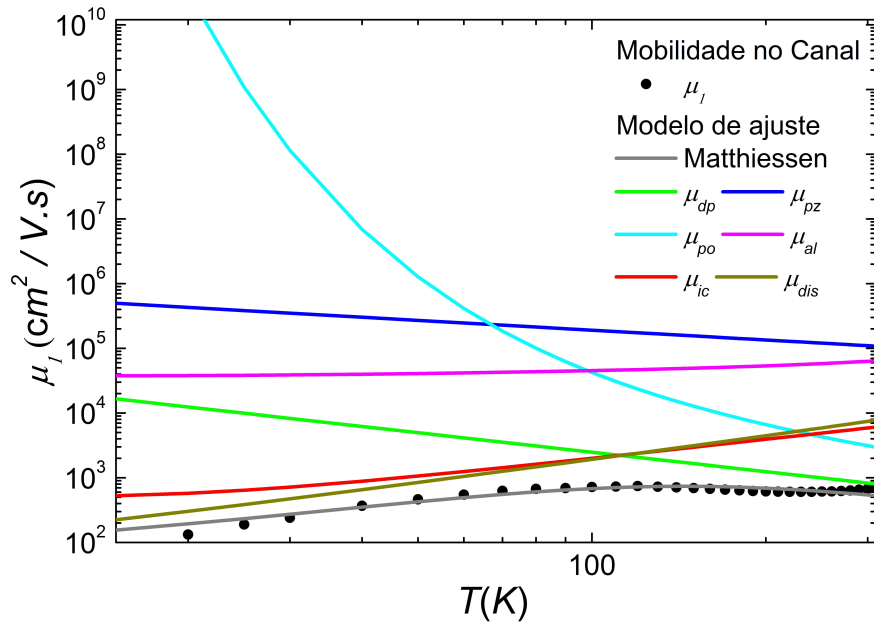


Figura 4.9: Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A2, no canal 1 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

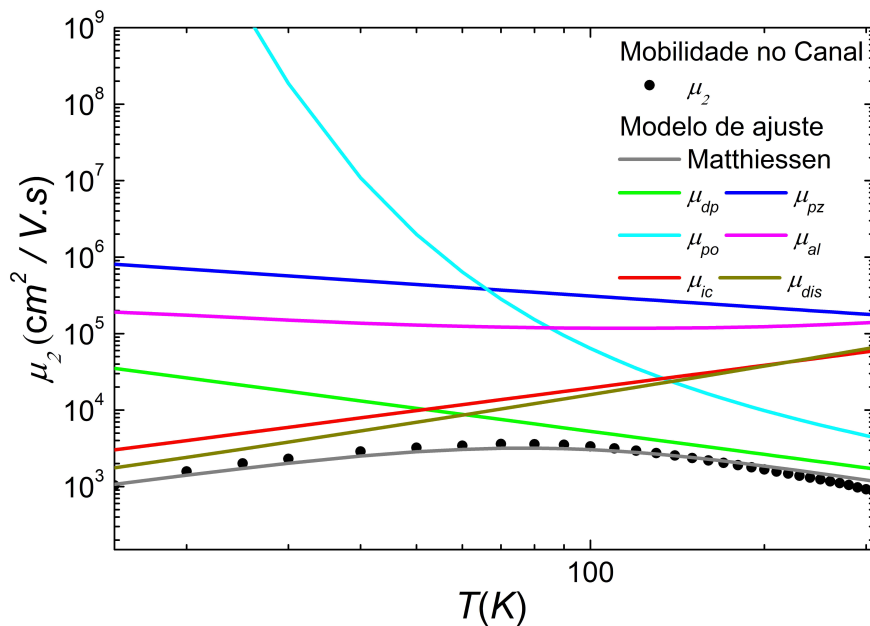


Figura 4.10: Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A2, no canal 2 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

Na Figura 4.10 é apresentado o ajuste de mobilidade em função da temperatura para o canal 2 da amostra A2. De acordo com os resultados dos ajustes utilizando o CE, em temperaturas abaixo de 50 K a mobilidade é limitada devido ao espalhamento por impurezas ionizadas (μ_{ic}) e devido às discordâncias (μ_{dis}) presentes na amostra, assim como ocorre na amostra A1. Para este ajuste, nota-se um comportamento oposto ao que ocorre no canal 1, nesta gama de temperatura o espalhamento devido às discordâncias tem maior influência na mobilidade do que o espalhamento devido às impurezas ionizadas. Para temperaturas superiores a 60 K a mobilidade começa a ser definida por fônons, inicialmente pelos acústicos por potencial de deformação (μ_{dp}) e acima de 150 K ocorre uma contribuição secundária dos fônons ópticos de modo polar (μ_{po}) na definição do limite de mobilidade eletrônica.

Na Figura 4.11 é apresentado o resultado do ajuste da mobilidade em função da temperatura para a amostra A3 no canal 1. De acordo com os resultados dos ajustes utilizando o CE, em temperaturas abaixo de 70 K os principais mecanismos que limitam a mobilidade são devido ao espalhamento por impurezas ionizadas (μ_{ic}) e por discordâncias (μ_{dis}) presentes na amostra. Em temperaturas mais elevadas o mecanismo mais pertinente no ajuste da mobilidade é o devido a fônons acústicos por potencial de deformação (μ_{dp}).

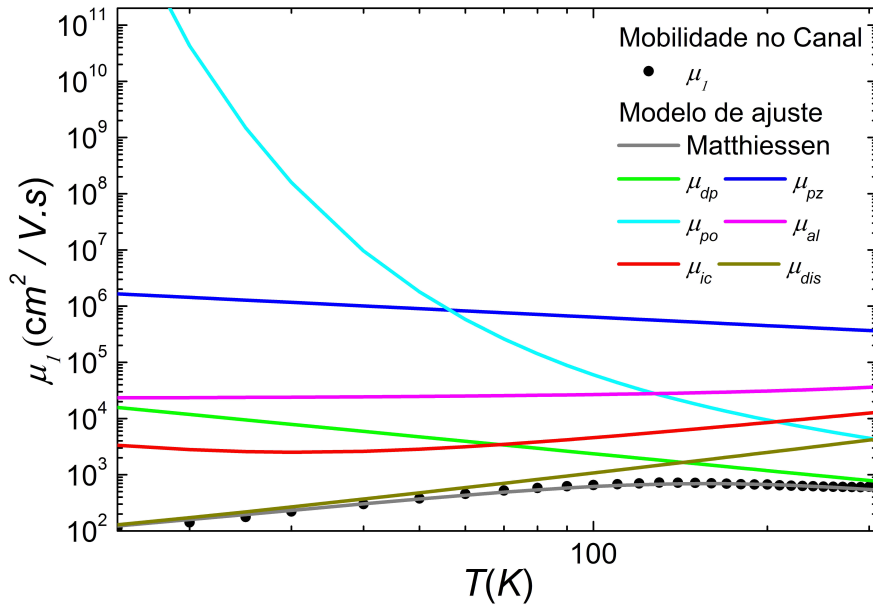


Figura 4.11: Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A3, no canal 1 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

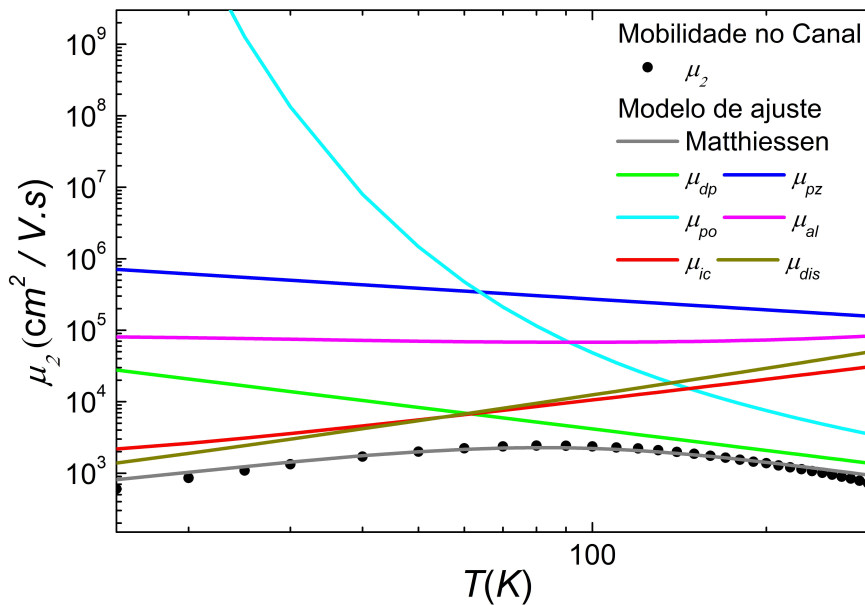


Figura 4.12: Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A3, no canal 2 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

Na Figura 4.12 é apresentado o ajuste da mobilidade em função da temperatura para o canal 2 da amostra A3. De acordo com os resultados dos ajustes utilizando o CE, neste canal a mobilidade é limitada principalmente por discordâncias (μ_{dis}) até aproximadamente 60 K. Acima de 60 K a mobilidade passa a ser definida por fônons acústicos por potencial de deformação (μ_{dp}). Neste ajuste, existe uma contribuição secundária dos fônons ópticos de modo polar (μ_{po}) em temperaturas acima de 180 K. Os demais mecanismos contribuem para o ajuste fino da curva de mobilidade.

Na Figura 4.13 é apresentado o ajuste da mobilidade em função da temperatura do canal 1 da amostra A4. De acordo com os resultados dos ajustes utilizando o CE, até 80 K os principais mecanismos de espalhamento que limitam a mobilidade são a impureza ionizada (μ_{ic}) e as discordâncias (μ_{dis}), sendo a primeira mais significativa no ajuste. Em alta temperatura, acima de 180 K, o mecanismo de espalhamento mais relevante para a definição da mobilidade passa a ser por fônons acústicos por potencial de deformação passa a contribuir mais do que os outros mecanismos para a determinação da mobilidade desta amostra.

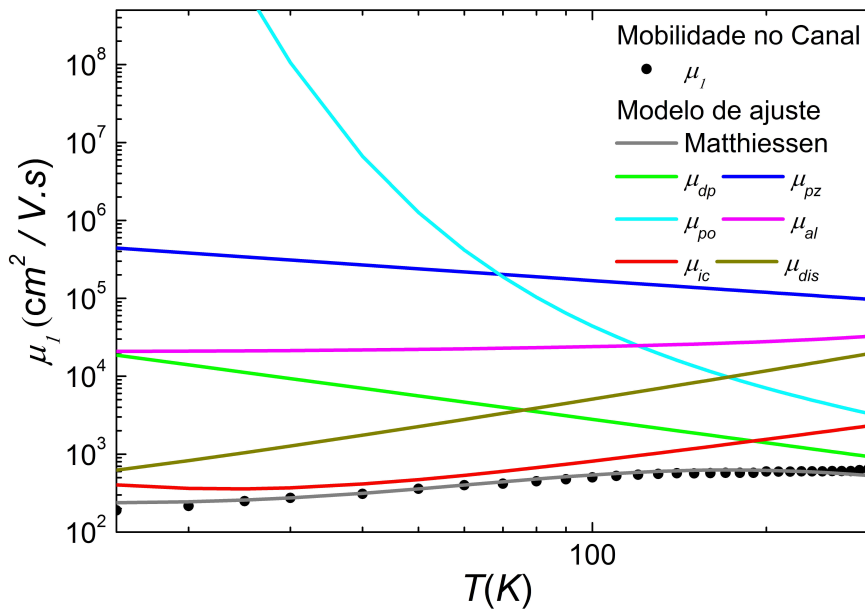


Figura 4.13: Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A4, no canal 1 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Mattheiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

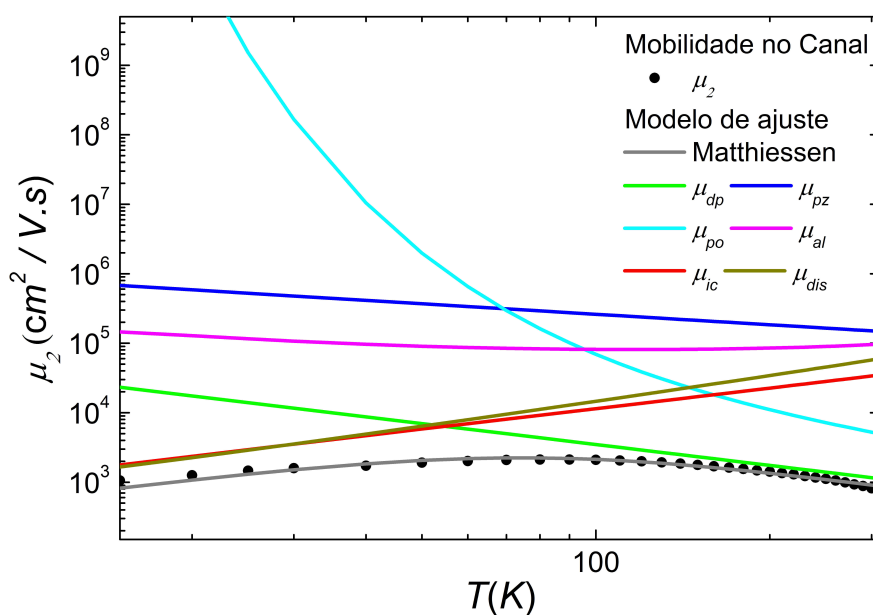


Figura 4.14: Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A4, no canal 2 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

Na Figura 4.14 também são apresentados os resultados do ajuste da mobilidade em função da temperatura para a amostra A4, porém para o canal 2. De acordo com os resultados dos ajustes utilizando o CE, em temperaturas abaixo de 60 K a mobilidade é limitada principalmente pelos espalhamentos por discordâncias (μ_{dis}) e por impurezas ionizadas (μ_{ic}), com uma contribuição secundária. Para temperaturas superiores a 60 K, a mobilidade começa a ser definida por fônons acústicos por potencial de deformação (μ_{dp}). Além disso, em torno de 160 K o espalhamento por fônons ópticos de modo polar (μ_{po}) passa a ser o segundo mecanismo de espalhamento mais importante na definição da mobilidade na amostra.

Na Figura 4.15 é apresentado o resultado do ajuste da mobilidade em função da temperatura utilizado o método de otimização global - CE para a amostra A5 no canal 1. De acordo com os resultados dos ajustes, até a temperatura de 140 K a mobilidade é limitada pelos mecanismos de espalhamento por impurezas ionizadas (μ_{ic}) e discordância (μ_{dis}). Entre as temperaturas de 150 K e 250 K a mobilidade é limitada principalmente por fônons acústicos por potencial de deformação (μ_{dp}) e secundariamente por impurezas ionizadas (μ_{ic}) e discordâncias (μ_{dis}). Acima de 250 K, continua a ser definida principalmente por fônons acústicos por potencial de deformação (μ_{dp}) e passa a ter uma contribuição secundária dos fônons ópticos de modo polar (μ_{po}).

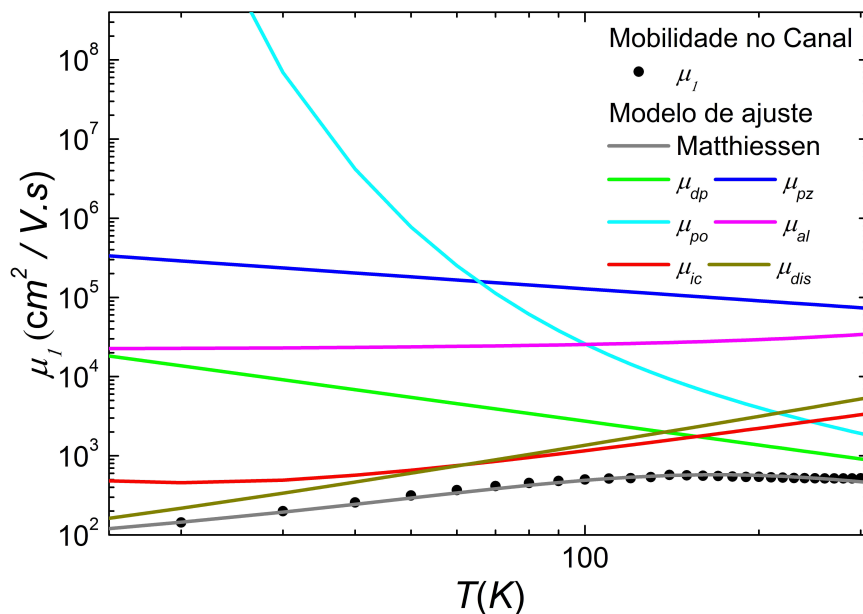


Figura 4.15: Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A5, no canal 1 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

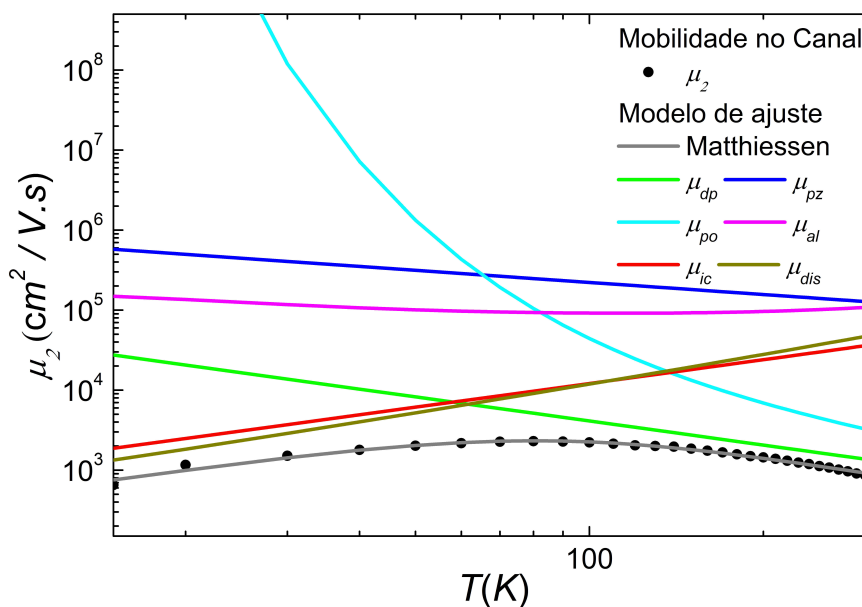


Figura 4.16: Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A5, no canal 2 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

Na Figura 4.16 é apresentado o resultado do ajuste da mobilidade em função da temperatura para o canal 2 da amostra A5. De acordo com os resultados dos ajustes utilizando o CE, analisando os principais mecanismos de espalhamento que limitam a mobilidade em termos da temperatura temos que para temperaturas abaixo de 60 K a amostra é dominada por espalhamentos por impurezas ionizadas (μ_{ic}) e discordâncias (μ_{dis}). Acima de 60 K a mobilidade torna-se limitada principalmente pelo espalhamento por fônons acústicos por potencial de deformação (μ_{dp}). Quando a temperatura sobre a amostra atinge 130 K o espalhamento por fônons ópticos de modo polar (μ_{dis}) aumenta sua contribuição na limitação da mobilidade eletrônica da amostra.

O resultado do ajuste da mobilidade em função da temperatura para o canal da amostra A6 é apresentado na Figura 4.17. Nota-se que os mecanismos de espalhamento por impurezas ionizadas (μ_{ic}) localizadas na interface e por discordâncias (μ_{dis}) são os principais limitantes da mobilidade até a temperatura de 100 K. Para temperaturas acima de 170 K a mobilidade passa a ser definida principalmente pelo espalhamento por fônons por potencial de deformação (μ_{dp}).

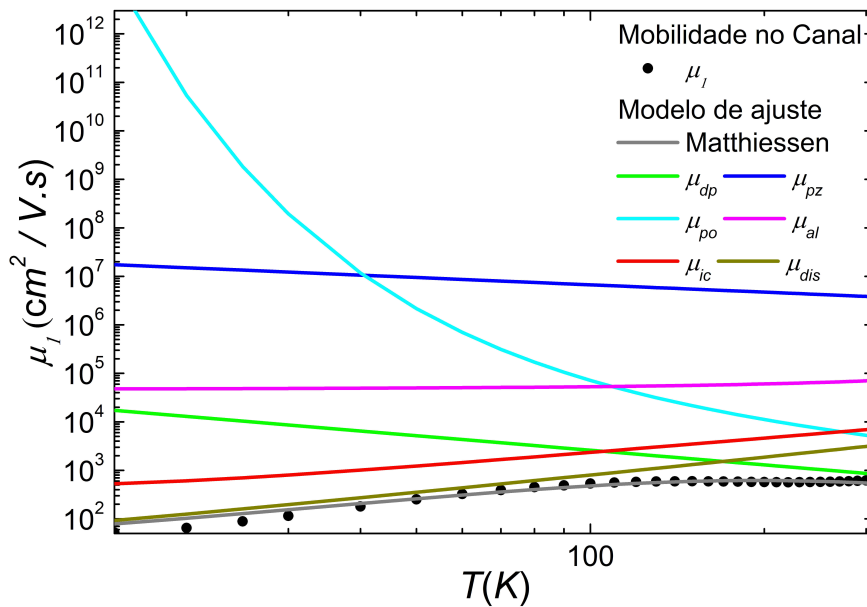


Figura 4.17: Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A6, no canal 1 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

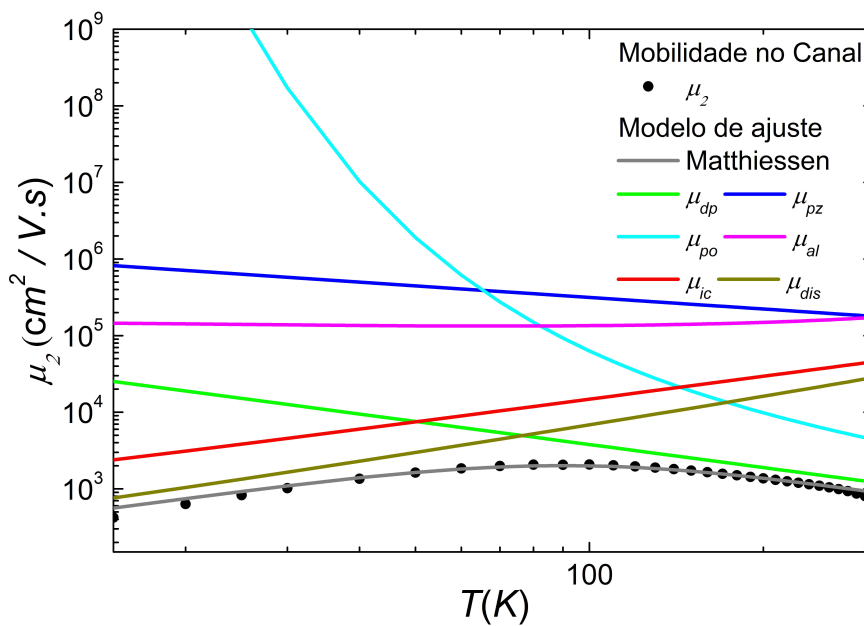


Figura 4.18: Resultados do ajuste obtidos pelo método CE para a amostra A6, no canal 2 em função da temperatura. Os dados experimentais são representados por pontos pretos e, a linha contínua cinza consiste na regra de Matthiessen aplicada aos mecanismos correspondendo às linhas coloridas. A tabela de cor representa a mobilidade característica dos mecanismos de espalhamentos analisados é apresentada no canto superior direito do gráfico, em que as siglas são apresentadas no Capítulo 1.

No gráfico apresentado na Figura 4.18 é mostrado o resultado do ajuste de mobilidade em função da temperatura, utilizando o CE, para a amostra A6 no canal 2. De acordo com os resultados dos ajustes os principais mecanismos de espalhamento que limitam a mobilidade em temperaturas abaixo de 50 K são por impurezas (μ_{ic}) localizadas na interface e por discordâncias (μ_{dis}). Acima de 80 K a mobilidade passa a ser definida por fônons acústicos por potencial de deformação (μ_{dp}) e secundariamente por fônons ópticos de modo polar (μ_{po}) para temperaturas acima de 170 K.

Para todos os ajustes apresentados anteriormente, o CE obteve parâmetros que descrevem informações físicas das amostras de InAs/GaAs estudadas neste trabalho. Nas Tabelas 4.1 e 4.2 são apresentados os principais parâmetros e incertezas obtidos através dos ajustes realizados pelo método de otimização global CE para os canais 1 e 2 respectivamente. Para melhor visualização estes parâmetros também são apresentados nas Figuras 4.19, 4.20 e 4.21. O canal 1 apresenta características de um canal de maior profundidade, ou seja, possui níveis de energia mais baixo. Sob esta análise, o canal 2 é um canal de sub-banda de energia mais elevada que o canal 1, isto é, o canal 1 está mais próximo da interface, enquanto o canal 2 está mais distante. Quanto mais próximo da interface, maior é a tensão na estrutura, pois a incompatibilidade na rede em uma heterointerface de InAs/GaAs é de aproximadamente 7% [56].

Além disso, o canal 2 é parcialmente blindado pelo canal 1 e, portanto, mais distante da interface, uma vez que o poço é triangular. Uma consequência deste fato é que o canal 2 é menos afetado pelo estresse na rede cristalina. Comparando as Tabelas 4.1 e 4.2, verifica-se que os parâmetros m^* , N_{ic} e N_{dis} são da mesma ordem para os dois canais, mas o canal 1 apresenta valores mais sensíveis as características construtivas das amostras apresentadas na Tabela 2.1, isto é, mais dependente do período da heteroestrutura, da cobertura de InAs e a espessura da camada espaçadora de GaAs.

Os valores obtidos através do ajuste da mobilidade em função da temperatura para as massas efetivas dos canais 1 e 2 são muito altos comparados com os valores encontrados para amostras de GaAs e InAs [57], como pode ser verificado na Figura 4.19 e ou na Tabela 4.2. Estas massas elevadas estão diretamente relacionadas com a tensão causada pela inadequação da estrutura entre as camadas de InAs/GaAs. O estresse uniaxial atua

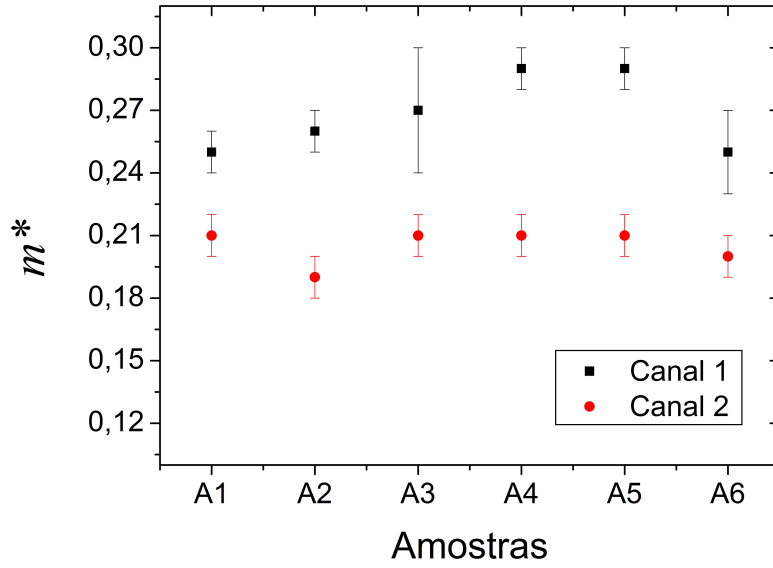


Figura 4.19: Massa efetiva obtida no ajuste das amostras de InAs/GaAs utilizando o método de otimização global - CE, os símbolos utilizados para os canais 1 e 2 são indicados na Figura.

na interface e decresce à medida que se afasta dela. Parte desta tensão pode ser relaxada causando efeitos tais como a formação de QD, discordâncias e defeitos pontuais. Parte da tensão não é relaxada e a contribuição residual vai agir sobre a estrutura de banda da camada formada na interface. Tal efeito tem uma ação equivalente a submeter a amostra a uma pressão elevada. Sabe-se que o efeito de pressão sobre semicondutores do grupo III-V, em particular para o GaAs e InAs, deforma a estrutura de banda causando uma redução na diferença de energia entre o vale Γ e os vales satélites L e X da banda de condução [58]. Com pressões suficientemente elevadas, por exemplo, o conhecido efeito Gunn [59] desaparece devido ao cancelamento da diferença de energia entre os vales $\Gamma - L$ [60]. Uma vez que a massa efetiva nos vales satélites é bem mais elevada do que a observada no vale Γ os resultados deste trabalho são consistentes com o estresse não relaxado alto o suficiente para induzir a coexistência ou mesmo um predomínio de portadores localizados nos vales satélites L e ou X .

Usando a lei de Hooke, podemos obter o estresse, σ , presente nas amostras devido a incompatibilidade nas constantes de rede.

$$\sigma = Y\epsilon \quad (4.1)$$

onde ϵ é a tensão na liga. Como pode ser verificado nos resultados apresentados nas Tabelas 4.1 e 4.2 a liga de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ formada nas amostras possui uma fração molar na liga, x , de aproximadamente 0,5. Para tal valor, temos que a tensão na liga é de aproximadamente 5.6×10^{-2} de acordo com os resultados obtidos por Das and Bhattacharya [14]. Para a liga de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, com $x = 0,5$ o módulo da constante de elasticidade Y é igual a 90 Gpa [61]. Com isso, foi possível estimar que a pressão residual é de 53,2 Kbar de pressão residual que é, de acordo com a literatura [62, 63], suficiente para cancelar a diferença de energia ente os vales Γ e L , tanto para o InAs (cerca de 48 kBar [62]) e o GaAs (cerca de 26 kbar [64]). Uma vez que estamos considerando que existe uma interdifusão suficiente de Ga na interface, obtendo uma fração molar, x , de 0,5 como é mostrado nos ajustes de espalhamento nas Tabelas 4.1 e 4.2 e representado no gráfico da Figura 4.20, temos que o desaparecimento do efeito Gunn associado com o cancelamento da energia intervale ocorrerá entre 26 e 48 kbar para esta liga. Assim, temos que a pressão esperada é acima deste intervalo exigido para que ocorra a coexistência ou mesmo um predomínio de portadores localizados nos vales satélites L e ou X , explicando os valores elevados para as massas efetivas das amostras analisadas.

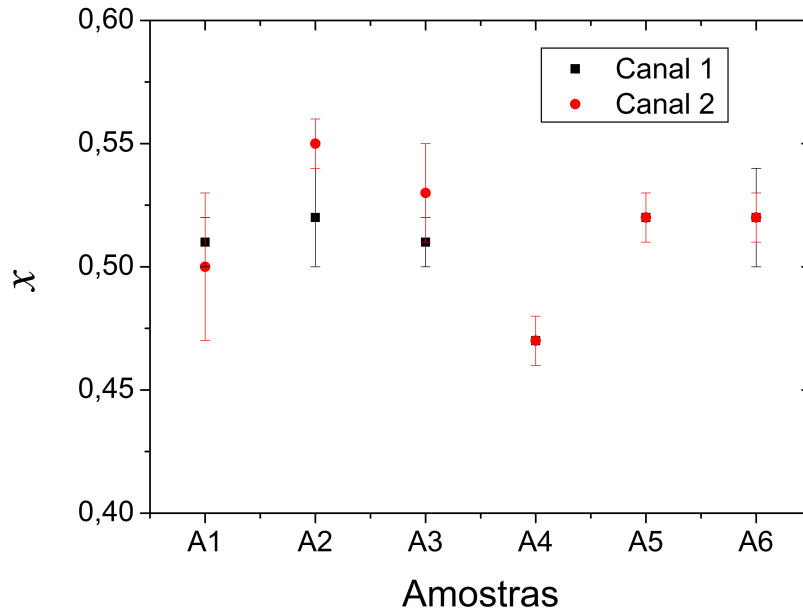


Figura 4.20: Fração molar da liga, x , obtida no ajuste das amostras de InAs/GaAs utilizando o método de otimização global - CE, os símbolos utilizados para os canais 1 e 2 são indicados na Figura.

Sob este cenário, através dos ajustes com o CE foram obtidos os valores acima de

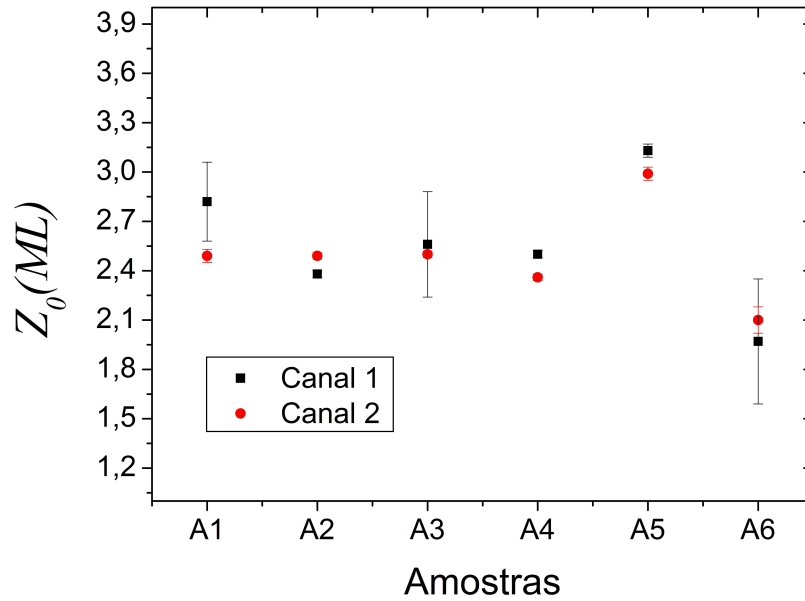


Figura 4.21: Largura do poço quântico, Z_0 , obtida no ajuste das amostras de InAs/GaAs utilizando o método de otimização global - CE, os símbolos utilizados para os canais 1 e 2 são indicados na Figura.

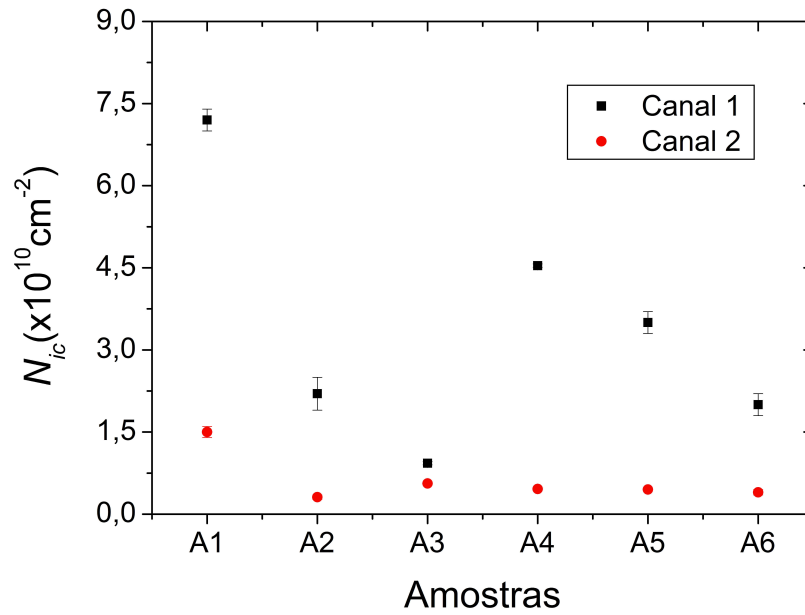


Figura 4.22: Densidade de impurezas no poço de potencial 2DEG devido às impurezas remotas e/ou na interface, N_{ic} , obtida no ajuste das amostras de InAs/GaAs utilizando o método de otimização global - CE, os símbolos utilizados para os canais 1 e 2 são indicados na Figura.

0,2. Para o canal 1 os valores estão entre 0,25 e 0,29 e para o canal 2 o método de ajuste obteve um valor em torno de 0,21. Considerando individualmente cada canal, não é possível associar as diferenças às características de crescimentos das amostras. Porém,

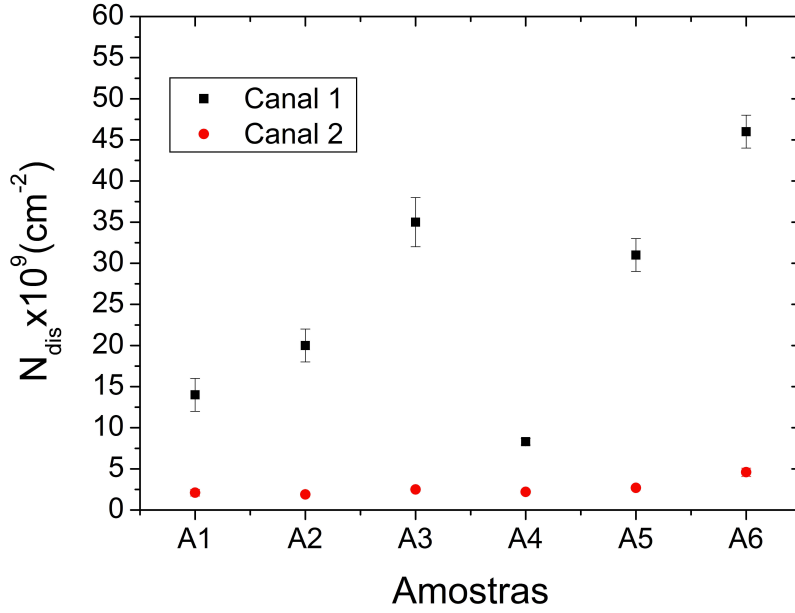


Figura 4.23: Densidade de discordâncias, N_{dis} , obtida no ajuste das amostras de InAs/GaAs utilizando o método de otimização global - CE, os símbolos utilizados para os canais 1 e 2 são indicados na Figura.

comparando ambos os canais, esta diferença pode estar relacionada com a dependência da tensão não relaxada com a direção de crescimentos. Ou seja, no poço de potencial aproximadamente triangular o canal 2 está localizado um pouco mais distante da interface do que o canal 1 e, assim, sujeito a um menor estresse e conseqüentemente uma menor pressão eficaz.

Tabela 4.1: Principais parâmetros obtidos no ajuste da mobilidade em função da temperatura no canal 1, utilizando o método de otimização CE.

Sample	m^*	x	Z_0 (ML)	N_{ic} $\times 10^{10}(\text{cm}^{-2})$	N_{dis} $\times 10^8(\text{cm}^{-2})$
A1	0,25±0,01	0,51±0,01	2,82±0,24	7,2±0,2	14±2
A2	0,26±0,01	0,52±0,02	2,38±0,02	2,2±0,3	20±2
A3	0,27±0,03	0,51±0,01	2,56±0,32	0,93±0,03	35±3
A4	0,29±0,01	0,47±0,01	2,50±0,02	4,54±0,03	8,1±0,4
A5	0,29±0,01	0,52±0,01	3,13±0,04	3,5±0,2	31±2
A6	0,25±0,02	0,52±0,02	1,97±0,38	2,0±0,2	46±2

A segunda coluna das Tabelas 4.1 e 4.2 são correlacionadas e correspondem, juntamente com a Figura 4.20, as composições das ligas x das amostras de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, juntamente com os erros estatísticos devido aos ajustes. Observa-se que a composição do poço varia entre 0,47 e 0,52 para o canal 1 e entre 0,47 e 0,55 para o canal 2. Flutuações

entre os valores da composição da liga x para uma mesma amostra estão relacionados com erros estatísticos.

O parâmetro temperatura de fônon ótico θ_{po} está relacionado com o parâmetro de composição da liga x pela relação

$$\theta_{po} = (420 - 107x) \quad (4.2)$$

a temperatura de fônon ótico variou entre 364 K e 369 K para o canal 1 e entre 361 K e 369 K para o canal 2. Como foi verificado nos ajustes no canal 2 tem uma maior papel nos ajustes de mobilidade, sendo este um importante parâmetro neste canal.

Tabela 4.2: Principais parâmetros obtidos no ajuste da mobilidade em função da temperatura no canal 2, utilizando o método de otimização CE.

Sample	m^*	x	Z_0 (ML)	N_{ic} $\times 10^{10}(\text{cm}^{-2})$	N_{dis} $\times 10^8(\text{cm}^{-2})$
A1	$0,21 \pm 0,01$	$0,50 \pm 0,03$	$2,49 \pm 0,04$	$1,5 \pm 0,1$	$2,1 \pm 0,4$
A2	$0,19 \pm 0,01$	$0,55 \pm 0,01$	$2,49 \pm 0,02$	$0,31 \pm 0,04$	$1,9 \pm 0,1$
A3	$0,21 \pm 0,01$	$0,53 \pm 0,02$	$2,50 \pm 0,02$	$0,56 \pm 0,02$	$2,5 \pm 0,2$
A4	$0,21 \pm 0,01$	$0,47 \pm 0,01$	$2,36 \pm 0,02$	$0,46 \pm 0,02$	$2,2 \pm 0,2$
A5	$0,21 \pm 0,01$	$0,52 \pm 0,02$	$2,99 \pm 0,04$	$0,45 \pm 0,02$	$2,7 \pm 0,2$
A6	$0,20 \pm 0,01$	$0,52 \pm 0,04$	$2,10 \pm 0,08$	$0,40 \pm 0,05$	$4,6 \pm 0,5$

As larguras dos poços Z_0 das amostras, juntamente com os erros estatísticos, são apresentados na quarta coluna das Tabelas 4.1 e 4.2 e também na Figura 4.21 em termos de ML de InAs. Este parâmetro é utilizado no ajuste das mobilidades devido ao espalhamento por fônons óticos de modo polar e fônons acústicos por potencial de deformação. Os valores obtidos nos ajustes são maiores do que os valores nominal apresentados na Tabela 2.1. Este é outro resultado que sugere uma interdifusão de Gálio e Índio que ocorreu provocando uma extensão do perfil.

Nas duas últimas colunas são apresentados os parâmetros N_{ic} e N_{dis} juntamente com as incertezas obtidas através do *Bootstrap*. Estes parâmetros de ajuste, juntamente com a massa efetiva, definem os principais mecanismos de espalhamento dominantes em baixas temperaturas, ou seja, os espalhamentos por impurezas ionizadas e por discordâncias. Além disso, os parâmetros N_{ic} e N_{dis} estão relacionados a outras formas de estresse e

relaxamento da rede e a formação de QD. A amostra A1 é a que possui a maior densidade de impurezas no poço de potencial 2DEG devido às impurezas remotas e/ou na interface, provavelmente devido a estados de superfície, uma vez que o poço quântico está localizado na superfície da amostra. Com o aumento do número de camadas nas amostras de 1 a 10, ocorre um aumento na densidade de cargas nas discordâncias N_{dis} e uma redução na densidade de impurezas no poço N_{ic} . Observa-se também, um aumento da densidade de impurezas associada com a redução da densidade de cargas nas discordâncias para a amostra A4 em comparação com a amostra A3. Para as amostras A5 e A6, a densidade de impurezas reduz e a densidade de cargas nas discordâncias aumenta. A principal característica é que as alterações nas densidades de cargas nas discordâncias e de impurezas ocorrem em sentidos opostos para o canal 1. A amostra A6, possui a característica de ter uma camada de InAs mais fina e a relaxação da tensão não provoca o surgimento de QD, que pode ter causado um aumento na densidade de cargas de discordâncias. O canal 2 possui uma ordem de magnitude inferior nos valores das duas densidades. Este é um resultado razoável, uma vez que os portadores de carga do canal 1 atuam como uma blindagem para o poço de potencial coulombiano formado na interface.

Conclusões e Perspectivas Futuras

O CE foi efetivo e robusto ao identificar os principais mecanismos de espalhamento em um conjunto de amostras extremamente complicados, com variação no número de interfaces, e espaçadores. Os resultados dos ajustes obtidos pelo CE foram importantes para desvendar mecanismos de espalhamento associados com os portadores de carga nas amostras investigadas de InAs/GaAs. Um resultado importante foi o alto valor de massa efetiva indicando que este tipo de amostra apresenta tensões na rede cristalina que não podem ser negligenciadas, pois provocam uma significativa transferência de momento proporcionando um baixo valor de mobilidade nas características elétricas das amostras. Além disso, foi possível verificar que para camadas muito finas de InAs a composição não é mantida intacta, ocorrendo a formação de ligas, e o perfil do poço é estendido. O perfil desta liga é altamente difundido, formando cargas na interface como defeitos pontuais e discordâncias, que causam o espalhamento por cargas, sendo, portanto, um dos mecanismos dominante em baixas temperaturas. Em altas temperaturas, os mecanismos de espalhamento mais importantes são por fônons. Uma vez que os fônons ópticos tem uma dependência significativa com a massa efetiva, a transferência de elétrons de momento tem grande impacto sobre a mobilidade destes portadores. Tais características tornam o InAs/GaAs menos adequado para aplicação em dispositivos eletrônicos do que para dispositivos ópticos. No entanto, uma vez que a mobilidade dos portadores parece ser muito sensível a variações das tensões na rede, os resultados do CE podem servir como fonte de informação acerca das densidades de impurezas e discordâncias. Além disso, o CE em conjunto com tratamentos térmicos e ou alterações nas composições ou outras características de crescimento podem ser utilizadas para melhorar tanto as características ópticas quanto as elétricas das amostras.

O CE tem grande potencial para o ajuste de mobilidade e nosso grupo já possui uma versão para ajustes em amostras bulk (tridimensionais). Com isso, pretendemos obter amostras com estas características e mais amostras bidimensionais para realizar as medidas Hall pela técnica de van der Pauw e utilizar os dados obtidos para a caracterização elétrica destas amostras. Tal caracterização vai permitir adequar o crescimento das amostras para a obtenção de melhores e novos dispositivos eletrônicos.

Bibliografia

- [1] A. Liu, R. Herrick, O. Ueda, P. Petroff, A. Gossard, and J. Bowers, “Reliability of InAs/GaAs quantum dot lasers epitaxially grown on silicon,” *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 21, pp. 1–8, Nov 2015.
- [2] A. U. Perera, Y.-F. Lao, S. Wolde, Y. Zhang, T. Wang, J. Kim, T. Schuler-Sandy, Z.-B. Tian, and S. Krishna, “InAs/GaAs quantum dot and dots-in-well infrared photodetectors based on p-type valence-band intersublevel transitions,” *Infrared Physics & Technology*, vol. 70, pp. 15 – 19, 2015. Proceedings of International Conference on Quantum Structures Infrared Photodetectors, 2014.
- [3] I. Saidi, H. Mejri, M. Baira, and H. Maaref, “Electronic and transport properties of AlInN/AlN/GaN high electron mobility transistors,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 84, pp. 113 – 125, 2015.
- [4] A. Lee, Q. Jiang, M. Tang, Y. Zhang, A. Seeds, and H. Liu, “InAs/GaAs quantum-dot lasers monolithically grown on Si, Ge, and Ge-on-Si substrates,” *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 19, pp. 1901107–1901107, July 2013.
- [5] M. Zieliski, K. Goasa, M. R. Molas, M. Goryca, T. Kazimierzuk, T. Smoleski, A. Golnik, P. Kossacki, A. A. L. Nicolet, M. Potemski, Z. R. Wasilewski, and A. Babiński, “Excitonic complexes in natural InAs/GaAs quantum dots,” *Phys. Rev. B*, vol. 91, p. 085303, Feb 2015.
- [6] J. C. Thomas, J. M. Millunchick, A. Van der Ven, and N. A. Modine, “Phase stability analysis of the InAs/GaAs (001) wetting layer from first principles,” *Phys. Rev. B*, vol. 89, p. 205306, May 2014.

- [7] E. Bottcher, T. Pirk, H. Pfitzenmaier, F. Heinrichsdorff, and D. Bimberg, “InAs/GaAs quantum dots: a material for very highspeed, long-wavelength photodetectors on GaAs,” in *Indium Phosphide and Related Materials, 1999. IPRM. 1999 Eleventh International Conference on*, pp. 327–332, 1999.
- [8] P. M. Lam, J. Wu, S. Hatch, D. Kim, M. Tang, H. Liu, J. Wilson, and R. Allison, “Effect of rapid thermal annealing on InAs/GaAs quantum dot solar cells,” *Optoelectronics, IET*, vol. 9, no. 2, pp. 65–68, 2015.
- [9] T. Nozawa, H. Takagi, K. Watanabe, and Y. Arakawa, “Direct observation of two-step photon absorption in an InAs/GaAs single quantum dot for the operation of intermediate-band solar cells,” *Nano Letters*, vol. 15, no. 7, pp. 4483–4487, 2015. PMID: 26099362.
- [10] K. W. Park, S. J. Kang, S. Ravindran, J. W. Min, S. K. Lee, and Y. T. Lee, “Growth optimization of InAs/GaAs quantum dots and performance enhancement of a GaAs tunnel diode by embedding quantum dots for solar cell application,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. 30, no. 7, p. 075008, 2015.
- [11] P. Lam, J. Wu, M. Tang, Q. Jiang, S. Hatch, R. Beanland, J. Wilson, R. Allison, and H. Liu, “Submonolayer InGaAs/GaAs quantum dot solar cells,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 126, no. 0, pp. 83 – 87, 2014.
- [12] N. Beattie, G. Zoppi, P. See, I. Farrer, M. Duchamp, D. Morrison, R. Miles, and D. Ritchie, “Analysis of InAs/GaAs quantum dot solar cells using suns-voc measurements,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 130, no. 0, pp. 241 – 245, 2014.
- [13] J. Tatebayashi, N. Nuntawong, P. S. Wong, Y.-C. Xin, L. F. Lester, and D. L. Huffaker, “Strain compensation technique in self-assembled InAs/GaAs quantum dots for applications to photonic devices,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 42, no. 7, p. 073002, 2009.

- [14] U. Das and P. K. Bhattacharya, “Variation of refractive index in strained $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ heterostructures,” *Journal of Applied Physics*, vol. 58, no. 1, 1985.
- [15] A. Peaker and H. Grimmeiss, *Low-Dimensional Structures in Semiconductors: From Basic Physics to Applications*. Nato Science Series B:, Springer US, 2013.
- [16] M. Dutta and M. Stroschio, *Advanced Semiconductor Heterostructures: Novel Devices, Potential Device Applications and Basic Properties*. Selected topics in electronics and systems, World Scientific, 2003.
- [17] A. G. d. O. M. V. Baeta Moreira and M. A. Py, “Higher mobility of charge carriers in InAs/GaAs superlattices through the elimination of InGaAs alloy disorders on GaAs,” *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 13, no. 2064, 1995.
- [18] J. Wu and P. Jin, “Self-assembly of InAs quantum dots on GaAs(001) by molecular beam epitaxy,” *Frontiers of Physics*, vol. 10, no. 1, pp. 7–58, 2015.
- [19] J. Treu, T. Stettner, M. Watzinger, S. Morkatter, M. Dablinger, S. Matich, K. Saller, M. Bichler, G. Abstreiter, J. J. Finley, J. Stangl, and G. Koblmaller, “Lattice-matched InGaAs-InAlAs core-shell nanowires with improved luminescence and photoresponse properties,” *Nano Letters*, vol. 15, no. 5, pp. 3533–3540, 2015. PMID: 25922974.
- [20] T. Rieger, D. Grutzmacher, and M. I. Lepsa, “Misfit dislocation free InAs/GaSb core-shell nanowires grown by molecular beam epitaxy,” *Nanoscale*, vol. 7, pp. 356–364, 2015.
- [21] R. Rubinger, G. Ribeiro, A. d. Oliveira, H. Albuquerque, R. d. Silva, W. Rodrigues, and M. Moreira, “Hall effect in InAs/GaAs superlattices with quantum dots: identifying the presence of deep level defects,” *Brazilian Journal of Physics*, vol. 34, pp. 626 – 628, 06 2004.
- [22] J. C. González, F. M. Matinaga, W. N. Rodrigues, M. V. B. Moreira, A. G. de Oliveira, M. I. N. da Silva, J. M. C. Vilela, M. S. Andrade, D. Ugarte, and P. C. Silva,

- “On three dimensional self-organization and optical properties of InAs quantum-dot multilayers,” *Applied Physics Letters*, vol. 76, no. 23, pp. 3400–3402, 2000.
- [23] A. F. Oliveira, R. M. Rubinger, M. H., C. P. L. Rubinger, G. M. Ribeiro, and A. G. de Oliveira, “Main scattering mechanisms in [inas/gaas] multi-quantum-well: a new approach by the global optimization method,” *Journal of Materials Science*, pp. 1–11, 2015.
- [24] N. Ashcroft and N. Mermin, *Solid state physics*. Science: Physics, Saunders College, 1976.
- [25] S. Sze, *Semiconductor Devices: Physics and Technology*. John Wiley & Sons, Limited, 2012.
- [26] M. Grundmann, *The physics of semiconductors : an introduction including nanophysics and applications*. Graduate texts in physics, Berlin ;: Springer-Verlag, 2nd ed. ed., 2010.
- [27] S. Rezende, *Materiais e Dispositivos Eletrônicos*. Editora Livraria da Física, 2004.
- [28] D. Look, *Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices*. Wiley, 1992.
- [29] C. Wolfe, N. Holonyak, and G. Stillman, *Physical properties of semiconductors*. Solid state physical electronics series, Prentice Hall, 1989.
- [30] K. Hirakawa and H. Sakaki, “Mobility of the two-dimensional electron gas at selectively doped n -type $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ heterojunctions with controlled electron concentrations,” *Phys. Rev. B*, vol. 33, pp. 8291–8303, Jun 1986.
- [31] S. B. Lisesivdin, S. Acar, M. Kasap, S. Ozcelik, S. Gokden, and E. Ozbay, “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*, vol. 22, no. 5, p. 543, 2007.
- [32] H. Eshghi and M. Mootabian, “A quantitative study on the effect of nitrogen concentration on two-dimensional electron gas (2DEG) mobility in a dilute nitride Ga-

- AsN/AlGaAs heterostructure,” *Solid State Communications*, vol. 151, no. 1, pp. 80–83, 2011.
- [33] K. Hess, “Impurity and phonon scattering in layered structures,” *Applied Physics Letters*, vol. 35, no. 7, pp. 484–486, 1979.
- [34] F. Stern and W. E. Howard, “Properties of semiconductor surface inversion layers in the electric quantum limit,” *Phys. Rev.*, vol. 163, pp. 816–835, Nov 1967.
- [35] K. J. Kuhn and B. Darling, “Mobility of strained and dislocated $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ semiconductor material,” *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 39, pp. 1288–1294, Jun 1992.
- [36] A. F. Marshall, D. B. Aubertine, W. D. Nix, and P. C. McIntyre, “Misfit dislocation dissociation and Lomer formation in low mismatch SiGe/Si heterostructures,” *Journal of Materials Research*, vol. 20, pp. 447–455, 2005.
- [37] A. E. Romanov, W. Pompe, G. Beltz, and J. S. Speck, “Modeling of threading dislocation density reduction in heteroepitaxial layers i. geometry and crystallography,” *physica status solidi (b)*, vol. 198, no. 2, pp. 599–613, 1996.
- [38] E. Fitzgerald, “Dislocations in strained-layer epitaxy: theory, experiment, and applications,” *Materials Science Reports*, vol. 7, no. 3, pp. 87–142, 1991.
- [39] S. B. Lisesivdin, A. Yildiz, N. Balkan, M. Kasap, S. Ozcelik, and E. Ozbay, “Scattering analysis of two-dimensional electrons in AlGaIn/GaN with bulk related parameters extracted by simple parallel conduction extraction method,” *Journal of Applied Physics*, vol. 108, no. 1, pp. –, 2010.
- [40] K. Masu, E. Tokumitsu, M. Konagai, and K. Takahashi, “Alloy scattering potential in p-type $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$,” *Journal of Applied Physics*, vol. 54, no. 10, pp. 5785–5792, 1983.
- [41] P. Price, “Two-dimensional electron transport in semiconductor layers. i. phonon scattering,” *Annals of Physics*, vol. 133, no. 2, pp. 217–239, 1981.

- [42] D. C. Look, D. K. Lorance, J. R. Sizelove, C. E. Stutz, K. R. Evans, and D. W. Whitson, “Alloy scattering in p-type $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$,” *Journal of Applied Physics*, vol. 71, no. 1, pp. 260–266, 1992.
- [43] M. J. Kearney and A. I. Horrell, “The effect of alloy scattering on the mobility of holes in a quantum well,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. 13, no. 2, p. 174, 1998.
- [44] B. Efron and R. Tibshirani, *An Introduction to the Bootstrap*. Chapman & Hall/CRC Monographs on Statistics & Applied Probability, Taylor & Francis, 1994.
- [45] J. Tsao, *Materials Fundamentals of Molecular Beam Epitaxy*. Elsevier Science, 2012.
- [46] S. Li, *Semiconductor Physical Electronics*. Microdevices : Physics and Fabrication Technologies, Springer, 1993.
- [47] R. Chwang, B. Smith, and C. Crowell, “Contact size effects on the van der pauw method for resistivity and hall coefficient measurement,” *Solid-State Electronics*, vol. 17, no. 12, pp. 1217 – 1227, 1974.
- [48] J. Corrêa, A. de Oliverira, M. da Silva, M. Moreira, G. Ribeiro, and H. Chacham, “Temperature dependence of the equilibrium hall concentration in silicon planar-doped GaAs samples,” *Solid State Communications*, vol. 98, no. 12, pp. 1063 – 1068, 1996.
- [49] R. Y. Rubinstein, “Optimization of computer simulation models with rare events,” *European Journal of Operations Research*, vol. 99, pp. 89–112, 1996.
- [50] H. Monteiro, W. S. Dias, and T. C. Caetano, “Fitting isochrones to open cluster photometric data. A new global optimization tool,” *A&A*, vol. 516, p. A2, June 2010.
- [51] A. F. Oliveira, H. Monteiro, W. S. Dias, and T. C. Caetano, “Fitting isochrones to open cluster photometric data. III. Estimating metallicities from UVB photometry,” *A&A*, vol. 557, p. A14, Sept. 2013.

- [52] R. Y. Rubinstein and D. P. Kroese, *The Cross-Entropy Method: A Unified Approach to Combinatorial Optimization, Monte-Carlo Simulation and Machine Learning (Information Science and Statistics)*. Springer, 1 ed., July 2004.
- [53] W. S. Dias, H. Monteiro, T. C. Caetano, and A. F. Oliveira, “Fitting isochrones to open cluster photometric data. II. Nonparametric open cluster membership likelihood estimation and its application in optical and 2MASS near-IR data,” *A&A*, vol. 539, p. A125, Mar. 2012.
- [54] T. Caetano, W. Dias, J. Lepine, H. Monteiro, A. Moitinho, G. Hickel, and A. Oliveira, “The {OPD} photometric survey of open clusters i. techniques, program details and first results of robust determination of the fundamental parameters,” *New Astronomy*, vol. 38, pp. 31 – 49, 2015.
- [55] B. Efron, “Better bootstrap confidence intervals,” *Journal of the American Statistical Association*, vol. 82, no. 397, pp. pp. 171–185, 1987.
- [56] F. Heinrichsdorff, M.-H. Mao, N. Kirstaedter, A. Krost, D. Bimberg, A. O. Kosogov, and P. Werner, “Room-temperature continuous-wave lasing from stacked InAs/GaAs quantum dots grown by metalorganic chemical vapor deposition,” *Applied Physics Letters*, vol. 71, no. 1, pp. 22–24, 1997.
- [57] S.-S. Li, J.-B. Xia, Z. L. Yuan, Z. Y. Xu, W. Ge, X. R. Wang, Y. Wang, J. Wang, and L. L. Chang, “Effective-mass theory for InAs/GaAs strained coupled quantum dots,” *Phys. Rev. B*, vol. 54, pp. 11575–11581, Oct 1996.
- [58] J. Woodhead, F. G. Sanz, P. A. Claxton, and J. P. R. David, “On the band gap of InGaAs/GaAs strained quantum wells,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. 3, no. 6, p. 601, 1988.
- [59] J. Gunn, “Microwave oscillations of current in III-V semiconductors,” *Solid State Communications*, vol. 1, no. 4, pp. 88 – 91, 1963.
- [60] J. E. Smith and D. L. Camphausen, “Gunn effect in InAs under hydrostatic pressure,” *Journal of Applied Physics*, vol. 42, no. 5, pp. 2064–2067, 1971.

- [61] S. Korte, I. Farrer, and W. J. Clegg, “Elastic and plastic properties of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 41, no. 20, p. 205406, 2008.
- [62] C. Pickering, A. Adams, and G. Pitt, “The effect of pressure on impact ionisation and the gunn effect in InAs,” *Solid State Communications*, vol. 16, no. 12, pp. 1359 – 1363, 1975.
- [63] R. A. Burnstein, G. A. Snow, and H. Whiteside, “Absorption time of negative σ hyperons in liquid hydrogen,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 15, pp. 639–641, Oct 1965.
- [64] A. R. Hutson, A. Jayaraman, A. G. Chynoweth, A. S. Coriell, and W. L. Feldman, “Mechanism of the Gunn Effect from a pressure experiment,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 14, pp. 639–641, Apr 1965.

Anexo A - Estrutura das amostras

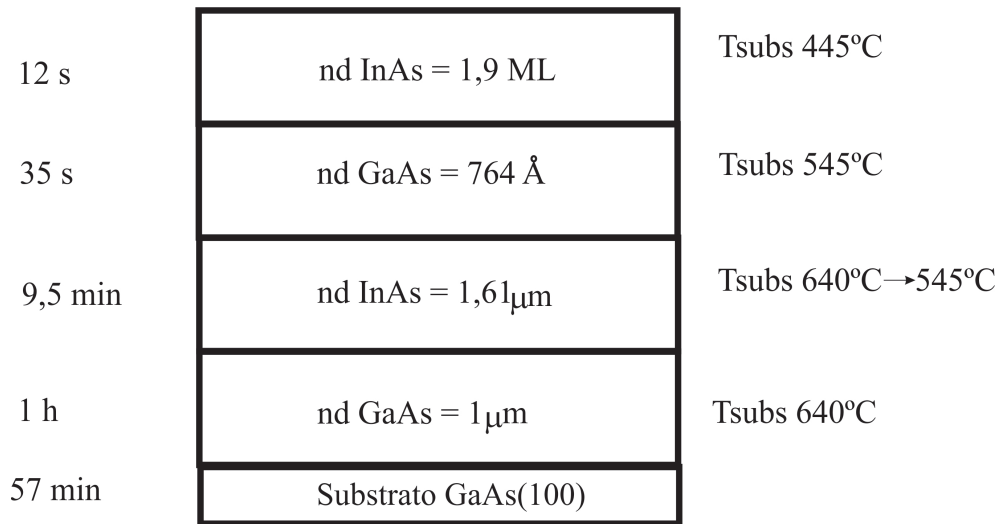


Figura A1: Mapa de crescimento da amostra A1

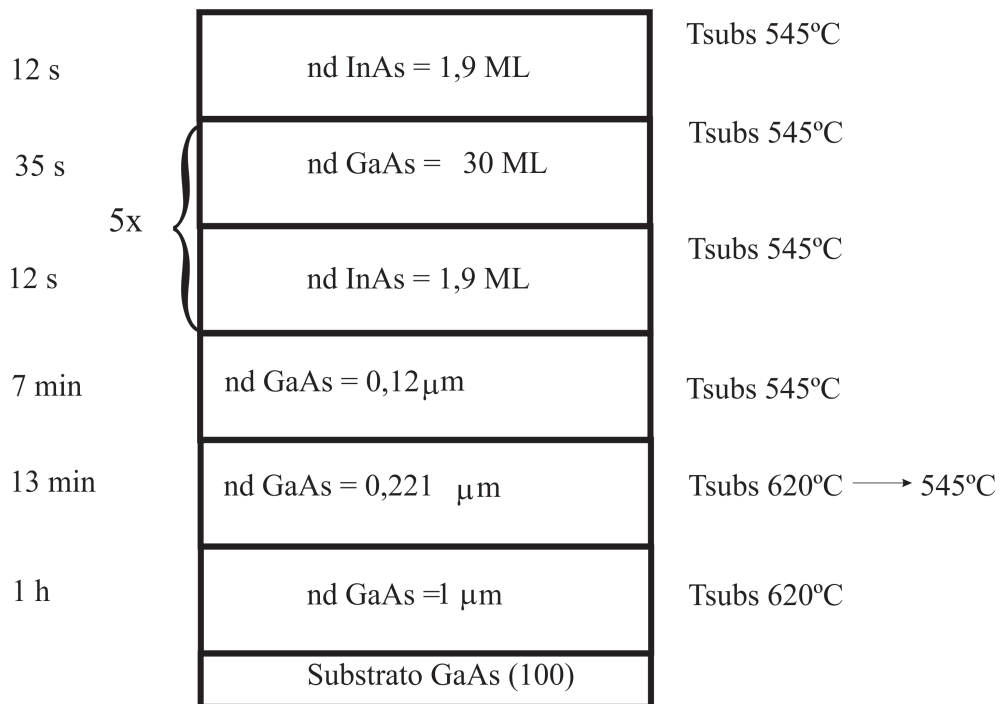


Figura A2: Mapa de crescimento da amostra A2

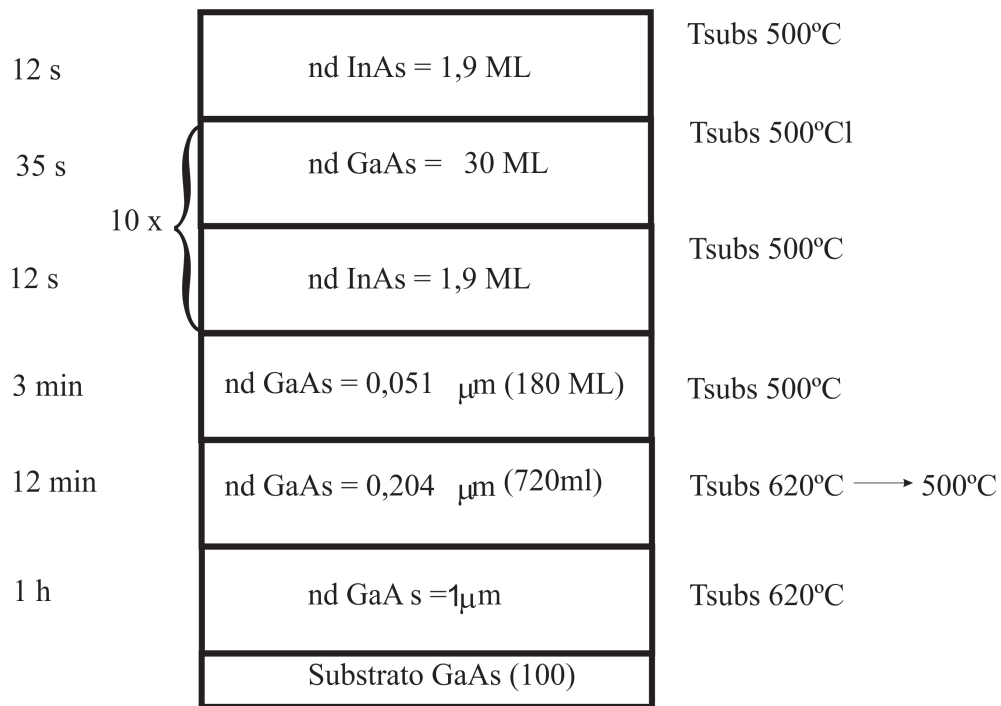


Figura A3: Mapa de crescimento da amostra A3

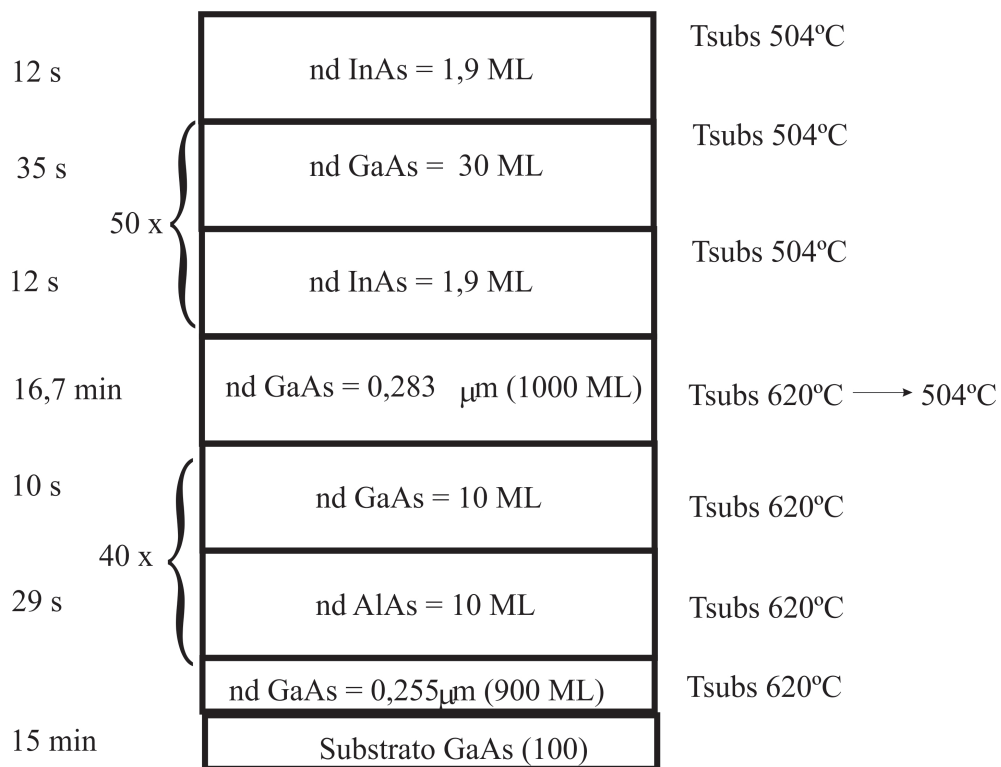


Figura A4: Mapa de crescimento da amostra A4

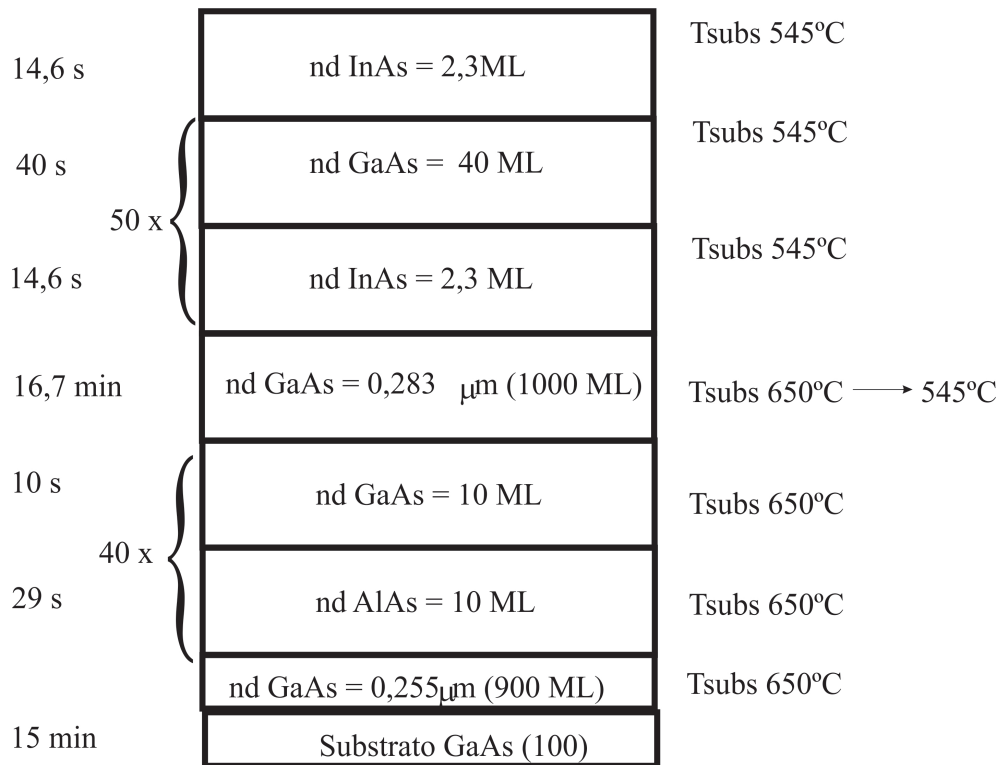


Figura A5: Mapa de crescimento da amostra A5

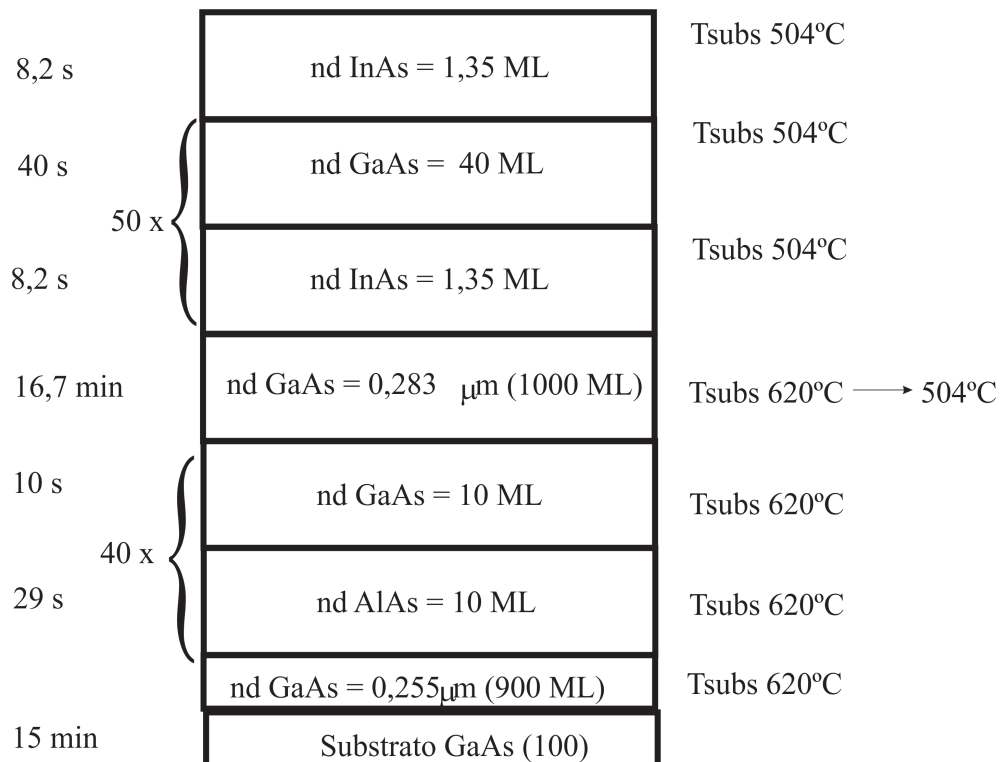


Figura A6: Mapa de crescimento da amostra A6

Anexo B - Algoritmo de Otimização

```
pro ce_mob_2deg
loadct,39
device, decomposed = 0
init_consts
common constantes
!p.multi=0
dir = dir('/home/adhimar/Dropbox/Doutorado/CE_MOB/DATA_SEP_1')
;
Likelihood = 0b ; 1b likelihood, 0b Chi quadrado
mu_1 = 1b ; 1b = m1 e 0b = m2
limited = 1b ; limita a solução entre os parâmetros
oferecidos
itmax = 300. ; número máximo de interações
alfa = 0.2 ; fator de mistura (velocidade de
convergencia)
do_boot = 1b ; tratamento numérico de erros
do_plot = 1b ; plot
nruns = 2500. ; numero de vezes consecutivas para rodar
(usar pra fazer estatistica dos erros)
n_ent = 1000. ; número de entes para cada iteração
Nel = 0.1*n_ent ; fração de melhores soluções para tomar
residuo = 20. ; média do resíduo no ajuste
;
file = dir+ 'DATA' + path_sep() + 'BH9826_mod_2.sav'
;
name = remove_sufix(file)
print, '
print, ' >>>> ', name, ' <<<<'
print, '
;
restore, file ; dados.t, dados.n, dados.m
;
if ~file_test(dir + 'Outputs_n' + path_sep(), /directory) then
file_mkdir, dir + 'Outputs_n' + path_sep()
file_out = dir + 'Outputs_n' + path_sep() + name + '_LOG.txt'
;
rho = [5.0d, 5.7d ] ;g/cm^3 the density of crystal
ul = [4.5d5, 5.2d5] ;cm/s the longitudinal acoustic phonon
velocity
ed = [6.0d , 10.d] ;eV deformation potential constant
mef = [0.02d, 0.4d] ;electron effective mass
```

```

h14      = [1.0d7, 1.0d9]      ;the piezoeletric constant
ut       = [2.0d5, 3.0d5]      ;the velocity of transverse acoustic
phonons
epsylon_inf = [10.8d, 12.5d]    ;hight frequency dielectric constant
epsylon    = [12.9d, 15.3d]    ;cm/s low-frequency dielectric constant
x         = [0.5d, 0.6d]      ;is the alloy mole fraction
ll        = [1.9d, 3.0d]      ;the width of the quantum well
nb        = [1.d7, 1.d11]     ;is the 2D impurity density in the
potential well due background impurities and or interface charge
ndis     = [1.d7, 1.0d10]    ;is the 2D dislocation density in cm^-2
;
prange = [[rho[0],          rho[1]],          $
          [ul[0],          ul[1] ],          $
          [ed[0],          ed[1] ],          $
          [mef[0],         mef[1]],          $
          [h14[0],         h14[1]],          $
          [ut[0],          ut[1] ],          $
          [epsylon_inf[0], epsylon_inf[1]],   $
          [epsylon[0],     epsylon[1]],      $
          [x[0],           x[1]],           $
          [ll[0],          ll[1]],          $
          [nb[0],          nb[1]],          $
          [ndis[0],        ndis[1]]]
;
sz = size(prange)
if do_boot then begin
  runs = nruns
  a = dblarr(runs, sz[2])
endif else begin
  runs = 1.
  a = dblarr(runs, sz[2])
endelse
;
for i=0, runs-1 do begin
;gera uma nova amostra com recolocação
print, i
  if (do_boot and i ge 1) then begin
    ind = round((n_elements(dados.t) -
1)*randomu(s, n_elements(dados.t)))
    tt1 = dados.t[ind]
    mul = dados.m[ind]
    nn1 = dados.n[ind]
  endif else begin
    tt1 = dados.t
    mul = dados.m
    nn1 = dados.n
  endelse
  order = sort(tt1)
  tt1 = tt1[order]
  mul = mul[order]
  nn1 = nn1[order]
;
  a[i,*] = ce(prange, residuo, itmax, {t:tt1, n:nn1, m:mul}, n_ent,
nel, alfa, Likelihood = Likelihood, do_plot = do_plot, limited =
limited)
endfor
a el = median(a[*,*])

```

```

openw, lun, file_out, /get_lun, /append
printf, lun, '-----'
--'
printf, lun, ''
printf, lun, SYSTIME()
printf, lun, 'object = ', name
printf, lun, '-----'
--'
printf, lun, 'rho          =', rho, 'g/cm^3 the density of crystal'
printf, lun, 'ul           =', ul, 'cm/s the longitudinal acoustic phonon
velocity'
printf, lun, 'ed           =', ed, 'eV deformation potential constant'
printf, lun, 'm_ef          =', mef, 'electron effective mass'
printf, lun, 'hl4           =', hl4, 'the piezoelectric constant'
printf, lun, 'ut           =', ut, 'the velocity of transverse acoustic
phonons '
printf, lun, 'epsylon_inf =', epsylon_inf, 'hight frequency dielectric
constant'
printf, lun, 'epsylon       =', epsylon, 'low-frequency dielectric
constant'
printf, lun, 'x           =', x, 'is the alloy mole fraction'
printf, lun, 'L           =', ll, 'the width of the quantum well '
printf, lun, 'Nib          =', nb, 'is the 2D impurity density in the
potential well due background impurities and or interface charge'
printf, lun, 'Ndis         =', ndis, 'is the 2D dislocation density in
cm^-2'
printf, lun, 'itmax        =', itmax, 'Maximum number of interactions'
printf, lun, 'alfa          =', alfa, 'mixing factor changes the
convergence speed'
printf, lun, 'do_boot       =', do_boot, 'bootstrap or not'
printf, lun, 'nrüns         =', nrüns, 'number of times is rotated the
bootstrap'
printf, lun, 'N            =', n_ent, 'number of elements in each sample
set'
printf, lun, 'Nel          =', Nel, 'percentage of the best elements
chosen due to established criteria'
printf, lun, 'residuo       =', residuo, 'stop condition of the program'
;
printf, lun, '-----'
--'
printf, lun, 'rho          =', a_el[0], ' +/-', ROBUST_SIGMA(a[* ,0])
printf, lun, 'ul           =', a_el[1], ' +/-', ROBUST_SIGMA(a[* ,1])
printf, lun, 'ed           =', a_el[2], ' +/-', ROBUST_SIGMA(a[* ,2])
printf, lun, 'm_ef          =', a_el[3], ' +/-', ROBUST_SIGMA(a[* ,3])
printf, lun, 'hl4           =', a_el[4], ' +/-', ROBUST_SIGMA(a[* ,4])
printf, lun, 'ut           =', a_el[5], ' +/-', ROBUST_SIGMA(a[* ,5])
printf, lun, 'epsylon_inf =', a_el[6], ' +/-', ROBUST_SIGMA(a[* ,6])
printf, lun, 'epsylon       =', a_el[7], ' +/-', ROBUST_SIGMA(a[* ,7])
printf, lun, 'x           =', a_el[8], ' +/-', ROBUST_SIGMA(a[* ,8])
printf, lun, 'L           =', a_el[9], ' +/-', ROBUST_SIGMA(a[* ,9])
printf, lun, 'Nib          =', a_el[10], ' +/-', ROBUST_SIGMA(a[* ,10])
printf, lun, 'Ndis         =', a_el[11], ' +/-', ROBUST_SIGMA(a[* ,11])
printf, lun, 'tpo          =', 420.-107.*a_el[8], ' +/-', ROBUST_SIGMA(420.-
107.*a[* ,8])
printf, lun, '-----'
--'
printf, lun, '-----'
--'
close, lun
set plot, 'ps'

```

```

!p.multi= 0
charsize = 1.0
plot_ce2, dados, a_el
DEVICE, /CLOSE
SET_PLOT, dev()
plotsave = {t: dados.t, m: dados.m, n: dados.n, a:a, mu_t:
modelo(dados, a_el) }
SAVE, plotsave , FILENAME = dir + 'Outputs_n'+ path_sep() + name + '.sav'
!p.multi=0
print, 'acabou!'
end
;
function ce, prange, residuo, itmax, dados, n_ent, nel, alfa,
Likelihood = Likelihood, do_plot = do_plot, limited = limited
;cross-entropy
;
sz = size(prange)
; generate initial population
r = dblarr(n_ent, sz[2])
sigmar = dblarr(sz[2])
center = dblarr(sz[2])
;
for i=0, sz[2]-1 do begin
    sigmar[i] = (prange[1,i]-prange[0,i])/2.
    center[i] = (prange[1,i]+prange[0,i])/2.
endfor
;
res = 1.e40 ; valor inicial do residuo
iter = 0
pare = 0.
;
while (mean(res) ge residuo) and (iter le itmax) and (pare le 5) do
begin
    for j=0, sz[2]-1 do begin
        r[* ,j] = center[j] + sigmar[j]*(randomu(s, n_ent)*2.0-1.)
        if limited then begin
            less = where(r[* ,j] lt prange[0,j], c1)
            more = where(r[* ,j] gt prange[1,j], c2)
            if (c1 gt 0) then r[less, j] = prange[0, j]
            if (c2 gt 0) then r[more, j] = prange[1, j]
        endif
    endfor
;
    if Likelihood then begin
        Sx = objf_L(dados, r)
    endif else begin
        Sx = objf_C(dados, r)
    endelse
    ord = sort(sx)
    sx = sx[ord]
    r = r[ord, *]
    r_el = r[0: Nel, *]
    ress = cal_res(dados, r_el[0, *])
    if (round(ress) eq round(res)) then begin
        pare = pare + 1.
    endif else begin
        pare = 0.
    endelse
endwhile

```

```

res = ress
;
for jj=0,sz[2]-1 do begin
    center[jj] = alfa*mean(r_el[*,jj]) + (1.d -alfa)*center[jj]
    sigmar[jj] = alfa*stddev(r_el[*,jj]) + (1.d -alfa)*sigmar[jj]
endfor
;
if do_plot then plot_ce, dados, r_el[0,*]
;
iter++
endwhile
print, 'res = ', res
print, 'm* = ',r_el[0,3]
print, 'x = ',r_el[0,8]
;
return, r_el[0,*]
end
;
;Chi quadrado
function objf_C, str, r ;str -> {x:t, y: mu, n: n}
y = str.m ; mu

L=1.
sz = size(r)
sy = fltarr(n_elements(y)) +1.
yfit = dblarr(n_elements(y), sz[1])

for i=0, sz[1] - 1 do begin
    yfit[*,i] = modelo( str, r[i,*])
endfor

for i=0,n_elements(y)-1 do begin
    aux = (y[i]-yfit[i,*])^2/sy[i]^2
    L = L+aux
endfor
return, L
end
;
; Maximum Likelihood
function objf_L, str, r ;str -> {x:t, y: mu, n: n}
y = str.m ; mu

L=1.
sz = size(r)
sy = fltarr(n_elements(y)) +1.
yfit = dblarr(n_elements(y), sz[1])

for i=0, sz[1] - 1 do begin
    yfit[*,i] = modelo( str, r[i,*])
endfor
for i=0,n_elements(y)-1 do begin
    a = (y[i]-yfit[i,*])^2/sy[i]^2
    aux = EXP(-0.5d*a)
    L = L*aux>1d-300
endfor
return, -L
end

```

```

function modelo, str, r
common constantes
;str -> {x:t, y: mu, n: n}
tpo = (420.-107.*r(8))
mu = dblarr(6, n_elements(str.t))
mu[0,*] = dp_2deg(str.t, str.n, r[0], r[1], r[3], r[2], r[9])
mu[1,*] = pz_2deg( str.t, str.n, r[1], r[5], r[2], r[4], r[0], r[3],
r[9])
mu[2,*] = polar_2deg( str.t, str.n, tpo, r[7], r[6], r[3], r[9])
mu[3,*] = alloy_2deg( str.t, str.n, r[7], r[8], r[3])
mu[4,*] = back_imp(str.t, str.n, r[7], r[3], r[10] )
mu[5,*] = dislocation_2deg(str.t,r[8], r[3], r[7], r[11] )
return, 1.d/((1.d/mu[0,*]) + (1.d/mu[1,*]) + (1.d/mu[2,*]) +
(1.d/mu[3,*]) + (1.d/mu[4,*]) + (1.d/mu[5,*]))
end
;residuo
function cal_res, dados, r
return, mean(abs(dados.m - modelo(dados, r)))
end
;
pro plot_ce, str, r
plotsym, 0,1,/fill
plot, str.t, str.m, psym=8, yrange = [min(str.m), 1.e7], /ylog, /xlog,
xstyle =1
mu_t = modelo(str, r)
oplot, str.t, mu_t,linestyle=0, color = 255
tpo = (420.-107.*r(8))
mu = dblarr(6, n_elements(str.t))
mu[0,*] = dp_2deg(str.t, str.n, r[0], r[1], r[3], r[2], r[9])
mu[1,*] = pz_2deg( str.t, str.n, r[1], r[5], r[2], r[4], r[0], r[3],
r[9])
mu[2,*] = polar_2deg( str.t, str.n, tpo, r[7], r[6], r[3], r[9])
mu[3,*] = alloy_2deg( str.t, str.n, r[7], r[8], r[3])
mu[4,*] = back_imp(str.t, str.n, r[7], r[3], r[10] )
mu[5,*] = dislocation_2deg(str.t,r[8], r[3], r[7], r[11] )
oplot,str.t, mu[0,*], linestyle=0, color = 150
oplot,str.t, mu[1,*], linestyle=0, color = 170
oplot,str.t, mu[2,*], linestyle=0, color = 200
oplot,str.t, mu[3,*], linestyle=0, color = 220
oplot,str.t, mu[4,*], linestyle=0, color = 70
oplot,str.t, mu[5,*], linestyle=0, color = 30
legend,['Data', 'Model', 'Def Acous', 'Piez', 'Polar', 'Alloy', 'back
imp', 'dislocation'], $
linestyle=[0,0,0,0,0,0, 0,0],color=[0,255,150,170,200,220,70,30],
psym=[8,0, 0, 0, 0, 0,0,0],/right,charsize=1
wait,0.001
end

```

```

pro plot_ce2, str, r
plotsym, 0,1,/fill
plot, str.t, str.m, psym=8, yrange = [min(str.m), 1.e7], /ylog, /xlog,
xstyle =1
mu_t = modelo(str, r)
oplot, str.t, mu_t,linestyle=0, color = 0
tpo = (420.-107.*r(8))
mu = dblarr(6, n_elements(str.t))
mu[0,*] = dp_2deg(str.t, str.n, r[0], r[1], r[3], r[2], r[9])
mu[1,*] = pz_2deg( str.t, str.n, r[1], r[5], r[2], r[4], r[0], r[3],
r[9])
mu[2,*] = polar_2deg( str.t, str.n, tpo, r[7], r[6], r[3], r[9])
mu[3,*] = alloy_2deg( str.t, str.n, r[7], r[8], r[3])
mu[4,*] = back_imp(str.t, str.n, r[7], r[3], r[10] )
mu[5,*] = dislocation_2deg(str.t,r[8], r[3], r[7], r[11] )
oplot,str.t, mu[0,*], linestyle=0, color = 150
oplot,str.t, mu[1,*], linestyle=0, color = 170
oplot,str.t, mu[2,*], linestyle=0, color = 200
oplot,str.t, mu[3,*], linestyle=0, color = 220
oplot,str.t, mu[4,*], linestyle=0, color = 70
oplot,str.t, mu[5,*], linestyle=0, color = 30
legend,['Data', 'Model', 'Def Acous', 'Piez', 'Polar', 'Alloy', 'back
imp', 'dislocation'], $
linestyle=[0,0,0,0,0,0, 0,0],color=[0,0,150,170,200,220,70,30],
psym=[8,0, 0, 0, 0, 0,0,0],/right,charsize=1
end
;
function dev
if (!version.os_family eq 'Windows') then begin
    return, 'win'
endif else begin
    return, 'X'
endelse
end
;
function dir,dir
if keyword_set(DIR) then begin
    slash = strmid(dir, 0, 1, /REV) eq path_sep()
    if slash then dir = dir else dir = dir + path_sep()
endif
return, dir
end
;
function remove_suffix, file

endfile = file_basename(file)

    return, strmid(endfile, 0, strpos(endfile, '.'))

end
;

```

```

pro init_consts
common constantes, epsylon_0, m, k, h_bar, e, lc
  epsylon_0 = 8.84d-12
  m         = 9.109d-31
  k         = 1.380d-23
  h_bar     = 1.055d-34
  e         = 1.602d-19
  lc        = 6.0583d-10 ;Lattice constant InAs
end
;
function cm2_to_m2, n
  return, n*1.d4
end
;
function cm3_to_m3, n
  return, n*1.e6
end
;
function m2_to_cm2, mobilidade
  return, mobilidade*1.d4
end
;
function k_fermi, n
return, (2.d*!dpi*n)0.5 ; is the wave vector on the Fermi surface
end
;
function k_med, t, m_ef
common constantes
return, ((2.d*m_ef*k*t/(h_bar2.))0.5)
end
;
function dp_2deg, t, ns, rh, ull, m_e, edd, ll
common constantes
ul = ull* 1.d-2 ;m/s
rho = rh*1.d3 ;kg/m^3
n = ns*1.d4 ;m^-2
ed = edd*e ;J
l = ll*lc
m_ef = m_e*m
return,
m2_to_cm2((e*(h_bar3.)*rho*(ul2.)*l)/((m_ef2.)*(ed2.)*k*t))
end
;

```



```

function pz_2deg_deg, t, ns, ull, utt, edd, h14, rh, m_e, ll
common constantes
ul = ull* 1.d-2 ;m/s
ut = utt* 1.d-2 ;m/s
n = ns*1.d4 ;m^-2
ed = edd*e ;J
rho = rh*1.d3 ;kg/m^3
m_ef = m_e*m ;kg
l = ll*lc
kf = k_fermi(n)
gamma_t = (2.d*h_bar*ut*kf)/(k*t)
gamma_l = (2.d*h_bar*ul*kf)/(k*t)
I_gamma_t = (((4.d*gamma_t)/(3.d!*dpi))^2.+1.d)^0.5
I_gamma_l = (((4.d*gamma_l)/(3.d!*dpi))^2.+1.d)^0.5

aux = (((9.d/32.d)+(13.d/32.d)*((ul/ut)^2.)*(I_gamma_t/I_gamma_l))^(-
1.))
m_dpp = (e*(h_bar^3.)*rho*(ul^2.)*l)/((m_ef^2.)*(ed^2.)*k*t)

return, m2_to_cm2(((!dpi*kf*(ed^2.))/(l*(e^2.)*(h14^2.)))*aux*m_dpp)
end
;
function pz_2deg, t, ns, ull, utt, edd, h14, rh, m_e, ll
common constantes
ul = ull* 1.d-2 ;m/s
ut = utt* 1.d-2 ;m/s
n = ns*1.d4 ;m^-2
ed = edd*e ;J
rho = rh*1.d3 ;kg/m^3
m_ef = m_e*m ;kg

l = ll*lc
kf = k_med(t, m_ef)
gamma_t = (2.d*h_bar*ut*kf)/(k*t)
gamma_l = (2.d*h_bar*ul*kf)/(k*t)
I_gamma_t = (((4.d*gamma_t)/(3.d!*dpi))^2.+1.d)^0.5
I_gamma_l = (((4.d*gamma_l)/(3.d!*dpi))^2.+1.d)^0.5

aux = (((9.d/32.d)+(13.d/32.d)*((ul/ut)^2.)*(I_gamma_t/I_gamma_l))^(-
1.))
m_dpp = (e*(h_bar^3.)*rho*(ul^2.)*l)/((m_ef^2.)*(ed^2.)*k*t)

return, m2_to_cm2(((!dpi*kf*(ed^2.))/(l*(e^2.)*(h14^2.)))*aux*m_dpp)
end
;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;
;;;;
function polar_2deg, t, ns, tpo, epsylon, epsylon_inf, m_e, ll
common constantes
m_ef = m_e*m
n = ns*1.d4 ;m^-2
l = ll*lc
ep = 1.d/ ((1.d/epsylon_inf) - (1.d/ epsylon))
return, m2_to_cm2(((4.d * !dpi * epsylon_0 * ep * (h_bar^3.))/(e * tpo
* k * (m_ef^2.) * l)) * (exp(tpo/t) - 1.d))
end
;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;;
;;;;

```

```

function alloy_2deg, t, ns, ep, x, m_e ;;;; mudar u_a para os valores
do InAs
common constantes
n = ns*1.d4 ;m^-2
m_ef = m_e*m
epsilon = ep*epsilon_0
u_al = Eg_InAs(t)*e
b = bbb(n, m_ef, epsilon)
return, m2_to_cm2((16.d/(3.d*b))*((e*(h_bar^3.))/(x*(1.d -
x)*(m_ef^2.))*3.48d-29*(u_al^2)))
end
;
function bbb, n, m_ef, epsilon ; entrada e saida no SI
common constantes
return, ((33.d *(e^2.)*m_ef*n)/(8.d*epsilon*(h_bar^2.)))^0.3333333333
end
;
function Eg_InAs, t
return, (0.415 - (2.76d-4 * (t^2)))/(t+83.d)
end
;
function Eg_GaAs, t
return, (1.519 - (5.405d-4 * (t^2)))/(t+204.d)
end
;
function s0, n, t, epsilon
common constantes
return, (e^2.)*n/(2.d*epsilon*k*t)
end
;
function s0_deg, m_ef, epsilon
common constantes
return, (2.d*(e^2.)*m_ef)/(4.d*!dpi*epsilon*(h_bar^2.))
end
;
function ib_deg, n, epsilon, m_ef
x = (s0_deg(m_ef, epsilon)/(2.d*k_fermi(n)))
return, (2.043*exp(-x/0.323)+0.654*exp(-x/1.669)+0.0063)
end
;
function ib, n, t, m_ef, epsilon
x = (s0(n, t, epsilon)/(2.d*k_med(t, m_ef)))
return, (2.043*exp(-x/0.323)+0.654*exp(-x/1.669)+0.0063)
end
;
function back_imp_deg, ns, epsy, m_e, nb
common constantes
nbi = cm2_to_m2(nb)
n = ns*1.d4 ;m^-2
k_f = k_fermi(n)
mef = m_e*m
epsilon = epsy*epsilon_0
i_b = ib_deg(n, epsilon, mef)
return,
m2_to_cm2((8.d*!dpi*(h_bar^3.)*(epsilon^2.)*(k_f^2.))/((e^3.)*(mef^2.
)*nbi*i_b))
end

```

```


function back_imp, t, ns, epsy, m_e, nb
common constantes
nbi = cm2_to_m2(nb)
n = ns*1.d4 ;m^-2
mef = m_e*m

k_f = k_med(t, mef)

epsylon = epsy*epsylon_0
i_b = ib( n, t, mef, epsylon)
return,
m2_to_cm2((8.d*!dpi*(h_bar^3.)*(epsylon^2.)*(k_f^2.))/((e^3.)*(mef^2.)
*nbi*i_b))
end
;
function parameter_xi, t, epsylon, m_ef
common constantes
ab = (4.d*!dpi*epsylon*(h_bar^2.))/((e^2.)*m_ef) ;bohr_radius
qtf = 2.d/ab ; the 2D Thomas-Fermi wave vector
k_f = k_med(t, m_ef)
return, (2.d*k_f)/qtf
end
;
function it, t, epsylon, m_ef
xi = parameter_xi( t, epsylon, m_ef)
return, (-0.0275+0.2006*xi+0.4964*(xi^2.)-0.1203*(xi^3.))
end
;
function dislocation_2deg, t, x, m_e, epsy, n_dis
common constantes
ndis = n_dis*1.d4 ;m^-2
epsylon = epsy*epsylon_0
m_ef = m_e*m
k_f = k_med(t, m_ef)
a1 = 6.0583d-10 ;InAs
a0 = 5.65325d-10 ;GaAs
c = x*a1 + (1.d -x )*a0
it = it(t, epsylon, m_ef)
return,
m2_to_cm2((4.d*!dpi*(epsylon^2.)*(h_bar^3.)*(k_f^4.)*(c^2.))/((e^3.)*(
m_ef^2.)*ndis*it))
end
;

```

Main scattering mechanisms in InAs/GaAs multi-quantum-well: a new approach by the global optimization method

A. F. Oliveira¹  · R. M. Rubinger¹ · H. Monteiro¹ · C. P. L. Rubinger¹ · G. M. Ribeiro² · A. G. de Oliveira²

Received: 8 May 2015 / Accepted: 18 September 2015
© Springer Science+Business Media New York 2015

Abstract In this paper, we present the results of the electrical characterization of semiconductor multi-quantum-well of InAs/GaAs. The growth by molecular beam epitaxy may induce the formation of other structures such as dislocations and point defects and also quantum dots due to the stress that arise in the lattice caused by mismatches in lattice constants. For the characterization, we used the Hall measurements as a function of temperature using the van der Pauw technique between temperatures of 10 and 310 K. For data analysis, the presence of two conduction channels was observed and it was necessary to use a simple model for splitting the experimental data into two channels. For the mobility analysis process of splitting channels, a set of scattering mechanisms models for carriers in two dimensions was used together with the global optimization method, named cross entropy. With this, the main scattering mechanisms limiting the mobility of each sample were estimated in a robust and statistical fashion. As a result of the fittings, it was possible to infer effects associated to stresses on the InAs/GaAs interfaces and its relaxation across the active layer on the fitting parameters. The fittings can also act as a source of information on impurity and dislocation densities. The cross entropy together with constitutive characteristics changes can be used to improve characteristics of quantum dot samples.

Introduction

Research focused on the growth of multi-quantum-well InAs/GaAs quantum dots (QD) contained on the InAs layer has received considerable attention [1–5]. Mainly because of its wide application in building low-dimensional devices, such as QD solar cells [6, 7], devices including lasers and photonic modulators [8], and optical waveguides [9].

The multi-quantum-well offers new options for designers of semiconductor devices, since it allows control of impurity levels and the positions of the valence and conduction bands. The understanding of physical phenomena related to this kind of structure is important for the fabrication and optimization of new devices, such as optical devices and quantum gates for quantum computing experiments. The formation of self-assembled QD involves a heteroepitaxy in which the lattice mismatch leads to a complicated balance between stress and deformation giving QD as one of the possible products. It is a hard task to control the balance between stress and deformation and it may give rise to other effects that are studied in this work, by the mobility analysis of semiconductor samples as will be seen. We can say that in addition to QD, there is also the formation of point defects and dislocations. Non-relaxed residual stresses will lead to effects that reduce the quality of the electronic transport in the samples. In order to improve electronic characteristics of QD semiconductors and extend the range of applications for these materials, it is important to investigate such effects. Thus, this study aims to unravel the effects caused by stress in these samples through the identification of scattering mechanisms of charge carriers and its dependence on constituent characteristics such as quantum well width, thickness, and other growth characteristics of the sample.

✉ A. F. Oliveira
adhimarflavio@unifei.edu.br

¹ Physical and Chemical Institute, Itajubá Federal University, BPS Avenue, 1303, Itajubá 37500-903, Brazil

² Exact Sciences Institute, Minas Gerais Federal University, Antônio Carlos Avenue, 6627, Belo Horizonte 31270-901, Brazil

This work aims to investigate semiconductor multi-quantum-well samples of InAs/GaAs which has the characteristic of having InAs pyramidal-shaped QD that behaves as potential wells [10]. We presented the results of the use of the global optimization method of cross entropy to identify the main scattering mechanisms present in samples of multi-quantum-well of InAs/GaAs and the fundamental parameters used for fitting with this model. In the following sections, experimental details of the growth of multi-quantum-well InAs/GaAs, “The Global optimization method-cross entropy” section, the “Scattering mechanisms in a two-dimensional electron gas” section, and Splitting into two conduction channels are described. Finally, we present the results obtained from the cross entropy and the discussion of the obtained results. Our main results are the identification of a high-effective mass caused by the high unrelaxed stress which is main cause of low mobility at room temperature.

Experimental details

We have grown InAs/GaAs multi-quantum-well samples by molecular beam epitaxy (MBE). The samples were grown on top of semi-insulating Liquid-Encapsulated Czochralski (LEC) GaAs substrates. A 1 μm GaAs buffer layer was grown at a substrate temperature of 600 $^{\circ}\text{C}$. After that the growth temperature was reduced and kept constant during the InAs/GaAs growth and according to Table 1. The number of periods of InAs/GaAs was varied from 0 to 50. The InAs coverage varied between 1.35 and 2.3 monolayers (ML) followed by a GaAs spacer layer of 30 ML or 40 ML. For this sample series, we have used the deposition rates of 1.0 ML/s for GaAs and 0.158 ML/s for the InAs layers. The amount of MLs of a specific layer is not a measure of its thickness but an amount of deposited material since layer intermixing by diffusion may occur after the growth and surface reconstruction due to the substrate temperature. The growth parameters are summarized in Table 1.

The contacts were deposited on the sample surface in four dots van der Pauw geometry [11, 12]. For this, we used small In drops and backed the contacts in a N₂:H₂

85:15 reducing atmosphere at 300 $^{\circ}\text{C}$ for 10 min. The van der Pauw measurements followed the same procedures described in [13]. The measurements were carried in darkness from room temperature down to 3.9 K.

The Global optimization method-cross entropy

The cross entropy (CE) procedure is a variance reduction technique [14, 15] and uses concepts of importance sampling, which does not need to provide, a priori, a set of reference parameters for the parent distribution. The CE consists of a simple adaptive procedure for estimation of the optimal reference parameters. In addition, the CE procedure is based on a solution space, with an evolutionary rule in which some fraction of the space is selected in each iteration based on a certain selection criterion. The CE is an iterative procedure in which each iteration follows:

1. Random generation of the initial parameter sample constrained to pre-defined parameter space;
2. Selection of the best candidates based on the likelihood criteria;
3. Random generation of updated parameter samples from the previous best candidates to be evaluated in the next iteration;
4. Go to step 2 until a pre-specified stopping criterion is fulfilled.

In this work, we have implemented the CE method aiming to determine the best fitting for the mobility data (μ) obtained from Hall Effect van der Pauw measurements. Such fittings allow the best choice among scattering mechanisms as will be discussed in the following sections.

Scattering mechanisms in a two-dimensional electron gas

In a semiconductor, the scattering of carriers is generally modeled by a Hamiltonian containing a scattering potential that acts upon a charge carrier when passing close to a impurity, a lattice defect, a lattice vibration such as

Table 1 The growth parameters

Sample	Growth temp ($^{\circ}\text{C}$)	Superlattice period	InAs coverage (ML)	GaAs thickness (ML)
A1	545	0	1.9	30
A2	540	5	1.9	30
A3	500	10	1.9	30
A4	505	50	1.9	30
A5	545	50	2.3	40
A6	505	50	1.35	40

phonons, magnons, polarons, polaritons, alloying among others [13, 16]. The perturbation containing the potential is then integrated with the Bloch wave functions in order to define scattering times. The mobility (μ) is defined by the scattering time (τ) and the carrier effective mass (m^*) by $\mu = e\tau/m^*$, with e as the electron charge. In general, scattering events are independent and the Matthiessen's rule applies, i.e., Eq. 1 allows one to combine them in order to define best scenario for fitting experimental data.

$$\mu^{-1} = \sum \mu_i^{-1} \tag{1}$$

Using Eq. 1 and the CE procedure it is possible to choose the most relevant scattering mechanisms for the investigated samples. We now proceed to the description of the mobility defined by scattering by distinct kinds of events considered for this work. All samples used in this work contains at least one quantum well at the interface InAs/GaAs. Therefore, all considered scattering mechanisms are for a two-dimensional electron gas (2DEG) [17].

Ionized impurity scattering due to interface charges

Due to the fact that the 2DEG Channel is formed on the InAs/GaAs hetero-interface, there is scattering due to background impurities, i.e., impurities not necessarily localized in the 2DEG, as well as due to the interface charge. For this mechanism, the corresponding expression is [18–20].

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

where N_{ic} is the 2D impurity density in the potential well due to background impurities and/ or interface charge, ϵ_s is the low-frequency dielectric constant, m^* is electron effective mass, e is the electron charge, \hbar is the reduced Planck constant, $k^2 = 2m^*\epsilon/\hbar^2$, and I_B the screening term is

$$I_B(\beta) = \int_0^\pi \frac{\sin^2\theta}{(\sin\theta + \beta)^2} d\theta, \tag{3}$$

where $\beta = S_0/2k$ and S_0 is the screening constant which in the non-degenerate case is defined as

$$S_0 = \frac{e^2n}{2\epsilon_s k_B T} \tag{4}$$

with n as the 2DEG sheet carrier density, k_B as the Boltzmann constant and T as the temperature.

Dislocation scattering

Due to the crystal growth with a mismatch in atomic positions, strain is induced and may relax generating QD

and dislocations. The mobility due to the scattering by dislocations is defined by [19, 21]

$$\mu_{dis} = \frac{4\pi\epsilon_s^2k^4a^2}{e^3m^{*2}N_{dis}I_t} \tag{5}$$

where N_{dis} is the charge dislocation density, a is the lattice constant, and I_t is

$$I_t = \frac{1}{2}\xi^2 \int_0^1 \frac{1}{(1 + \xi^2u^2)\sqrt{1-u^2}} du, \tag{6}$$

where ξ is a dimensionless parameter given by $\xi = ka_B$, where $a_B = \frac{4\pi\epsilon_s\hbar^2}{e^2m^*}$ is the effective Bohr radius of the material.

Polar optical phonon scattering

Optical phonons in polar mode scattering occurs due to the electric field caused by polarization of ions in the primitive cell, inducing vibrations in the lattice of optical mode. The mobility due to scattering optical phonons polar mode is given by [22, 23]

$$\mu_{po} = \frac{4\pi\epsilon_p\hbar^3}{e\theta_{po}k_Bm^{*2}Z_0} \left[e^{\frac{\theta_{po}}{T}} - 1 \right] \tag{7}$$

where θ_{po} is the temperature of the optical phonon, Z_0 is the width of the quantum well, and $\epsilon_p^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_s^{-1}$; here ϵ_∞ is the high-frequency dielectric constant.

Acoustic deformation potential scattering

Acoustic phonons were considered as the scattering by both the deformation potential and the piezoelectric one. Phonons due to the deformation potential change atomic positions of the crystal primitive cell causing a change in the lattice periodicity, which in turn scatters the charge carriers. For the study of the mobility due to acoustic deformation potential phonons, Eq. 8 was used [24].

$$\mu_{dp} = \frac{e\hbar^3\rho u_l^2Z_0}{m^{*2}E_d^2k_B T} \tag{8}$$

where u_l is the longitudinal acoustic phonon velocity, E_d is the deformation potential constant, and ρ is the density of the crystal.

Piezoelectric acoustic phonons

The scattering by piezoelectric acoustic phonons occurs in crystals without inversion symmetry, producing polarization and generating internal electric fields that vary in time and space. The mobility due to piezoelectric acoustic phonons is given by [24]

$$\mu_{pz} = \frac{\pi k E_d^2}{Z_0 e^2 h_{14}^2} \left[\frac{9}{32} + \frac{13}{32} \left(\frac{u_l}{u_t} \right)^2 \frac{I(u_t)}{I(u_l)} \right]^{-1} \mu_{dp} \tag{9}$$

where h_{14} is the piezoelectric constant, u_t is the velocity of transverse acoustic phonons, and

$$I(u_t) = \left[\left(\frac{8\hbar u_t k}{3\pi k_B T} \right)^2 + 1 \right]^{1/2}, \tag{10}$$

$$I(u_l) = \left[\left(\frac{8\hbar u_l k}{3\pi k_B T} \right)^2 + 1 \right]^{1/2}. \tag{11}$$

Alloy disorder scattering

In an alloy [18, 25, 26], composed of binary components A (e.g., InAs) and B (e.g., GaAs), whose potential A is V_A and the potential B is V_B , the mobility due to the alloy is given by [18, 27]

$$\mu_{al} = \frac{16}{3b} \frac{x(1-x)m^{*2}\Omega_0\Delta V_{al}^2}{e\hbar^3} \tag{12}$$

where x is the alloy mole fraction, Ω_0 is the volume occupied by one atom, and V_{al} is the alloy potential.

From the scattering mechanisms presented, a CE algorithm was designed with the purpose of determining in a non-subjective and robust fashion (i.e., without human interference) the dominant scattering mechanisms and the respective fitting parameters of mobility channels in InAs/GaAs samples. For this, we carried out Hall Effect and resistivity experiments which give the carrier density and the respective Hall mobility. These measurements were carried out as a function of temperature under applied magnetic field across the sample. The procedure starts with the generation of parameters constrained to physical characteristics of the samples. From this point, the algorithm follows the procedure of the CE method presented in “The Global optimization method-cross entropy” section i.e., during the process of optimizing, the maximum likelihood is applied to select the best candidates for each iteration. The next iteration starts with narrowed parameters set determined in the previous iteration. This procedure repeats until it finds a solution within a pre-defined limit of variance. The uncertainties of the parameters are obtained by running the algorithm to fit data for multiple times. Then the obtained experimental data are then re-sampled by the bootstrap procedure with different data sets. With this, one can determine the best fit and uncertainty in parameters.

Splitting two conduction channels

Since quantum wells at a semiconductor hetero-interface often present two or more sub-bands, we use a two sub-band model [28] that allows a better fitting to the Hall measurements. In our approach, we assumed that the total concentration n_t is independent from the temperature. Furthermore, we assumed a simple activation energy charge carrier transfer model for the variation of the sub-band population with temperature defined by

$$n_1 = n_1^0 \left(1 - e^{-\frac{e}{k_B T}} \right), \tag{13}$$

$$n_2 = n_t - n_1 \tag{14}$$

with n_1 and n_2 the populations of the two sub-bands. Their values at $T = 0$ K are represented by n_1^0 .

In a multi-channel scenario, the Hall density and the Hall mobility in the weak magnetic field regime are, respectively,

$$n_H = \frac{(\sum n_i \mu_i)^2}{\sum n_i \mu_i^2} \tag{15}$$

$$\mu_H = \frac{\sum n_i \mu_i^2}{\sum n_i \mu_i} \tag{16}$$

where n_i and μ_i are the population and the mobility of the i th sub-band.

Results and discussion

In Figure 1, we present the data obtained from the Hall measurements considering the van der Pauw method. In the left, we present the mobility curves ($\text{cm}^2/\text{V s}$) as a function of temperature $T(\text{K})$ for the samples A1, A2, A3, A4, A5, and A6 with respective symbols indicated. In the right, we present the sheet carrier density $n(\text{cm}^{-2})$ as a function of temperature $T(\text{K})$ the same samples. For a better visualization, left graph is also shown on a logarithmic scale. Since Hall mobility is obtained from Hall concentration and conductivity, both graphs have complementary information and for this reason conductivity data were omitted. Thus, in the left graph, we have that peak mobility which corresponds to a minimum in the carrier concentration on the right graph and that occurs around 100 K. Below 100 K, the mobility curve has a positive slope which occurs for scattering mechanisms by ionized impurities and dislocations. At temperatures above 100 K, a negative slope of the mobility may be caused by various concurrent mechanisms and, selecting the more significant contribu-

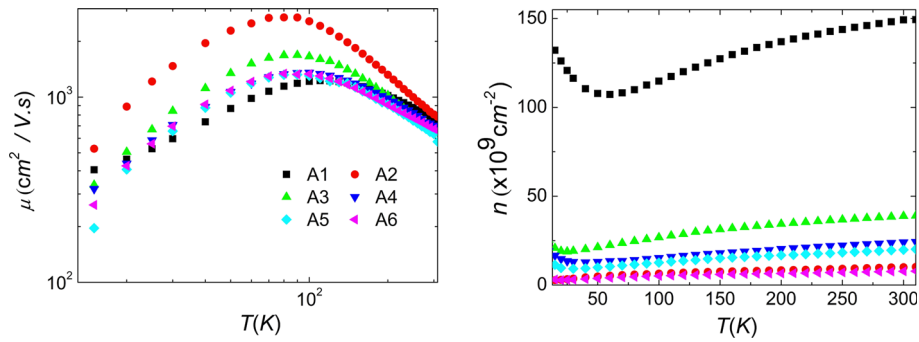


Fig. 1 (color online) Hall measurements obtained by the van der Pauw method for samples A1, A2, A3, A4, A5, and A6. In the *left*, the mobility curves as a function of temperature T for the samples A1, A2, A3, A4, A5, and A6 with respective *symbols* indicated. In the

right the carrier density, n , as a function of temperature, T using the same symbols as in the *left* graph. For a better visualization, the *left* graph is shown on a logarithmic scale

tions is a hard task to be carried by standard fitting procedures. However, the use of the here proposed optimization algorithm allows this process to occur without human interference. In the right graph, as already mentioned, complementary information can be obtained. In this case, we can identify that sample A1, which is distinguished by the others by having just one InAs/GaAs interface to present almost one magnitude order higher carrier density when compared to the order five samples, reaching values above 10^{11} cm^{-2} .

In Figs. 2 and 3, we present the results of the same data of Fig. 1 but considering the splitting procedure into two conduction channels using Eqs. 13–16. This splitting process, allowed a single-carrier temperature dependence for each channel electron density n_i , i.e., a monotonic decrease for n_1 and a monotonic increase for n_2 as described by Eqs. 13 and 14. Both carrier densities reach asymptotic values at high temperatures. In comparison between Figs. 2 and 3, it is noticeable that, for all samples, channel 2 mobility μ_2 is higher than μ_1 . In addition, μ_1 maxima are located the range of 110 and 200 K, while μ_2 maxima are located at a lower temperature, i.e., about 90 K.

Now we proceed to mobility fitting results. For all fittings were considered 2DEG scattering mechanisms

presented in “Scattering mechanisms in a two-dimensional electron gas” section and the Matthiessen’s rule for combination of distinct mechanisms for each sample for one of the conduction channels. In Fig. 4, we present the results of the CE for the sample A1. It is noted that the scattering mechanisms by ionized impurities localized at the interface and by dislocations dominate the channel 1 to a temperature below 150 K. Below 40 K, the scattering by dislocation is more important than by impurities, whereas above 40 K occurs a reversal caused by impurity contributing more to define mobility limitation. For temperatures above 150 K, the scattering mechanism for channel 1 by deformation potential phonons becomes more relevant to define the mobility, despite the presence of a large contribution of impurities. The other mechanisms are important in order to fine-tune the mobility of channel 1. In the right graph, we present the results through the CE for channel 2 sample A1. Again the main mechanisms that limit mobility at temperatures below 60 K seem to be by Ionized impurities localized at the interface and by dislocations, while above 100 K, the mobility becomes limited by deformation potential phonons and finally, above 200 K this occurs by both by deformation potential and optical phonon scattering.

Fig. 2 (color online) Results after splitting for channel 1. As in Fig. 1, the *left* graph stands for μ_1 and the *right* graph n_1 . Symbols, corresponding to distinct samples are indicated on the *left* graph and are the same as in Fig. 1

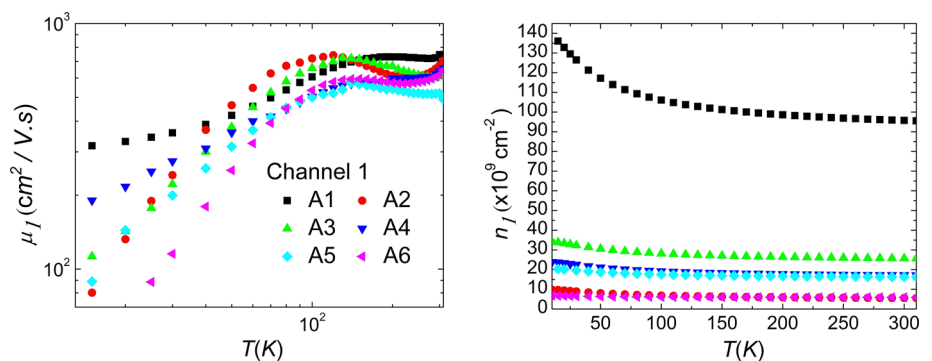


Fig. 3 (color online) Results after splitting for channel 2. As in Fig. 1, the *left graph* stands for μ_2 and the *right graph* n_2 . Symbols, corresponding to distinct samples are indicated on the *left graph* and are the same as in Fig. 1

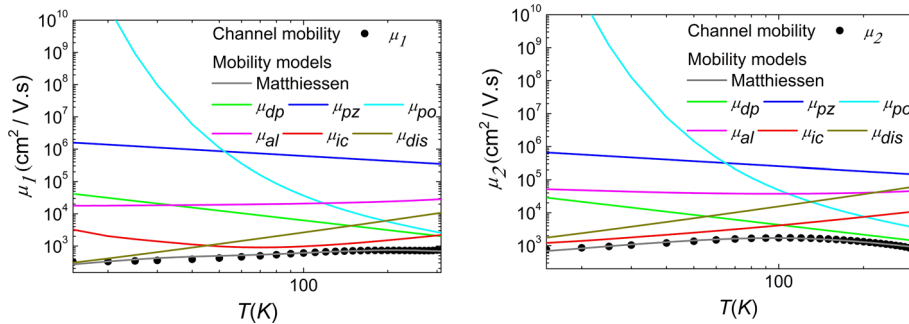
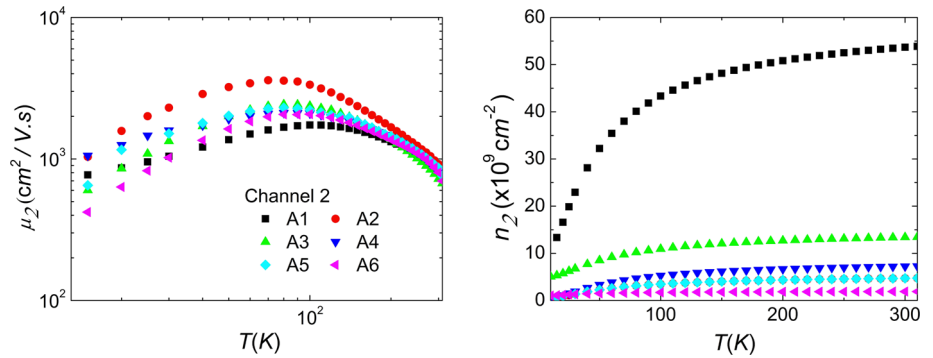


Fig. 4 (color online) Fitting results obtained by the CE method for sample A1. In the *left*, we present results for channel 1 and in the *right*, for the channel 2. The mobility mechanisms label is indicated on the *graph tops*. Black dots are the data for the mobility of the

channel and the *gray line* stands for the Matthiessen's rule applied to all the other mobility channels. For best viewing, all graphs are in logarithmic scale

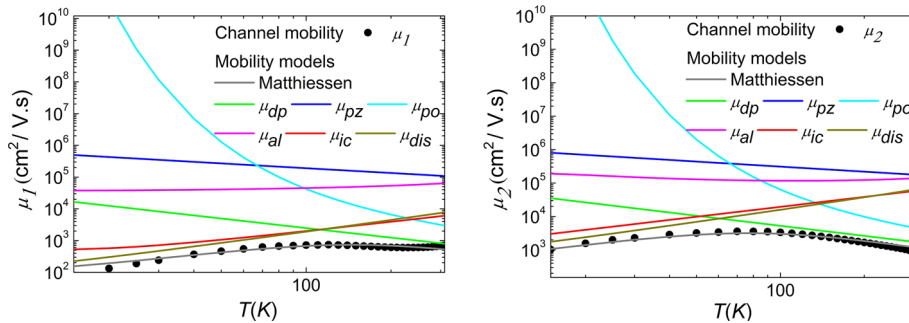


Fig. 5 (color online) Fitting results obtained by the CE method for sample A2. In the *left*, we present results for channel 1 and in the *right*, for the channel 2. The mobility mechanisms label is indicated on the *graph tops*. Black dots are the data for the mobility of the

channel and the *gray line* stands for the Matthiessen's rule applied to all the other mobility channels. For best viewing, all graphs are in logarithmic scale

In Fig. 5 we present the results for the fittings of channels 1 and 2 for A2 sample. In the left, channel 1 mobility is mainly limited by ionized impurities localized at the interface and by dislocations for temperatures lower than 110 K, as it occurs in the sample A1. At higher temperatures, i.e., above 110 K, most relevant mobility mechanisms change to scattering by deformation of potential acoustic phonons. For this channel, the polar

optical phonons take a secondary rule, for temperatures greater than 230 K. For channel 2, the mobility is limited also by scattering by impurities and dislocations at temperatures lower than 50 K. It is noted that, the opposite behavior of channel 1 is observed for channel 2 at this temperature range, i.e., the dislocation scattering contributes to a larger fraction to define mobility limitation than by impurities. For temperatures above 60 K, this

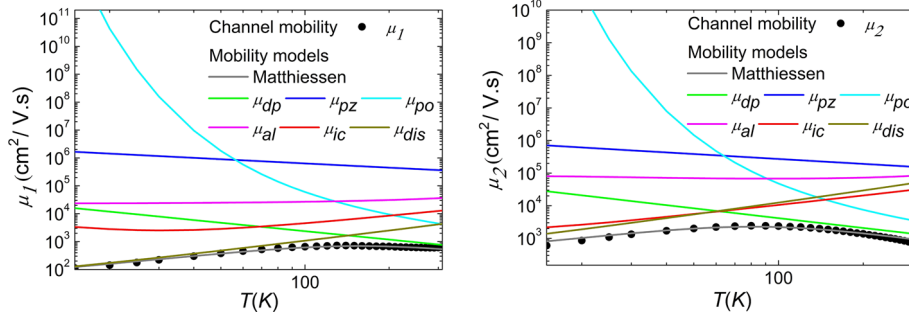


Fig. 6 (color online) Fitting results obtained by the CE method for sample A3. In the *left*, we present results for channel 1 and in the *right*, for the channel 2. The mobility mechanisms label is indicated on the *graph tops*. *Black dots* are the data for the mobility of the

channel and the *gray line* stands for the Matthiessen’s rule applied to all the other mobility channels. For best viewing, all graphs are in logarithmic scale

channel mobility starts to be defined by phonons wherein the acoustic phonons by deformation potential contribute a larger fraction than that of the polar optical mode.

In Fig. 6 we present the results for the fittings of channels 1 and 2 for A3 sample. In the left, channel 1 mobility is mainly limited by ionized impurities localized at the interface and by dislocations for temperatures lower than 70 K. At higher temperatures most relevant mobility mechanisms change to scattering by phonons, by deformation potential. For channel 2 the mobility is limited also by scattering of impurities and dislocations at temperatures lower than 60 K. For temperatures above 60 K, channel 2 mobility starts to be defined by phonons wherein the acoustic phonons by deformation potential contribute a larger fraction and secondary role is played by the polar optical mode.

In Fig. 7 we present the results for the fittings of channels 1 and 2 for A4 sample. In the left, channel 1 mobility is mainly limited by ionized impurities localized at the interface, with the scattering by dislocation having a secondary contribution to the fitting of mobility. Above 80 K, the deformation potential scattering mechanisms

begin to contribute more to the mobility fitting than dislocation scattering. At higher temperatures, i.e., above 180 K, most relevant mobility mechanisms change to scattering by deformation potential acoustic phonons. For channel 2 the mobility is limited also by scattering by dislocation of impurities at temperatures lower than 60 K. For temperatures above 60 K, this channel mobility starts to be defined by phonons wherein the acoustic phonons by deformation potential contribute a larger fraction than that of the polar optical that becomes the secondary mechanism above 160 K.

In Fig. 8, we present the results for the fittings of channels 1 and 2 for A5 sample. Channel 1 is in the left that has as main limiting mechanisms of mobility impurities and dislocation until the temperature of 140 K. Above 150 K, the fitting is defined mainly by acoustic phonons by deformation potential. In the right graph, we present the results of fittings for the channel 2 of the sample A5. For this channel, at temperatures below 60 K mobility is dominated by dislocation and impurities mechanisms. Above 60 K the mobility becomes limited mainly by scattering by deformation potential and when the

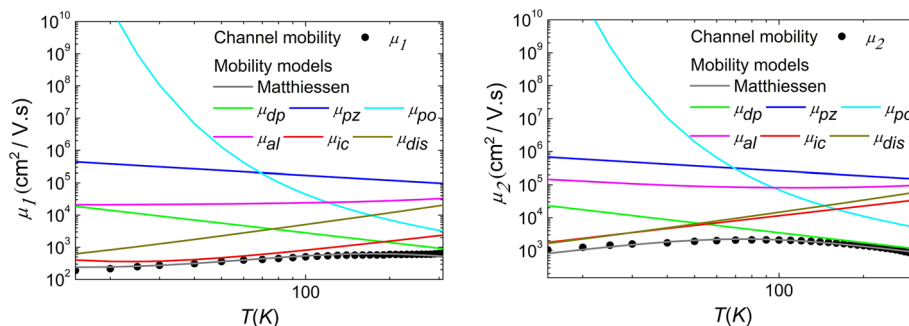


Fig. 7 (color online) Fitting results obtained by the CE method for sample A4. In the *left*, we present results for channel 1 and in the *right*, for the channel 2. The mobility mechanisms label is indicated on the *graph tops*. *Black dots* are the data for the mobility of the

channel and the *gray line* stands for the Matthiessen’s rule applied to all the other mobility channels. For best viewing, all graphs are in logarithmic scale

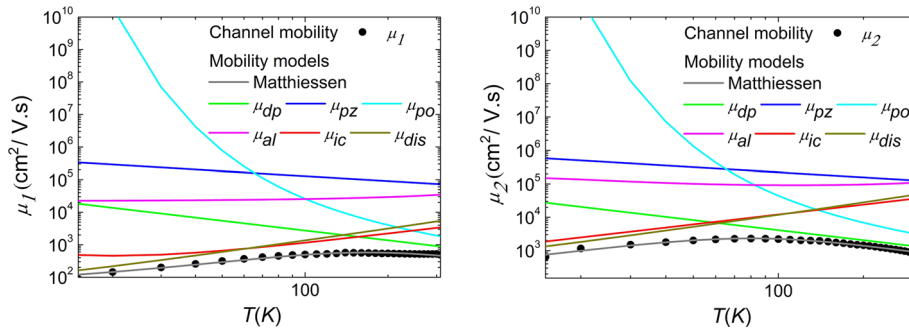


Fig. 8 (color online) Fitting results obtained by the CE method for sample A5. In the *left*, we present results for channel 1 and in the *right*, for the channel 2. The mobility mechanisms label is indicated on the *graph tops*. *Black dots* are the data for the mobility of the

channel and the *gray line* stands for the Matthiessen’s rule applied to all the other mobility channels. For best viewing, all graphs are in logarithmic scale

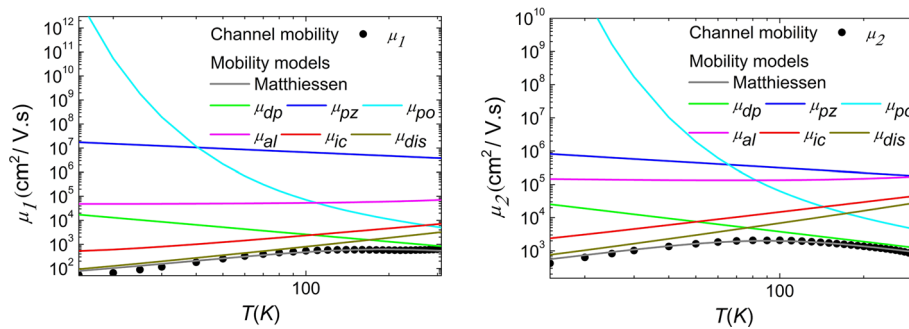


Fig. 9 (color online) Fitting results obtained by the CE method for sample A6. In the *left*, we present results for channel 1 and in the *right*, for the channel 2. The mobility mechanisms label is indicated on the *graph tops*. *Black dots* are the data for the mobility of the

channel and the *gray line* stands for the Matthiessen’s rule applied to all the other mobility channels. For best viewing, all graphs are in logarithmic scale

temperature reaches 130 K the scattering by optical phonons increases their contribution to mobility limitation.

Figure 9 we present the results of the CE for the sample A6. It is noted that the scattering mechanisms by ionized impurities localized at the interface and by dislocations dominate the channel 1 to a temperature below 100 K. For temperatures above 170 K, the scattering mechanism for channel 1 by deformation potential phonons becomes more relevant to define the mobility. In the right graph, we present the results obtained by the CE for channel 2, sample A6. The main mechanisms that limit mobility for temperatures below 50 K seems to be by

Ionized impurities localized at the interface and by dislocations and, above 80 K, the mobility becomes limited by phonons, both by deformation potential and by optical phonon scattering, which takes the secondary rule for temperatures above 170 K.

In Tables 2 and 3 are presented the main fitting parameters and uncertainties obtained robustly by global CE optimization method for channels 1 and 2, respectively. Channel 1 has characteristics that indicate it is a deeper channel, i.e., lowest energy level. Since the channel 2 is a channel sub-band higher energy and sense well potential shielded by channel 1. Thus, channel 1 is closer to the

Table 2 Main parameters obtained in fitting the mobility on channel 1, using the optimization method CE

Sample	m^*	x	$Z_0(\text{ML})$	$N_{ic} \times 10^{10}(\text{cm}^{-2})$	$N_{dis} \times 10^8(\text{cm}^{-2})$
A1	0.25 ± 0.01	0.51 ± 0.01	2.82 ± 0.24	7.2 ± 0.2	14 ± 2
A2	0.26 ± 0.01	0.52 ± 0.02	2.38 ± 0.02	2.2 ± 0.3	20 ± 2
A3	0.27 ± 0.03	0.51 ± 0.01	2.56 ± 0.32	0.93 ± 0.03	35 ± 3
A4	0.29 ± 0.01	0.47 ± 0.01	2.50 ± 0.02	4.54 ± 0.03	8.1 ± 0.4
A5	0.29 ± 0.01	0.52 ± 0.01	3.13 ± 0.04	3.5 ± 0.2	31 ± 2
A6	0.25 ± 0.02	0.52 ± 0.02	1.97 ± 0.38	2.0 ± 0.2	46 ± 2

Table 3 Main parameters obtained in fitting the mobility on channel 2, using the optimization method CE

Sample	m^*	x	$Z_0(\text{ML})$	$N_{ic} \times 10^{10}(\text{cm}^{-2})$	$N_{dis} \times 10^8(\text{cm}^{-2})$
A1	0.21 ± 0.01	0.50 ± 0.03	2.49 ± 0.04	1.5 ± 0.1	2.1 ± 0.4
A2	0.19 ± 0.01	0.55 ± 0.01	2.49 ± 0.02	0.31 ± 0.04	1.9 ± 0.1
A3	0.21 ± 0.01	0.53 ± 0.02	2.50 ± 0.02	0.56 ± 0.02	2.5 ± 0.2
A4	0.21 ± 0.01	0.47 ± 0.01	2.36 ± 0.02	0.46 ± 0.02	2.2 ± 0.2
A5	0.21 ± 0.01	0.52 ± 0.02	2.99 ± 0.04	0.45 ± 0.02	2.7 ± 0.2
A6	0.20 ± 0.01	0.52 ± 0.04	2.10 ± 0.08	0.40 ± 0.05	4.6 ± 0.5

interface, while channel 2 is the farther. The closer the interface is the largest deflection of the lattice, since a lattice mismatch of a hetero-interface InAs/GaAs is $\sim 7\%$ [29].

Also, channel 2 is screened by channel 1 and thus farther from the interface, since the well is triangular. One consequence is that channel 2 is less affected by stress. Comparing Tables 2 and 3, it seems that the parameters m^* , N_{ic} and N_{dis} are about the same range of values for both channels but channel 1 values are more sensitive to constitutive characteristics of the samples presented on Table 2, i.e., mutli-quantum-well period, InAs coverage, and GaAs thickness.

The effective mass of channels 1 and 2 has very high values and this is directly related to the strain caused by the lattice mismatch between the layers of InAs/GaAs. Stress acts uniaxially in the interface and then decays as it moves away from it. Part of this stress can relax causing effects such as the formation of self-assemble QD, dislocations, and point defects. Some stress will be unrelaxed and this residual contribution will act on the band structure of the layer formed at the interface. Such a stress has an equivalent action as to subject the sample to a high pressure. It is well known that the effect of pressure on semiconductors of group III/V, in particular GaAs and InAs is to deform the band structure causing a reduction in the energy difference between the bottom of the valley Γ and that of L and X satellite valleys of the conduction band [30]. At sufficiently high pressures, for example, the well-known Gunn Effect vanishes due to the cancelation of $\Gamma - L$ energy difference [31]. Since the effective mass in the satellite valleys is much higher than that observed for the Γ valley our results are consistent with unrelaxed stress high enough to induce a coexistence or even a predominance of carriers localized on the satellite valleys.

Using Hooke’s law, we must obtain the stress, σ ,

$$\sigma = E\epsilon \tag{17}$$

where ϵ is the strain in the alloy, which in our case is an alloy of $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$, wherein we assumed x as 0.5 causing a strain of approximately 5.6×10^{-2} according to reference [9] calculations. Also E which is the elasticity

module, is defined for an $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$ alloy, as $E = 90 \text{ GPa}$ [32]. With this, we estimated the value of 53.2 Kbar of residual pressure that is, according to the literature [33, 34], enough to cancel the energy difference between the valleys Γ and L for both InAs (i.e., about 48 kbar [33]) and GaAs (i.e., about 26 kbar [34]). Since we are considering that there is enough interdiffusion of In and Ga in the thin layer at the interface to give an x value of 0.5, as suggested by the fittings with an alloy scattering on Tables 2 and 3, we expect that the vanishing of the Gunn effect associated with the cancelation of the intervalley energy will occur between 26 and 48 kbar for such alloy. Since our expected pressure is above this interval, our assumption of L and X Valley carriers explains the high m^* results and even though the layer at the interface was a pure InAs, it would give the same conclusion.

Under this scenario, m^* obtained from fittings using the CE gave values above 0.2. Channel 1 presented values between 0.25 and 0.29 and Channel 2 a lower value around 0.21. Within a channel there is not enough difference to associate with sample growth characteristics. However, comparing both channels, this difference can be related to the dependence of the unrelaxed stress with the growth direction meaning that in a triangular-shaped potential well, the channel 2 is a bit farther from the interface than channel 1 and thus subject to a smaller stress and consequently having a little bit lower effective pressure.

The second columns of Tables 2 and 3 are correlated and corresponding to alloy composition x of $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$. Since both x and θ_{po} are correlated, we reduce our comments to the value of x . θ_{po} was in the range of 364 and 369 K. It is observed that the composition of this well is an alloy ranging from $x = 0.47$ and 0.52 to the well of channel 1 to 0.47 and 0.55 to the well of the channel 2. Fluctuations between the values of x for both channels of the same sample must be related to statistical errors.

The width of the well, presented on the third column is in terms of InAs ML and related to μ_{dp} and μ_{po} . It is greater than nominal width of InAs which is another result that suggests an interdiffusion Ga and In occurred extending the well profile. Besides statistical errors that well describes all samples behavior.

The last two columns dealing with the μ_{ic} and μ_{dis} mechanisms, which dominate the low temperature region in all samples and are linked to other possible forms for stress relaxation besides the formation of QD. For Sample A1 has higher densities, probably due to surface state since the quantum well is at the sample surface. With increasing number of layers from 1 to 10, there is a reduction in N_{ic} and an increase in N_{dis} . An increase in N_{ic} associated with a reduction in N_{dis} is observed for sample A4 compared to sample A3. For samples A5 and A6, N_{ic} reduces and N_{dis} increases. The main feature is that the changes in N_{ic} and N_{dis} occur in opposite directions for the channel 1. Sample A6 has a thinner layer and the stress relaxation does not occur with the formation of QD, which may have caused increases in N_{dis} density. Channel 2 has a one magnitude order lower of N_{ic} and N_{dis} and there is no significant trend between distinct samples. This is a reasonable result, since the channel 1 charge carriers act as a shield for the Coulombian potential well formed at the interface.

Conclusion

The CE has been effective in identifying the scattering mechanisms in an extremely complicated set of samples, with variation in the number of interfaces and spacers. The fitting results obtained by the CE were important to unravel the scattering mechanisms associated with the charge carriers in the InAs/GaAs investigated samples. An important result is the high effective masses values indicating that this type of sample present non-negligible residual stresses, as indeed important, that causes a significant intervalley transfer and provides a low mobility to the sample electrical characteristics. Also as another result from the fittings, it is identified that very thin InAs layers may be hardly kept intact in its composition and extend their profiles. The profile is highly diffused, forming charges at the interface as point defects and as dislocations, which cause scattering by those charges a dominant mechanism at low temperatures. At high temperature, most important scattering mechanisms are by phonons. Since the optical phonons have a significant dependence on the effective mass, intervalley transfer of electrons has a huge impact on the mobility of these carriers to very low values, which makes those InAs/GaAs samples less suitable for electronic device application than for optical device applications. However, since the mobility of charge carriers seems to be very sensitive to changes in the stresses and can act as a source of information on impurity and dislocation densities, the CE together with heat treatments and/or changes in the composition or other growth characteristics can be used to improve both optical and electrical characteristics of quantum dot samples.

Acknowledgements We acknowledge support from the Brazilian Institutions CNPq, CAPES, and FAPEMIG.

References

1. Naiyum T (2007) Effect of size non-uniformity on photoluminescence from ensembles of InAs quantum dots embedded in GaAs, vol. 42. Kluwer Academic Publishers-Plenum Publishers, pp 6913–6916
2. Thomas JC, Millunchick JM, Van der Ven A, Modine NA (2014) Phase stability analysis of the InAs/GaAs (001) wetting layer from first principles. *Phys Rev B* 89:205306
3. Zieliński M, Gołasa K, Molas MR, Goryca M, Kazimierczuk T, Smoleński T, Golnik A, Kossacki P, Nicolet AAL, Potemski M, Wasilewski ZR, Babiński A (2015) Excitonic complexes in natural InAs/GaAs quantum dots. *Phys Rev B* 91:085303
4. Jung IY, Park YM, Park YJ, Lee JI, Kim TW (2006) Dependence of the microstructural and the optical properties on the GaAs spacer thickness in InAs/GaAs double quantum dots grown by using the Indium-flush procedure. *J Mater Sci* 41:5036–5039. doi:10.1007/s10853-006-0133-5
5. Cai LC, Chen H, Bao CL, Huang Q, Zhou JM (2004) Transport properties of InAs epilayers grown on GaAs substrates by using the prelayer technique. *J Mater Sci* 39:2637–2640. doi:10.1023/B:JMSS.0000020047.61719.50
6. Beattie NS, Zoppi G, See P, Farrer I, Duchamp M, Morrison DJ, Miles RW, Ritchie DA (2014) Analysis of InAs/GaAs quantum dot solar cells using Suns-Voc measurements. *Sol Energy Mat Sol Cells* 130:241–245
7. Lam P, Wu J, Tang M, Jiang Q, Hatch S, Beanland R, Wilson J, Allison R, Liu H (2014) Submonolayer InGaAs/GaAs quantum dot solar cells. *Sol Energy Mat Sol Cells* 126:83–87
8. Tatebayashi J, Nuntawong N, Wong PS, Xin YC, Lester LF, Huffaker DL (2009) Strain compensation technique in self-assembled InAs/GaAs quantum dots for applications to photonic devices. *J Phys D: Appl Phys* 42:073002
9. Bojarski NN (1985) The far field in terms of the spatial Fourier transform of the sources and its implications on the inverse problem. *J Appl Phys* 58:1–4
10. Rubinger RM, Ribeiro GM, de Oliveira AG, Albuquerque HA, da Silva RL, Rodrigues WN, Moreira MVB (2004) Hall effect in InAs/GaAs superlattices with quantum dots: identifying the presence of deep level defects. *Braz J Phys* 34:626–628
11. van der Pauw LJ (1958) A method of measuring specific resistivity and Hall effect of discs of arbitrary shape. *Philips Res Rep* 13:1–9
12. van der Pauw LJ (1958) A method of measuring the resistivity and Hall coefficient on lamellae of arbitrary shape. *Philips Res Rep* 20:220–224
13. Look DC (1992) Electrical characterization of GaAs materials and devices. Wiley, New York
14. Monteiro H, Dias WS, Caetano TC (2010) Fitting isochrones to open cluster photometric data. A new global optimization tool. *A&A* 516:A2
15. Oliveira AF, Monteiro H, Dias WS, Caetano TC (2013) Fitting isochrones to open cluster photometric data. III. Estimating metallicities from UVB photometry. *A&A* 557:A14 (2013)
16. Wolfe CM, Holonyak N, Stillman GE (1989) Physical properties of semiconductors. Prentice Hall, Englewood Cliffs
17. Hirakawa K, Sakaki H (1986) Mobility of the two-dimensional electron gas at selectively doped n -type $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ heterojunctions with controlled electron concentrations. *Phys Rev B* 33:8291–8303

18. Lisesivdin SB, Acar S, Kasap M, Ozcelik S, Gokden S, Ozbay E (2007) Scattering analysis of 2DEG carrier extracted by QMSA in undoped Al 0.25 Ga 0.75 N/GaN heterostructures. *Semicond Sci Technol* 22:543–548
19. 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 Commun* 151:80–83
20. Hess K (1979) Impurity and phonon scattering in layered structures. *Appl Phys Lett* 35:484–486
21. Debdeep J, Gossard AC, Mishra UK (2000) Dislocation scattering in a two-dimensional electron gas. *Appl Phys Lett* 76:1707–1709
22. Lisesivdin SB, Yildiz A, Balkan N, Kasap M, Ozcelik S, Ozbay E (2010) Scattering analysis of two-dimensional electrons in AlGaN/GaN with bulk related parameters extracted by simple parallel conduction extraction method. *J Appl Phys* 108:013712
23. Lee K, Shur MS, Drummond TJ, Morkoc H (1983) Low field mobility of electron gas in modulation doped $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ layers. *J Appl Phys* 54:6432–6438
24. Price PJ (1981) Two-dimensional electron transport in semiconductor layers. I. Phonon scattering. *Ann Phys* 133:217–239
25. Look DC, Lorance DK, Sizelove JR, Stutz CE, Evans KR, Whitson D (1992) Alloy scattering in *p*-type $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. *J Appl Phys* 71:260–266
26. Kazuya M, Eisuke T (1983) Makoto, k., Kiyoshi, T., Alloy scattering potential in *p*-type $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. *J Appl Phys* 54:5785–5792
27. Kearney MJ, Horrell AI (1998) The effect of alloy scattering on the mobility of holes in a quantum well. *Semicond Sci Technol* 13:174–176
28. Corrêa JAF, de Oliverira AG, da Silva MIN, Moreira MVB, Ribeiro GM, Chacham H (1996) Temperature dependence of the equilibrium Hall concentration in silicon planar-doped GaAs samples. *Solid State Commun* 98:1063–1068
29. Heinrichsdorff F, Mao M-H, Kirstaedter N, Krost A, Bimberg D, Kosogov AO, Werner P (1997) Room-temperature continuous-wave lasing from stacked InAs/GaAs quantum dots grown by metalorganic chemical vapor deposition. *Appl Phys Lett* 71:22–24
30. Woodhead J, Gonzalez Sanz F, Claxton PA, David JPR (1988) On the band gap of InGaAs/GaAs strained quantum wells. *Semicond Sci Technol* 3:601–607
31. Smith JE, Camphausen DL (1971) Gunn effect in InAs under hydrostatic pressure. *J Appl Phys* 42:2064–2067
32. Korte S, Farrer I, Clegg WJ (2008) Elastic and plastic properties of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. *J Phys D: Appl Phys* 41:205406
33. Pickering C, Adams AR, Pitt GD (1975) The effect of pressure on impact ionisation and the Gunn effect in InAs. *Solid State Commun* 16:1359–1363
34. Burnstein RA, Snow GA, Whiteside H (1965) Absorption time of negative Σ hyperons in liquid hydrogen. *Phys Rev Lett* 15:639–641