

Dinâmica de Portadores e Fônons Quentes no GaAs

Luís Guilherme de Carvalho Rego ^{m.}

Orientador: Prof. Dr. Antônio Carlos Sales Algarte

Este exemplar corresponde à redação final de Tese defendida pelo aluno Luís Guilherme de Carvalho Rego e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas, 1 agosto, 1995

[Assinatura]

Tese apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Física - Unicamp - 1993

U.M. 00074338-9

UNIDADE	IF		
N.º CHAMADA:	T/UNICAMP		
	R.265d		
V.	Ex.		
TOMBO BC	25262M		
PROC.	433/95		
C	<input type="checkbox"/>	D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00		
DATA	10/08/95		
N.º CPD			

M
7M1904IFGW

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP

R265d

Rego, Luís Guilherme de Carvalho
Dinâmica de portadores e fônons quentes
no GaAs / Luís Guilherme de Carvalho Rego.
-- Campinas, SP : [s.n.], 1993.

Orientador: Antônio Carlos Sales Algarte.
Dissertação (mestrado) - Universidade
Estadual de Campinas, Instituto de Física
"Gleb Wataghin".

1. Semicondutores. 2. Fonons. 3. Termo-
dinâmica de sistemas em não-equilíbrio. I.
Algarte, Antônio Carlos Sales. II. Universi-
dade Estadual de Campinas. Instituto de Fí-
sica "Gleb Wataghin". III. Título.

Resumo

Desenvolvemos um modelo teórico que descreve a relaxação térmica do Arseneto de Gálio excitado por pulsos ópticos ultra-curtos. Dispensamos atenção especial aos fônons LO, que são tratados de duas maneiras distintas para melhor entendermos suas características dinâmicas. Como resultado, é possível acompanhar a evolução temporal de portadores e fônons quentes, desde sua geração até sua termalização. Observamos o efeito de “overshoot” da temperatura dos fônons e propomos um novo mecanismo, capaz de descrevê-lo adequadamente.

Abstract

We develop a theoretical model for the electronic thermal relaxation in GaAs crystals submitted to ultrashort optical pulses. We give special consideration to the LO phonons, which are treated by means of two distinct approaches in order to provide a better insight of their dynamical characteristics. As a result, it is possible to follow, step by step, the time evolution of hot carriers and nonequilibrium phonons, since their generation until their thermalization. We observe what is termed a phonon temperature and it is proposed a new mechanism capable to account for its occurrence.

Conteúdo

1	Introdução	6
2	Um modelo para o estudo da relaxação em semicondutores	12
3	Equações para a evolução temporal do sistema	18
3.1	Equação de Boltzmann e termos de interação	18
3.2	Evolução temporal das variáveis intensivas	21
4	Cálculo dos termos de interação	25
4.1	Interação da amostra com a radiação	25
4.2	Fônons LO em equilíbrio interno	28
4.2.1	Interação polar via potencial de Fröhlich blindado	29
4.2.2	Interação óptica via potencial de deformação	33
4.3	Fônons LO fora do equilíbrio	35
4.3.1	Evolução temporal dos fônons LO	35
4.3.2	Interação portadores-fônons LO via Potencial de Fröhlich	41
4.3.3	Interação portadores-fônons LO via potencial de deformação	42
4.4	Interação portadores-fônons AC via potencial de deformação	43
4.5	Interação Fônon-Fônon	45
4.6	Difusão ambipolar de portadores	47
5	Os resultados e sua análise	48
5.1	Evolução temporal do plasma fotoexcitado	49

5.2	Dinâmica dos fônons quentes	52
5.3	Influência dos fônons quentes na relaxação térmica dos portadores	57
5.4	"Overshoot" da temperatura dos fônons	59
6	Conclusões	66
A	Função de "overlap" e relaxação térmica dos buracos	68
B	Cálculo de $\Phi_{i,n}$ e $\Psi_{i,n}$	72
	Bibliografia	74

Capítulo 1

Introdução

Neste trabalho analisamos a dinâmica de portadores fotoexcitados e fônons quentes no cristal de Arseneto de Gálio. Não o fazemos de forma conclusiva, pois, como veremos adiante, este é ainda um tema em aberto e fonte atual de interesse científico. Pretendemos, sim, estudar as interações entre esses sistemas e destacar os fenômenos que são consequência da geração de fônons quentes durante o processo de relaxação térmica dos portadores.

A relaxação térmica em semicondutores é um processo que vem sendo estudado há muito [1, 2]. Inicialmente de forma rudimentar devido ao pouco conhecimento que se tinha dos mecanismos envolvidos na relaxação, bem como pela dificuldade de se resolver as equações que a descrevem. Com o surgimento dos computadores e técnicas de cálculo numérico, além do avanço alcançado pelos métodos experimentais (como veremos a seguir) as pesquisas relacionadas a portadores quentes¹, suas interações e posterior relaxação térmica, ganharam grande impulso e hoje são uma importante ferramenta no estudo de algumas propriedades dos semicondutores [3, 4].

A relaxação térmica de portadores quentes é um processo que compreende inúmeras formas de interações microscópicas e um modelo completo para descrevê-la é virtualmente impossível, levando-nos a aproximações que procuram considerar apenas os

¹Por portadores quentes entendemos elétrons e buracos com energia cinética bem acima da energia térmica da rede, caracterizada por kT_R . Em geral os portadores não estão em equilíbrio termodinâmico e o termo "quente" não implica na existência de uma temperatura capaz de caracterizá-los.

aspectos mais importantes para o tratamento de um determinado problema. Tal processo pode ser dividido qualitativamente em três etapas: geração de pares elétron- buraco, termalização destes portadores até a situação de quasi-equilíbrio interno e , por fim, a relaxação destas populações até um estado final de equilíbrio.

A geração de portadores quentes pode ser obtida, entre outras maneiras, pela aplicação de campos elétricos intensos (maiores que $10^3 V/cm^3$), injeção de potadores em heteroestruturas ou absorção óptica; esta última técnica mostra-se a mais efetiva na geração de portadores quentes de alta energia ($E > 0.5eV$), qualidade que é muito desejável para o estudo da relaxação térmica. Praticamente toda a energia incidente no sistema é utilizada na criação de pares [5]; o aquecimento da amostra ocorre posteriormente, quando o plasma interage com os fônons e transfere para a rede cristalina seu excesso de energia. Além do interesse básico em caracterizar e estudar o plasma que se forma, há situações práticas onde o conhecimento destes efeitos é muito importante: aquecimento e tratamento térmico de amostras e a prevenção de possíveis danos devidos ao derretimento da superfície são algumas delas.

A segunda etapa, que na maioria das vezes se confunde com a primeira, dura menos de 1ps e compreende os processos de interação dos portadores entre si e, em menor escala, com os fônons, até que elétrons e buracos alcancem um estado de quasi-equilíbrio, onde possam ser descritos por distribuições de Fermi-Dirac caracterizadas por quasi-temperaturas e quasi-potenciais químicos. Algumas das questões aqui relevantes dizem respeito ao tempo de duração desta fase, como função da intensidade do pulso ou da energia do fóton, e ao valor da temperatura do plasma quando a termalização é alcançada. Tal fase do processo tem se tornado alvo de muita pesquisa dado o recente desenvolvimento de sistemas capazes de gerar pulsos de luz extremamente curtos (da ordem de femtosegundos) e muito energéticos [6].

A última fase do processo tem como característica principal a transferência de energia dos portadores à rede, por meio de interações com fônons, até que sua temperatura seja igual à temperatura da rede e os fluxos de energia entre ambos cessem. Mais lentamente, os mecanismos de recombinação e difusão, fazem decrescer o número de portadores. Este

período da relaxação é, até o momento, o mais estudado [7, 10], pois seu tratamento pode ser simplificado pelo uso de funções de distribuições de quasi-equilíbrio, que permitem soluções analíticas ao problema em alguns casos específicos. Seu longo tempo de duração, quando comparado aos tempos característicos das etapas anteriores, também facilita um estudo experimental.

Os primeiros trabalhos relacionados a portadores quentes, realizados a partir da década de 30, buscavam estudar os efeitos da aplicação de campos elétricos intensos na matéria; alguns dos temas em questão eram a ruptura eletrônica em dielétricos, a forma da função de distribuição dos portadores quentes, seus mecanismos de espalhamento por fônons, etc. Porém, apesar de encontrarmos nomes como Landau [1], Davydov e Seitz [2] envolvidos nesses trabalhos, o estudo dos fenômenos de não-equilíbrio em semicondutores estava apenas no início e várias dificuldades, que foram resolvidas no decorrer das décadas seguintes, limitavam seu desenvolvimento. Nesse período não eram bem entendidas as propriedades dos semicondutores e a ausência de computadores dificultava a solução de problemas mais complexos. Do ponto de vista experimental, não havia amostras de qualidade e os experimentos baseados em campos elétricos fornecem informações pouco específicas sobre a função de distribuição dos portadores – por exemplo, no caso das propriedades de transporte, os resultados são geralmente obtidos através de médias sobre os estados eletrônicos.

Com o tempo, algumas destas dificuldades foram superadas, mas até a década de 60 a pesquisa sobre portadores quentes e fenômenos de não-equilíbrio em semicondutores estava baseada na aplicação de campos elétricos intensos na amostra. Contudo, muitos avanços foram alcançados na compreensão dos processos de não-equilíbrio e dos mecanismos de interação portadores-fônons, como podemos verificar nos trabalhos de Conwell[11]. Nessa época ocorreram importantes aplicações destes conceitos em dispositivos eletrônicos [12]; alguns exemplos são os diodos Gunn e IMPATT (Impact Transit Time).

Ao final da década de 60² notou-se que o estudo dos portadores quentes, e de sua termalização, poderia ser feita de maneira mais precisa por meio de técnicas ópticas

²A motivação para isso foi, talvez, a invenção do laser no começo dos anos 60.

[13, 15], tais como fotoluminescência, absorção ou espalhamento Raman. Porém, o grande impulso à pesquisa experimental de portadores quentes veio nos anos 70, com a geração de pulsos de luz muito energéticos e de duração de alguns picosegundos.

Os pulsos de laser passaram, então, a ser usados no estudo da relaxação em duas etapas. A primeira delas ao criar os portadores: em intervalos de tempo muito curtos estes pulsos de laser podem gerar plasmas eletrônicos de altíssimas densidades e com uma dispersão em energia muito pequena³, ou seja, portadores com praticamente a mesma energia. A etapa seguinte consiste em monitorar a relaxação térmica do plasma, através da emissão de um segundo pulso "monocromático" de menor intensidade, e posterior medida da absorção (ou transmissão) deste. Atualmente é comum a geração de pulsos com largura de dezenas de femtosegundos, com eles pode-se acompanhar a evolução dos portadores fotoexcitados desde os primeiros instantes de sua criação até o momento de poderem ser descritos por funções de distribuições de quasi-equilíbrio; processo que dura menos de 1ps, dependendo da concentração do plasma [16]. A duração dos pulsos define a precisão temporal do experimento, e somente por seu intermédio, é possível estudar diretamente fenômenos que ocorrem em escalas de tempo da ordem de femtosegundos.

A geração de pulsos ópticos ultracurtos, capazes de criar plasmas eletrônicos com altas densidades e energias cinéticas, tornou possível a observação experimental de um efeito conhecido como geração de fônons quentes. Os fônons quentes são produzidos em quantidade suficiente para sua detecção quando os elétrons (principalmente estes, pois podem ser criados com maior energia cinética) são excitados a estados bem acima do gap de energia, podendo relaxar livremente e emitir fônons em grande quantidade. Kocevar [17]-[19] foi um dos primeiros a observar e tratar este problema.

Outras frentes de pesquisas atuais, envolvendo portadores quentes e seus processos de relaxação, estão ligadas tanto ao conhecimento e descrição destes efeitos como à sua aplicação tecnológica. Entre estes temas podemos destacar – inicialmente aqueles referentes à pesquisa básica – o estudo de portadores quentes em sistemas de baixa dimensionalidade [20]; o efeito de fônons quentes no processo de relaxação [21]; a solução numérica

³Pelo princípio da incerteza, um pulso de largura igual a 0.5ps tem uma dispersão em energia de 1.3meV.

[25] e o acompanhamento experimental [6] da dinâmica de portadores quentes em tempos da ordem de femtosegundos; etc. Quanto às aplicações tecnológicas citamos o estudo da teoria de lasers semicondutores com efeitos de muitos corpos [26]; chaveamento eletrônico em picosegundos [27]; geração de radiação na faixa de THz por meio de excitação óptica em GaAs [28]; etc.

Neste trabalho analisamos o processo de criação e relaxação térmica de um plasma eletrônico criado por pulsos ópticos ultracurtos em um cristal de GaAs. A geração de fônons quentes, bem como seu papel na termalização dos portadores, e a influência da densidade de portadores sobre a dinâmica deste sistema fora de equilíbrio são os principais tópicos deste estudo. Para isso consideramos a interação do plasma com fônons ópticos e acústicos, apreciando a importância de cada um destes ramos durante o processo, porém, de forma especial, os fônons LO, que se acoplam muito intensamente aos portadores. Os fônons LO são tratados de duas maneiras distintas para melhor entendermos suas características dinâmicas: como uma população internamente termalizada e, mais detalhadamente, como uma população completamente fora do equilíbrio. Também levamos em conta a interação anarmônica entre fônons e a difusão ambipolar. Vamos considerar os portadores em regime de quasi-equilíbrio interno; o que corresponde à terceira fase na divisão em etapas, feita pouco anteriormente, para a relaxação térmica.

A escolha do GaAs como o meio físico onde estudamos a relaxação do plasma opticamente excitado é devida: em primeiro lugar, à sua qualidade de típico semicondutor do grupo III-V, donde esperamos que as conclusões e resultados aqui obtidos possam ser aplicados a diferentes semicondutores deste grupo, ou mesmo a compostos de outros grupos. A outra motivação foi seu enorme emprego na pesquisa, e também fabricação, de componentes eletrônicos e optoeletrônicos (os últimos processam conjuntamente sinais luminosos e elétricos). Com a incessante busca por velocidade e miniaturização dos dispositivos, tais materiais são levados à condições cada vez mais distantes de seu estado de equilíbrio e um estudo que considere processos de não-equilíbrio em semicondutores faz-se necessário.

Nos capítulos seguintes vamos apresentar com detalhes o modelo utilizado e construir o sistema de equações que descrevem a relaxação do plasma. No quinto capítulo

apresentamos resultados e análises, conjuntamente. As apreciações finais estão no sexto capítulo.

Capítulo 2

Um modelo para o estudo da relaxação em semicondutores

O Arseneto de Gálio (GaAs) é o sistema físico onde realizamos nosso estudo, e neste capítulo vamos estabelecer suas principais características e as aproximações mais importantes para o estudo dos fenômenos de relaxação térmica.

O cristal de GaAs, cuja estrutura de bandas está representada na figura 2.1, é um semicondutor do grupo III-V de simetria Zinc-Blende [29]. Não consideramos dopantes ou impurezas, portanto, neste trabalho, nossa amostra de arseneto de gálio é suposta intrínseca.

Estabelecemos como estados de valência do cristal apenas aqueles pertencentes à banda de buracos pesados. A banda de buracos leves é desconsiderada porque possui uma densidade de estados muito menor que aquela dos pesados; isto faz com que a quantidade de buracos em seus níveis seja baixa, tornando este ramo pouco relevante para o estudo dos fluxos de partículas ou energia. Da mesma forma, a banda deslocada pela interação spin-órbita não é representada em nosso modelo. Quanto à banda de condução, somente o vale centrado no ponto Γ é considerado; os vales L e X não estão representados neste modelo porque seus mínimos situam-se a 460 meV e 310 meV , respectivamente, acima do mínimo de energia do vale central. Consideremos, como exemplo, um plasma de densidade 10^{19} cm^{-3} e temperatura $T = 1000 \text{ K}$: o potencial químico dos elétrons vale $1,66 \text{ eV}$ e

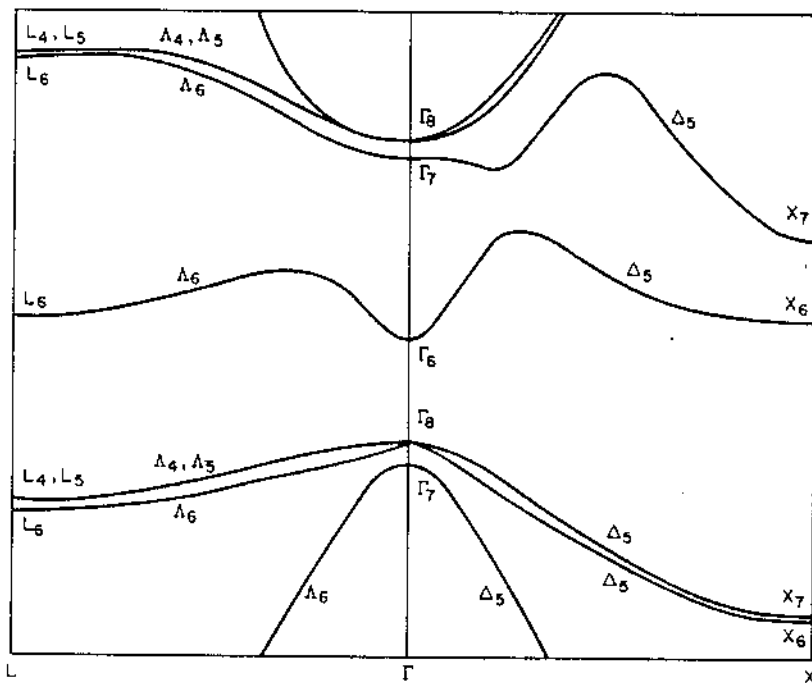


Figura 2.1: Estrutura de bandas do cristal de GaAs.

está 250 meV acima do mínimo da banda de condução (supondo $T_R = 300 \text{ K}$), enquanto o potencial químico dos buracos é $\mu_b = -0,135 \text{ eV}$ (no modelo de banda invertida). Assim vemos que apenas uma quantidade muito pequena de portadores pode ocupar os estados eletrônicos pertencentes às bandas desprezadas. Entretanto vale ressaltar que a importância desses vales, bem como das bandas de buracos leves e deslocada, cresce com a concentração e a energia dos portadores [22].

As bandas de condução e valência serão representadas por parabolóides simétricos, com curvaturas dadas em função das respectivas massas efetivas, neste caso escalares. Para estados próximos ao centro da banda isto é sempre possível (fig- 2.1), deixando de ser uma boa aproximação conforme nos distanciamos deste ponto.

Definimos, agora, os elementos responsáveis pelo transporte de massa e energia em nosso sistema: elétrons, buracos e fônons. A denominação portadores será usada para o conjunto elétrons e buracos e os fônons serão designados por suas características particulares (ex. longitudinal(L), transversal(T), ótico(O) e acústico(A)).

Admitimos que, desde o início, os portadores estão internamente termalizados

e podem ser descritos por funções de Fermi-Dirac caracterizadas por apenas dois parâmetros dependentes do tempo (ou até da posição, porém não neste trabalho) , tais como: quasi-temperaturas e quasi potenciais químicos. Portanto a evolução temporal destes parâmetros determina a dos portadores. O termo quasi, para nós , tem sentido de semelhante e presta-se ao fato de lembrar-nos que estes parâmetros são somente análogos daqueles definidos apenas para sistemas em equilíbrio.

A justificativa para este procedimento está na interação Coulombiana, que é muito forte e distribui com muita eficiência a energia dos portadores através dos níveis eletrônicos. Isto nos permite supôr que os portadores estão internamente termalizados , ou seja, elétrons e buracos têm quasi-temperaturas definidas e iguais ; assim permanecendo durante todo o processo de relaxação. A interação elétron-elétron (buraco-buraco) provoca a termalização dos elétrons (buracos) e a interação elétron-buraco estabelece uma quasi temperatura única para o sistema de portadores [16] [3]. A hipótese da termalização dos portadores apresenta-se bastante dependente da concentração destes. Collet et al. [16] mostram que um plasma extremamente distante do equilíbrio, e de concentração $3 \cdot 10^{17} \text{port/cm}^3$, atinge uma distribuição de Fermi-Dirac em pouco mais de 0.5 picosegundos, enquanto que um plasma próximo à concentração de Mott ($\sim 10^{16} \text{port/cm}^3$) leva aproximadamente 1 ps para termalizar. O acoplamento Coulombiano é mais forte que aqueles ligados ao espalhamento elétron-fônon , inclusive a interação polar óptica, que é muito importante em semicondutores polares.

Os quasi-potenciais químicos não são iguais para elétrons e buracos, devido a grande diferença entre suas massas efetivas [12].

Quanto aos fônons, não compõem um único sistema; os fônons transversais ópticos e os ramos acústicos são considerados em equilíbrio térmico a uma temperatura fixa T_R e constituem o banho térmico, sendo T_R a temperatura da rede. Por outro lado, os fônons LO formam um sistema fora do equilíbrio. Esta distinção é devida à interação polar óptica, responsável pelo forte acoplamento entre portadores e fônons LO, que resulta num grande fluxo de energia entre estes dois sistemas. Sobre os fônons LO falamos mais detalhadamente.

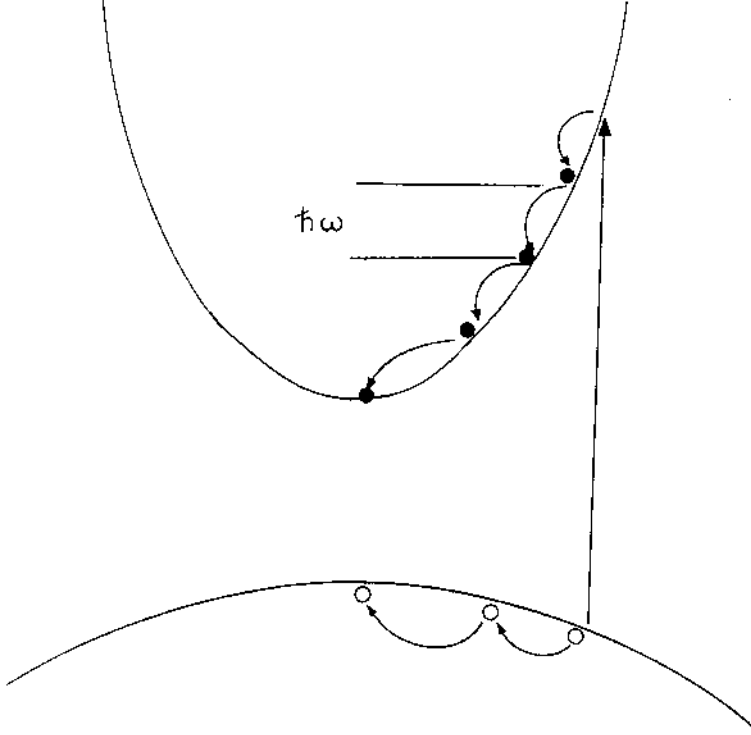


Figura 2.2: Relaxação de um elétron quente

A desigualdade entre as taxas de geração e decaimento é a principal responsável por termos um sistema de fônons LO altamente fora do equilíbrio. Ao criarmos um portador quente ele interage fortemente com os fônons LO, perdendo seu excesso de energia por meio da interação polar óptica, até atingir o fundo da banda de condução, ou o topo da banda de valência no caso dos buracos (vide figura (2.2)). O tempo de vida de um elétron (ou buraco) submetido à interação polar é da ordem de 200 fs e durante o processo de relaxação vários fônons LO são emitidos ¹ se o portador possui grande energia cinética. Por outro lado, os fônons LO levam um tempo bem maior para decaírem em fônons do banho térmico: $\tau_{lo} \simeq 5\text{ ps}$ quando $T_R = 300\text{ K}$ [23]. Tal diferença causa uma produção excessiva de fônons LO, que permanecem longamente excitados; a este excesso de fônons dá-se o nome de fônons quentes.

Usualmente dois tratamentos são empregados na descrição de fônons fora do equilíbrio. O mais simples desconsidera alguns aspectos da interação portadores-fônons e

¹Fônons TO e AC também são gerados. Entretanto, à temperatura ambiente [37] e densidades de portadores menores que 10^{19} cm^{-3} a produção de fônons LO é predominante.

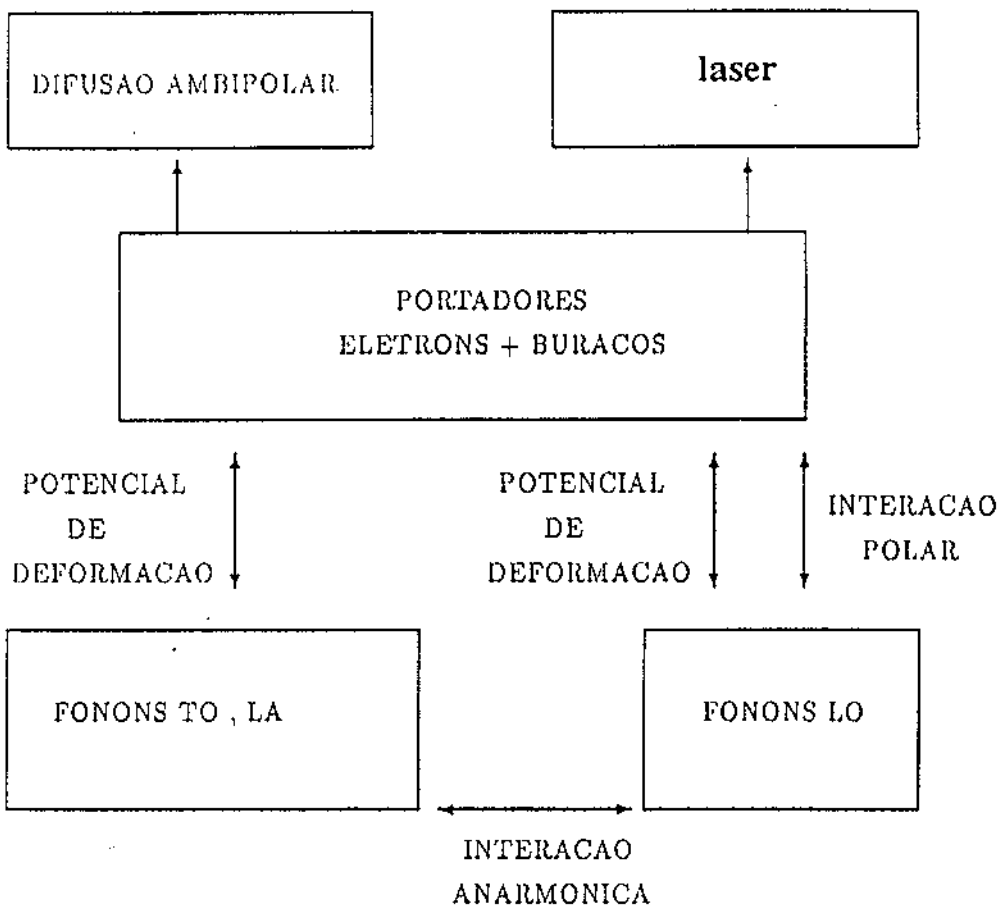


Figura 2.3: Esquema das interações consideradas por este modelo.

os assume internamente termalizados; descritos por uma distribuição do tipo Planck que é caracterizada pela quasi-temperatura T_{lo} . A segunda forma é mais rigorosa e busca representar com fidelidade os mecanismos que não são levados em conta no primeiro caso: a conservação de energia e momentum cristalino durante a colisão portadores-fônons, e a dependência do elemento de matriz da interação polar com q (o vetor de onda do fônon envolvido). Assim, neste segundo caso, os fônons LO são tratados como uma população completamente fora do equilíbrio e sua evolução temporal deve ser calculada modo-a-modo, sem a conveniência de um parâmetro único (T_{lo}) capaz de descrever sua dinâmica ao longo do tempo. Nos capítulos seguintes discutimos mais detalhadamente ambos os procedimentos. Em compostos III-V fônons AC e TO ocorrem, comparativamente, em menor escala, de forma que vamos desconsiderá-los. Entretanto, existem condições de temperatura [31] e concentração [23], distintas das consideradas neste trabalho, onde eles são importantes.

Fazemos também algumas aproximações nas funções de dispersão dos fônons. Os modos ópticos, devido a sua pequena dispersão, serão descritos por uma única frequência, independente do vetor de onda - modelo de Einstein. Os modos acústicos serão represen-

tados pelo modelo de Debye.

A seguir, estabelecemos as interações que surgem ao longo do processo de relaxação. As formas de colisão consideradas neste trabalho estão representadas na figura 2.3 e são : portadores-fônons LO via potencial de Fröhlich blindado, portadores-fônons ópticos via potencial de deformação, portadores-fônons acústicos via potencial de deformação, fônons LO-banho térmico via interação anarmônica , absorção radiativa e difusão ambipolar.

O espalhamento Coulombiano não é tratado explicitamente já que supomos um sistema de portadores termalizados; a interação entre portadores ainda se faz sentir neste modelo quando consideramos o termo de blindagem na interação polar.

Com isso descrevemos qualitativamente as características mais relevantes deste modelo. No próximo capítulo construiremos as equações que descrevem a evolução temporal das quasi-temperaturas e quasi potenciais químicos para, em seguida, calcularmos e analisarmos os fluxos de massa e energia , derivados das interações propostas acima.

Capítulo 3

Equações para a evolução temporal do sistema

3.1 Equação de Boltzmann e termos de interação

Vamos obter, neste capítulo, um sistema de equações capaz de descrever a evolução temporal dos portadores e fônons LO; para isso usaremos a equação de Boltzmann.

Obtida inicialmente para estudar gases rarefeitos, a equação de Boltzmann, tem sido usada com sucesso na solução de muitos problemas de estado sólido [30]. Entre eles citamos: a questão da condutividade térmica em metais, fenômenos de equilíbrio e não-equilíbrio em sistemas de muitos corpos, propriedades de transporte em sólidos, etc. Entretanto, sabe-se também que há muitos problemas que estão além deste formalismo simples. Para estes casos há métodos mais poderosos como o formalismo das funções de correlação de Mori [32], o método do Operador Estatístico de Não-Equilíbrio devido à Zubarev [33], além dos trabalhos de Robertson ligados a Teoria de Informação [34] e outros. A descrição destes métodos não se aplica a este trabalho e sugerimos aos leitores interessados consultar as referências apresentadas acima.

À primeira vista pode parecer inapropriado, uma equação elaborada para tratar estatisticamente gases rarefeitos, obtida ao final do século passado, descrevendo a relaxação térmica de semicondutores; dado que os sólidos são materiais com densidades de partículas

da ordem do número de Avogadro e fortemente interagentes.

Uma resposta qualitativa para esta questão está no formalismo que dispensamos aos portadores e às excitações elementares do cristal. O elétron de Bloch, uma quasi-partícula, bem como o buraco, trazem incorporados a si muitas propriedades resultantes de suas interações com o potencial periódico da rede cristalina – supondo-a estática e a interação Coulombiana na aproximação de campo médio. Deste formalismo surgem as bandas de energia, as massas efetivas e por fim, como consequência, o tratamento semi-clássico dado a estas partículas. Ao considerarmos as interações dos portadores com as vibrações da rede cristalina, os fônons, também quasi-partículas, supomos que este acoplamento é suficientemente fraco para ser tratado por uma teoria de perturbação de primeira ordem. Enfim, temos um gás de pseudo-partículas fracamente interagentes, o que justifica o emprego da equação de Boltzmann.

A equação de Boltzmann, em sua forma geral para os sólidos, é [36]

$$\frac{df_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}, t)}{dt} = \frac{\partial f_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}, t)}{\partial t} + v_{\vec{k}}^{\alpha} \cdot \nabla_{\vec{r}} f_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}, t) + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}, t) = \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}, t)}{\partial t} \right|_{int}, \quad (3.1)$$

onde $f_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}, t)$ é a função de distribuição, de uma quasi-partícula, α designa um elétron ou buraco, $\vec{v}_{\vec{k}}$ é a velocidade de grupo do portador, \vec{F} representa a influência de um campo externo sobre o sistema e o último termo, mais à direita, introduz as interações descritas no esquema da figura 2.3.

Porém, na ausência de campos macroscópicos nós fazemos

$$\frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}, t) = 0. \quad (3.2)$$

Segundo nosso tratamento, o termo que descreve a dependência espacial da função de distribuição ($\nabla_{\vec{r}} f_{\vec{k}}^{\alpha}(\vec{r}, t)$) também deve anular-se, porque consideramos populações (e propriedades) locais para os portadores. Assim (3.1) transforma-se em

$$\frac{df_{\vec{k}}^{\alpha}(t)}{dt} = \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}^{\alpha}(t)}{\partial t} \right|_{int}, \quad (3.3)$$

e podemos escrever, de acordo com nosso modelo

$$\begin{aligned} \frac{df_{\vec{k}}^{\alpha}(t)}{dt} = & \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}^{\alpha}(t)}{\partial t} \right|_{LASER} + \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}^{\alpha}(t)}{\partial t} \right|_{FR} + \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}^{\alpha}(t)}{\partial t} \right|_{OPT,DF} + \\ & \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}^{\alpha}(t)}{\partial t} \right|_{AC} + \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}^{\alpha}(t)}{\partial t} \right|_{DIF}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

para os seguintes termos definidos:

LASER \equiv geração de portadores livres pelo pulso óptico;

FR \equiv interação dos portadores com fônons LO por interação polar;

OPT,DF \equiv interação entre portadores e fônons ópticos via interação não polar;

AC \equiv interação portadores-fônons acústicos via potencial de deformação;

DIF \equiv difusão ambipolar de portadores.

Os termos de interação, excessão feita à anarmônica e à difusão ambipolar, são equações de fluxo do tipo [36]

$$\left. \frac{\partial f_{\vec{k}}^{\alpha}(t)}{\partial t} \right|_{int} = \sum_{\vec{k}'} \left\{ f_{\vec{k}'}^{\alpha} (1 - f_{\vec{k}}^{\alpha}) W^{\alpha}(\vec{k}', \vec{k}) - f_{\vec{k}}^{\alpha} (1 - f_{\vec{k}'}^{\alpha}) W^{\alpha}(\vec{k}, \vec{k}') \right\}. \quad (3.5)$$

onde o primeiro termo representa o fluxo de partículas que passam a acupar o estado eletrônico \vec{k} , e o segundo descreve o fenômeno contrário, como representamos na figura 3.1. A expressão $W^{\alpha}(\vec{k}', \vec{k})$ é a frequência de transição quântica do estado \vec{k}' para o \vec{k} , obtida a partir da Regra de Ouro de Fermi mediada sobre o ensemble de fônons (ou fótons) [36]

$$\begin{aligned} W(\vec{k}', \vec{k}) = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}, \lambda} |(\vec{k} + \vec{q}| H' | \vec{k})|^2 \left\{ \nu_{\vec{q}, \lambda} \delta(E_{\vec{k}'}^{\alpha} - E_{\vec{k}}^{\alpha} - \hbar\omega_{\vec{q}, \lambda}) \delta_{\vec{k}', \vec{k} + \vec{q}} \right. \\ & \left. + (\nu_{\vec{q}, \lambda} + 1) \delta(E_{\vec{k}'}^{\alpha} - E_{\vec{k}}^{\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q}, \lambda}) \delta_{\vec{k}', \vec{k} - \vec{q}} \right\}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Na equação (3.6), as funções delta representam a conservação de energia e momentum cristalino, enquanto $\nu_{\vec{q}, \lambda}$ é a função de distribuição de fônons ou (fótons), \vec{q} seu

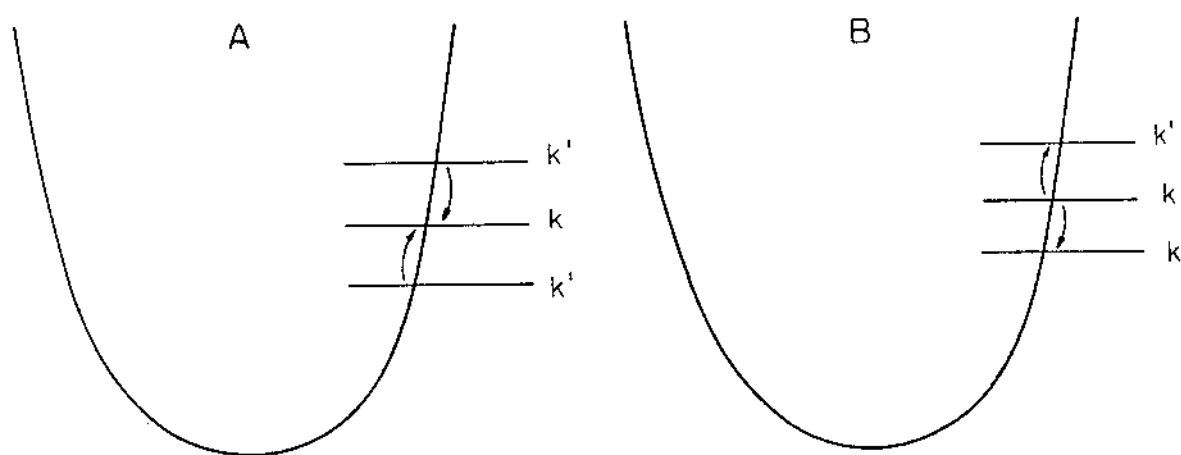


Figura 3.1: Figura a: fluxo de partículas para o estado \vec{k} . Figura b: fluxo de partículas saindo do estado \vec{k}' .

vetor de onda e λ a polarização. Ela descreve dois fenômenos distintos: o primeiro termo representa a absorção de um fônon (ou fóton) de energia $\hbar\omega_{\vec{q},\lambda}$ pelos portadores e o segundo a emissão. A forma de $W^\alpha(\vec{k}', \vec{k})$ é a mesma de $W^\alpha(\vec{k}, \vec{k}')$, bastando trocar \vec{k} por \vec{k}' para obtê-la.

Quanto à difusão ambipolar e à interação anarmônica, são descritas por expressões muito complexas, que estão além das expectativas deste trabalho. Para descrevê-las utilizamos uma forma simplificada, conhecida (e aplicada em muitas áreas da física) como aproximação de tempo de relaxação

$$\left. \frac{\partial f_{\vec{k}}^\alpha(t)}{\partial t} \right|_{ini} = -\frac{f_{\vec{k}}^\alpha - f_{\vec{k}}^\alpha(equil)}{\tau_{rel}} \quad (3.7)$$

Em (3.7), $f_{\vec{k}}^\alpha(equil)$ representa a distribuição de portadores (ou fônons, ν , se for o caso) no equilíbrio e τ_{rel}^{-1} é o parâmetro que determina a velocidade de relaxação do processo considerado.

Todos os termos de interação serão discutidos individualmente no capítulo seguinte.

3.2 Evolução temporal das variáveis intensivas

As populações fora do equilíbrio que criamos têm como característica seu excesso de energia e o excesso de partículas, portanto a evolução temporal destas variáveis extensivas deve determinar o processo de relaxação térmica. Utilizando a equação (3.4) podemos descrever

a dinâmica da densidade de energia dos portadores como

$$\begin{aligned} \dot{U}^P &= \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}}^{\alpha} \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}^{\alpha}(t)}{\partial t} \right|_{int} \\ &= \dot{U}^{LASER} + \dot{U}^{FR} + \dot{U}^{OPT,DF} + \dot{U}^{AC} + \dot{U}^{DIF}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

onde $E_{\vec{k}}^{\alpha}$ é a energia do estado eletrônico \vec{k} . À direita de (3.8) temos:

$\dot{U}^{LASER} \equiv$ excitação dos portadores devido ao laser;

$\dot{U}^{FR} \equiv$ relaxação de energia dos portadores por interação polar;

$\dot{U}^{OPT,DF} \equiv$ relaxação de energia dos portadores por interação não polar com os fônons ópticos;

$\dot{U}^{AC} \equiv$ relaxação de energia portadores-fônons acústicos via potencial de deformação;

$\dot{U}^{DIF} \equiv$ fluxo de energia dos portadores para fora da região ativa devido à difusão ambipolar.

A evolução das densidades de portadores são dadas por

$$\dot{N}^e = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{\partial f_{\vec{k}}^e}{\partial t} = \dot{N}^{LASER} + \dot{N}^{DIF} \quad (3.9)$$

$$\dot{N}^b = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{\partial f_{\vec{k}}^b}{\partial t} = \dot{N}^{LASER} + \dot{N}^{DIF}, \quad (3.10)$$

onde definimos:

$\dot{N}^{LASER} \equiv$ geração de portadores livres pelo laser;

$\dot{N}^{DIF} \equiv$ fluxo de pares de portadores para fora da região ativa.

Como nosso cristal é intrínseco e a difusão ambipolar envolve o par elétron-buraco temos $\dot{N}^e = \dot{N}^b$.

Ao supôr que as funções de Fermi-Dirac representam instantaneamente o plasma eletrônico, estabelecemos que sua evolução temporal é determinada pela progressão

no tempo de três variáveis intensivas capazes de definir as funções de distribuição dos portadores a cada instante de tempo; são elas: a quasi-temperatura (T) e os quasi potenciais químicos de elétrons (μ^e) e buracos (μ^b). A relação entre as equações (3.8 - 3.10) e os parâmetros intensivos é obtida ao diferenciarmos a densidade de energia (U) e as densidades de portadores (N^e e N^b) com relação ao tempo.

$$\dot{U}^P = \frac{\partial U^P}{\partial \beta} \dot{\beta} + \frac{\partial U^P}{\partial \mu^e} \dot{\mu}^e + \frac{\partial U^P}{\partial \mu^b} \dot{\mu}^b \quad (3.11)$$

$$\dot{N}^e = \frac{\partial N^e}{\partial \beta} \dot{\beta} + \frac{\partial N^e}{\partial \mu^e} \dot{\mu}^e \quad (3.12)$$

$$\dot{N}^b = \frac{\partial N^b}{\partial \beta} \dot{\beta} + \frac{\partial N^b}{\partial \mu^b} \dot{\mu}^b, \quad (3.13)$$

onde

$$U^P = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} E_k^{\alpha} \frac{1}{e^{\beta(E_k^{\alpha} - \mu^{\alpha})} + 1} \quad (3.14)$$

$$N^{\alpha} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\beta(E_k^{\alpha} - \mu^{\alpha})} + 1} \quad (3.15)$$

$$(3.16)$$

O termo β é definido como $\beta = 1/kT$, onde k é a constante de Boltzmann.

Igualando as expressões (3.8 - 3.10) com as respectivas diferenciais (3.11 - 3.13), obtemos um conjunto de equações integro-diferenciais acopladas para as variáveis intensivas, que devem ser resolvidas numericamente, pois as integrais dos termos de colisão não possuem solução analítica.

Para os fônons LO, quando descritos pela distribuição de Planck, escrevemos facilmente, à maneira feita para os portadores,

$$\dot{U}^{LO} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \dot{\nu}_{\vec{q}}^{LO} \hbar \omega_{lo} = -\dot{U}^{FR} - \dot{U}^{OPT,DF} + \dot{U}^{BANHO}. \quad (3.17)$$

onde \vec{q} é o vetor de onda do fônon, $\nu_{\vec{q}}$ é a função de distribuição de Planck, com quasi-temperatura $T_{l_0}(t)$, e \dot{U}^{BANHO} a taxa de relaxação de energia dos fônons LO para o banho térmico devido à interação anarmônica. Derivando U^{LO} em relação ao tempo e igualando o resultado a (3.17) obtemos

$$\dot{U}^{LO} = \frac{\partial U^{LO}}{\partial \beta_{l_0}} \dot{\beta}_{l_0} \quad (3.18)$$

$$\dot{\beta}_{l_0} = \dot{U}^{LO} \cdot \left(\frac{\partial U^{LO}}{\partial \beta_{l_0}} \right)^{-1}, \quad (3.19)$$

com

$$U^{LO} = \frac{\hbar\omega_{l_0}}{V} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{e^{\beta_{l_0}\hbar\omega_{l_0}} - 1}, \quad (3.20)$$

donde calculamos os valores T_{l_0} para cada instante de tempo. Desta forma podemos acompanhar a evolução temporal dos fônons LO quando estes são considerados um sistema internamente termalizado.

No caso de fônons LO não termalizados T_{l_0} (ou β_{l_0}) deixa de ser um parâmetro capaz de descrever este sistema, devemos, então, considerar especificamente a população de fônons LO para cada vetor de onda \vec{q} . Neste caso fazemos

$$\dot{\nu}_{\vec{q}}^{LO} = \dot{\nu}_{\vec{q}}^{FR} + \dot{\nu}_{\vec{q}}^{LO,DF} + \dot{\nu}_{\vec{q}}^{BANHO}, \quad (3.21)$$

onde os termos acima são calculados por equações de fluxo, ou pela aproximação de tempo de relaxação, e representam:

$\dot{\nu}_{\vec{q}}^{FR} \equiv$ evolução dos fônons LO de vetor de onda \vec{q} devido à interação polar;

$\dot{\nu}_{\vec{q}}^{LO,DF} \equiv$ evolução dos fônons LO de vetor de onda \vec{q} devido à interação não polar via potencial de deformação óptico e

$\dot{\nu}_{\vec{q}}^{BANHO} \equiv$ interação dos fônons LO de vetor de onda \vec{q} com os modos que compõem o banho térmico.

Capítulo 4

Cálculo dos termos de interação

4.1 Interação da amostra com a radiação

A radiação incidente na amostra é responsável pela geração dos portadores (elétrons e buracos) fora do equilíbrio; se a energia cinética do par de portadores criado for maior que a energia térmica do cristal, cujo valor estimado é kT , teremos um par de portadores quentes que deve perder seu excesso de energia para os fônons durante o processo de relaxação térmica. À temperatura ambiente, no GaAs intrínseco, a concentração de elétrons na banda de condução (também buracos na banda de valência) tem valor aproximado de 10^6 port/cm^3 , desprezível quando comparado com o número de portadores gerados pela radiação.

Das características deste material, estabelecemos o formalismo e as aproximações pertinentes. O GaAs é um semicondutor de gap direto e, como consideramos no início, intrínseco. Portanto consideramos apenas transições diretas entre as bandas de valência e condução onde o vetor de onda eletrônico é conservado ($\Delta\vec{k} = 0$, também conhecida como aproximação de dipolo). A transição indireta é um fenômeno de segunda ordem em teoria de perturbação, sendo bem menos intensa que na aproximação de dipolo, por isso será desconsiderada – entretanto, conforme cresce a população de portadores nas bandas do centro da zona de Brillouin, a importância da transição indireta, que gera portadores nos vales laterais, aumenta.

A absorção de fótons pelos portadores livres (absorção intrabanda), emissão Auger e outros efeitos que podem surgir deste tipo de interação serão desconsiderados. Também supomos que os fótons interagem apenas com os elétrons de valência, mas não com os fônons.

No semiconductor intrínseco o número de elétrons, gerados na banda de condução, é igual ao número de buracos que são criados na banda de valência. Portanto fazemos

$$\left. \frac{\partial N^e}{\partial t} \right|_{LASER} = \left. \frac{\partial N^b}{\partial t} \right|_{LASER} = \left. \frac{\partial N}{\partial t} \right|_{LASER} . \quad (4.1)$$

Na aproximação de dipolo ($\vec{q} = 0$), a evolução da população no estado eletrônico \vec{k} é dado por

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right|_{LASER} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}, \lambda} \left\{ |M_{\vec{q}}^-|^2 (1 - f_{\vec{k}}^b) (1 - f_{\vec{k}}^e) \right. \\ &\quad \left. - |M_{\vec{q}}^+|^2 f_{\vec{k}}^e f_{\vec{k}}^b \right\} \delta \left(E_{\vec{k}}^e + E_{\vec{k}}^b - \hbar\omega_{\vec{q}, \lambda} \right) , \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde os termos $f_{\vec{k}}^e$ e $f_{\vec{k}}^b$ referem-se às funções de distribuição de elétrons na banda de condução, e buracos na banda de valência, respectivamente; de maneira análoga temos $E_{\vec{k}}^e$ e $E_{\vec{k}}^b$. Como foi dito, não consideramos a banda de buracos leves e aquela deslocado por interação spin-órbita.

Os elementos de matriz $M_{\vec{q}}^{\pm}$, presentes em (4.2) tem a seguinte forma [35]

$$|M_{\vec{q}}^{\pm}|^2 = \frac{1}{V} \left(\frac{e}{mc} \right)^2 \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{\epsilon_{\infty} \omega_{\vec{q}, \lambda}} \right) \left(N_{\vec{q}, \lambda}^{rad} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) | \langle u_{\vec{k}}^e | \hat{\lambda} \vec{p} | u_{\vec{k}}^v \rangle |^2 , \quad (4.3)$$

onde $N_{\vec{k}, \lambda}^{rad}$ é a distribuição de fótons no feixe de laser (ou a forma do pulso, se for este o caso), $u_{\vec{k}}$ é a parte periódica da função de Bloch, \vec{p} é o momentum do portador e $\hat{\lambda}$ a polarização do fóton. O sinal +, acima, representa a emissão de fótons e o sinal - a absorção de fótons pela amostra. O cálculo do elemento de matriz $\langle u_{\vec{k}}^e | \hat{\lambda} \vec{p} | u_{\vec{k}}^v \rangle$ é difícil de ser realizado diretamente, ou seja, por meio da aplicação explícita das funções de Bloch, pois raramente estas funções são conhecidas. Entretanto existe um método [35] que pode nos dar uma

estimativa deste valor, ele é conhecido como "f-sum rule" e baseia-se na soma das forças de oscilador para diversas transições (este método esta diretamente ligado à definição das massas efetivas). Segundo este cálculo

$$| \langle u_{\vec{k}}^c | \hat{\lambda} \vec{p} | u_{\vec{k}}^v \rangle |^2 \sim \frac{m^2 \hbar \omega_{\vec{q},\lambda}}{4\mu^*}, \quad (4.4)$$

se definimos a grandeza $\mu^* = \frac{m_e^* m_b^*}{m_e^* + m_b^*}$

Substituindo (4.4) e (4.3) em (4.2) obtemos, para a evolução temporal da população de portadores devido à ação do laser

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right|_{LASER} &= \sum_{\vec{q},\lambda} \frac{e^2 \pi^2 \hbar}{\epsilon_{\infty} \mu} \left\{ N_{\vec{q},\lambda}^{rad} (1 - f_{\vec{k}}^b) (1 - f_{\vec{k}}^e) \right. \\ &\quad \left. - (N_{\vec{q},\lambda}^{rad} + 1) f_{\vec{k}}^e f_{\vec{k}}^b \right\} \delta \left(E_{\vec{k}}^e + E_{\vec{k}}^b - \hbar \omega_{\vec{q},\lambda} \right). \end{aligned} \quad (4.5)$$

A expressão que vemos acima leva em conta os fenômenos de absorção de fótons e emissão, espontânea e estimulada. Entretanto, diante dos processos estimulados, a emissão espontânea de fótons pode ser desconsiderada, porque ocorre em taxas bem menores. É o que fazemos abaixo

$$\left. \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right|_{LASER} = \sum_{\vec{q},\lambda} \frac{e^2 \pi^2 \hbar}{\epsilon_{\infty} \mu} N_{\vec{q},\lambda}^{rad} \left(1 - f_{\vec{k}}^e - f_{\vec{k}}^b \right) \delta \left(E_{\vec{k}}^e + E_{\vec{k}}^b - \hbar \omega_{\vec{q},\lambda} \right), \quad (4.6)$$

donde obtemos, em seguida, a variação na densidade de portadores provocada pelo laser

$$\left. \frac{\partial N}{\partial t} \right|_{LASER} = \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q},\lambda} \frac{2}{V} \frac{e^2 \pi^2 \hbar}{\epsilon_{\infty} \mu} N_{\vec{q},\lambda}^{rad} \left(1 - f_{\vec{k}}^e - f_{\vec{k}}^b \right) \delta \left(E_{\vec{k}}^e + E_{\vec{k}}^b - \hbar \omega_{\vec{q},\lambda} \right). \quad (4.7)$$

A função delta, que representa a conservação de energia durante o processo, resulta em

$$k^2 = \frac{2\mu^*}{\hbar^2} (\hbar \omega_{\vec{q},\lambda} - E_g). \quad (4.8)$$

Somando sobre \vec{k} encontramos

$$\frac{\partial N}{\partial t} \Big|_{LASER} = \sum_{\vec{q}, \lambda} \frac{e^2}{\epsilon_\infty \hbar} \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} (\hbar\omega_{\vec{q}, \lambda} - E_g) \right]^{\frac{1}{2}} N_{\vec{q}, \lambda}^{rad} (1 - f^e - f^b) , \quad (4.9)$$

onde

$$f^e = \left\{ \exp \left[\beta \left(\frac{\mu}{m_e^*} (\hbar\omega_{\vec{q}, \lambda} - E_g) + E_g - \mu^e \right) \right] + 1 \right\}^{-1} \quad (4.10)$$

$$f^b = \left\{ \exp \left[\beta \left(\frac{\mu}{m_b^*} (\hbar\omega_{\vec{q}, \lambda} - E_g) - \mu^b \right) \right] + 1 \right\}^{-1} . \quad (4.11)$$

Podemos redefinir a expressão (4.9) utilizando o coeficiente de absorção óptico $\alpha(\vec{q}, \lambda; t)$ [35],

$$\frac{\partial N}{\partial t} \Big|_{LASER} = \sum_{\vec{q}, \lambda} \alpha(\vec{q}, \lambda) N_{\vec{q}, \lambda}^{rad}(t) , \quad (4.12)$$

de forma que,

$$\alpha(\vec{q}, \lambda; t) = \frac{e^2}{\sqrt{\epsilon_\infty} \hbar c} \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} (\hbar\omega_{\vec{q}, \lambda} - E_g) \right]^{\frac{1}{2}} (1 - f^e - f^b) . \quad (4.13)$$

Por fim, sabendo a forma do pulso fica determinada a taxa com que são criados portadores no material; para $\alpha > 0$ temos o processo de absorção e para $\alpha < 0$ ocorre a emissão estimulada – este último é a base de funcionamento dos lasers, quando obtemos a inversão de populações.

4.2 Fônons LO em equilíbrio interno

Um par elétron-buraco, criado num semiconductor polar produz grande quantidade de fônons LO. Uma das formas de se tratar estes fônons é atribuir-lhes uma quasi-temperatura exclusiva T_{lo} , geralmente maior que a temperatura da rede; como fazemos nesta seção.

4.2.1 Interação polar via potencial de Fröhlich blindado

O movimento dos íons da rede cristalina, vibrando em frequências do ramo óptico, produz dois tipos de interações: a interação polar e a interação óptica por potencial de deformação — também chamada não polar.

A interação polar surge apenas entre os fônons LO e os portadores e é o resultado da perturbação provocada pela vibração dos íons que compõem o cristal [36]. O deslocamento de íons vizinhos com cargas iônicas opostas, provoca um potencial dipolar que perturba os portadores, causando transferência de energia e momento entre fônons LO e portadores.

Usualmente este tipo de acoplamento é o mais forte em semicondutores polares, assim sendo para um grande intervalo de temperaturas. Porém, a temperaturas abaixo do nitrogênio líquido a interação entre portadores e fônons AC torna-se mais efetiva na relaxação de energia [37]. Para portadores com energias muito altas, em alguns cristais, a interação óptica não polar pode ser mais importante; neste caso temos o espalhamento intervalar, que só ocorre efetivamente para portadores com energia maior que a diferença de energia entre os dois vales. Para o GaAs, e a maioria dos compostos III-V, a interação polar é a principal.

A forma do elemento de matriz da interação polar foi proposta inicialmente por Fröhlich e Callen, sendo estendida posteriormente por Ehrenreich. Segundo Fröhlich, para portadores com funções de onda de simetria esférica, o módulo quadrado do elemento de matriz desta interação é

$$|\langle \vec{k} + \vec{q} | H^{FR} | \vec{k} \rangle|^2 = |M_q^{FR}|^2 = \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{LO}}{V q^2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right), \quad (4.14)$$

onde ϵ_∞ e ϵ_0 são as constantes dielétricas de alta frequência e estática, respectivamente, e q representa o módulo do vetor de onda do fônem LO.

Entretanto, outro fenômeno, que surge das interações portadores- portadores, vai influenciar este acoplamento: a blindagem eletrônica [36]. Tal mecanismo é consequência do movimento conjunto dos portadores, buscando anular os campos elétricos dentro do cristal. Da mesma forma que o potencial gerado pelos íons é blindado, as perturbações dipolares

causadas pelas vibrações da rede cristalina também são, sendo necessário acrescentar á expressão (4.14) um termo que leva em conta este fenômeno. Isto pode ser feito através de uma função dielétrica.

Supondo os portadores livres, podemos considerar que a densidade de cargas induzida é proporcional à perturbação iônica. Então, para primeira ordem em teoria de perturbação temos a função dielétrica calculada na aproximação das fases aleatórias ("random phase approximation" - RPA) [36]

$$\epsilon_{RPA}(\vec{q}, w) = 1 - \frac{4\pi e^2}{\epsilon_\infty V q^2} \sum_{\vec{k}, \alpha} \frac{f^\alpha(\vec{k} + \vec{q}) - f^\alpha(\vec{k})}{E^\alpha(\vec{k} + \vec{q}) - E^\alpha(\vec{k}) + \hbar w + i\eta} . \quad (4.15)$$

Na expressão acima, w é a frequência de perturbação e η um número real infinitesimal utilizado para facilitar os cálculos; o termo dentro da somatória é conhecido como função de Lindhard.

Porém, a fórmula (4.15) é muito difícil de ser calculada, mesmo numericamente. Uma possível simplificação é usar a aproximação estática da função dielétrica¹, na qual $w \rightarrow 0$. Além disso, se consideramos $q \ll k$ a expressão acima torna-se

$$\epsilon_{RPA} = 1 - \frac{4\pi e^2}{\epsilon_\infty V q^2} \lim_{q \rightarrow 0} \sum_{\vec{k}, \alpha} \frac{f^\alpha(\vec{k} + \vec{q}) - f^\alpha(\vec{k})}{E^\alpha(\vec{k} + \vec{q}) - E^\alpha(\vec{k})} \quad (4.16)$$

$$= 1 - \frac{4\pi e^2}{\epsilon_\infty V q^2} \sum_{\vec{k}, \alpha} \frac{df^\alpha(\vec{k})}{dE^\alpha(\vec{k})} . \quad (4.17)$$

$$\epsilon_{RPA}(\vec{q}, 0) = 1 + \frac{q_D^2}{q^2} , \quad (4.18)$$

onde q_D é o comprimento de onda de Debye-Hückel

¹Para densidades maiores que $5.10^{17} \text{ port/cm}^3$, Das Sarma et al. [38] mostram que a função dielétrica dinâmica e seu limite clássico são equivalentes na blindagem da interação polar. Este resultado é consequência do crescimento da frequência de plasma com o aumento da densidade de portadores.

$$q_D^2 = \frac{-4\pi e^2}{\epsilon_\infty V} \sum_{\vec{k}, \alpha} \frac{df^\alpha(\vec{k})}{dE^\alpha(\vec{k})} . \quad (4.19)$$

Devido a proximidade entre estados adjacentes na zona de Brillouin transformamos a somatória sobre \vec{k} em uma integral, não esquecendo da dupla degenerescência resultante do spin. Portanto, no limite em que \vec{k} pode ser considerada uma variável contínua escrevemos

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow 2 \frac{V}{8\pi^3} \int d^3\vec{k} . \quad (4.20)$$

Utilizando (4.17) e (4.20) fazemos

$$q_D^2 = \frac{e^2\beta}{\pi\epsilon_\infty} \sum_{\alpha} \int_0^{\infty} \frac{k^2 dk}{\cosh^2[\frac{\beta}{2} (E^\alpha(\vec{k}) - \mu^\alpha)]} . \quad (4.21)$$

O limite de integração superior pode ser tomado como infinito porque as funções de Fermi-Dirac anulam-se rapidamente para valores de energia acima do potencial químico do sistema.

Assim, acrescentamos ao elemento de matriz de Fröhlich o efeito da blindagem eletrônica

$$\begin{aligned} |(\vec{k} + \vec{q}|H^{FR}|\vec{k})|^2 &= |M_q^{FR}|^2 = \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{lo}}{V} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{1}{q^2 \epsilon_{RPA}^2(q, 0)} \\ &= \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{lo}}{V} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{q^2}{(q^2 + q_D^2)^2} . \end{aligned} \quad (4.22)$$

Resta-nos, então, substituir o elemento de matriz acima na expressão que descreve a relaxação de energia [36]

$$\dot{U}^{FR} = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \left\{ E_{\vec{k}}^\alpha f_{\vec{k}'}^\alpha (1 - f_{\vec{k}}^\alpha) W^\alpha(\vec{k}', \vec{k}) - E_{\vec{k}}^\alpha f_{\vec{k}}^\alpha (1 - f_{\vec{k}'}^\alpha) W^\alpha(\vec{k}, \vec{k}') \right\} , \quad (4.23)$$

como fizemos na seção 3.1, com

$$\begin{aligned}
W(\vec{k}, \vec{k}') &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}} |\langle \vec{k} + \vec{q} | H^{FR} | \vec{k} \rangle|^2 \left\{ \nu^{LO} \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'} - \hbar\omega_{l_0}) \delta_{\vec{k}, \vec{k}'+\vec{q}} \right. \\
&\quad \left. + (\nu^{LO} + 1) \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'} + \hbar\omega_{l_0}) \delta_{\vec{k}, \vec{k}'-\vec{q}} \right\}. \tag{4.24}
\end{aligned}$$

Substituindo (4.24) em (4.23) e somando sobre \vec{k}' surge

$$\begin{aligned}
\dot{U}^{FR} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V^2} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}}^{\alpha} \sum_{\vec{q}} |M_q^{FR}|^2 \left\{ f_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha} (1 - f_{\vec{k}}^{\alpha}) \nu^{LO} \delta(E_{\vec{k}}^{\alpha} - E_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha} - \hbar\omega_{l_0}) + \right. \\
&\quad f_{\vec{k}+\vec{q}}^{\alpha} (1 - f_{\vec{k}}^{\alpha}) (\nu^{LO} + 1) \delta(E_{\vec{k}}^{\alpha} - E_{\vec{k}+\vec{q}}^{\alpha} + \hbar\omega_{l_0}) - \\
&\quad f_{\vec{k}}^{\alpha} (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}}^{\alpha}) \nu^{LO} \delta(E_{\vec{k}+\vec{q}}^{\alpha} - E_{\vec{k}}^{\alpha} - \hbar\omega_{l_0}) - \\
&\quad \left. f_{\vec{k}}^{\alpha} (1 - f_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha}) (\nu^{LO} + 1) \delta(E_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha} - E_{\vec{k}}^{\alpha} + \hbar\omega_{l_0}) \right\}, \tag{4.25}
\end{aligned}$$

que após algumas manipulações algébricas pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
\dot{U}^{FR} &= \left(\frac{2\pi\omega_{l_0}e}{V} \right)^2 \hbar \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \left(\nu^{LO}(T_{l_0}) - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{l_0}} - 1} \right) \\
&\quad \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \left[f^{\alpha}(E_{\vec{k}}^{\alpha} - \hbar\omega_{l_0}) - f^{\alpha}(E_{\vec{k}}^{\alpha}) \right] \sum_q \frac{q^2}{(q^2 + q_D^2)^2} \delta(E_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha} - E_{\vec{k}}^{\alpha} + \hbar\omega_{l_0}). \tag{4.26}
\end{aligned}$$

Para a função Delta, que determina a conservação de energia durante a transição,

temos

$$\delta(E_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha} - E_{\vec{k}}^{\alpha} + \hbar\omega_{l_0}) = \frac{m_{\alpha}^*}{\hbar^2 k q} \delta \left(\frac{q}{2k} + \frac{m_{\alpha}^* \omega_{l_0}}{\hbar k q} - \cos\theta \right) \tag{4.27}$$

e

$$\begin{aligned}
\sum_{\vec{q}} \frac{q^2}{q^2 + q_D^2} \delta(E_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha} - E_{\vec{k}}^{\alpha} + \hbar\omega_{l_0}) &= \frac{m_{\alpha}^*}{\hbar^2 k} \frac{V}{8\pi^3} 2\pi \int_0^{\infty} \frac{q^3}{q^2 + q_D^2} dq \\
&\quad \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \delta \left(\frac{q}{2k} + \frac{m_{\alpha}^* \omega_{l_0}}{\hbar k q} - \cos\theta \right). \tag{4.28}
\end{aligned}$$

Aplicando o resultado (4.28) à equação (4.27) obtemos

$$\begin{aligned} \dot{J}^{FR} = & \sum_{\alpha} \frac{w_{l_0}^2 e^2 m_{\alpha}^*}{V \hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \left(\nu^{LO}(T_{l_0}) - \frac{1}{e^{\beta \hbar w_{l_0}} - 1} \right) \\ & \sum_{\vec{k}} \frac{1}{k} \left[(f^{\alpha}(E_{\vec{k}}^{\alpha} - \hbar w_{l_0}) - f^{\alpha}(E_{\vec{k}}^{\alpha})) \int_{q_{min}}^{q_{max}} \frac{q^3}{q^2 + q_D^2} dq \right], \end{aligned} \quad (4.29)$$

onde

$$\begin{aligned} q_{max} &= k + \sqrt{k^2 - \frac{2m_{\alpha}^* w_{l_0}}{\hbar}} \\ q_{min} &= k - \sqrt{k^2 - \frac{2m_{\alpha}^* w_{l_0}}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Integrando (4.29) na variável \vec{k} obtemos a expressão que descreve a relaxação de energia por interação polar.

$$\begin{aligned} \dot{J}^{FR} = & \sum_{\alpha} \frac{w_{l_0}^2 m_{\alpha}^* e^2}{\hbar \pi^2} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \left(\nu^{LO}(T_{l_0}) - \frac{1}{e^{\beta \hbar w_{l_0}} - 1} \right) \\ & \int_{\sqrt{\frac{2m_{\alpha}^* w_{l_0}}{\hbar}}}^{\infty} k \left[(f^{\alpha}(E_{\vec{k}}^{\alpha} - \hbar w_{l_0}) - f^{\alpha}(E_{\vec{k}}^{\alpha})) \left\{ \frac{1}{2} \ln \frac{q_{max}^2 + q_D^2}{q_{min}^2 + q_D^2} + \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{q_D^2}{2} \left[\frac{1}{q_{max}^2 + q_D^2} - \frac{1}{q_{min}^2 + q_D^2} \right] \right\} \right]. \end{aligned} \quad (4.31)$$

4.2.2 Interação óptica via potencial de deformação

Esta segunda modalidade de interação óptica surge das alterações causadas à banda de energia devido às vibrações da rede cristalina [37], pois as últimas mudam localmente o parâmetro de rede do cristal

Para este espalhamento temos o seguinte elemento de matriz [11]

$$|\langle \vec{k} \pm \vec{q} | H^{DEF} | \vec{k} \rangle|^2 = |M^{DEF}|^2 = \frac{(DK)_{\alpha}^2 \hbar}{2V \rho w_{\lambda}}, \quad (4.32)$$

onde ρ é a densidade do cristal, w_{λ} é a frequência do fônon e λ sua polarização, K representa um vetor da rede recíproca e D a constante de interação.

Baseado em propriedades gerais de simetria para cristais com dois átomos por célula unitária, Harrison [39] [9] obtém alguns aspectos importantes de (4.32). Expandindo o elemento de matriz deste acoplamento em série de potências do vetor de onda eletrônico (para não metais este é bem menor que o vetor de translação da rede recíproca) obtemos como primeiro termo não nulo aquele de ordem zero, sendo nulo o termo linear em \vec{k} . Ainda, analisando a simetria das funções de onda dos portadores, Harrison mostra que o elemento de matriz de ordem zero se anula para estados com simetria s , ocupados pelos elétrons de baixa energia. Portanto, devido a rápida convergência da série, consideramos que apenas os buracos são espalhados pela interação não polar.

O cálculo do termo de relaxação de energia para este tipo de colisão é muito parecido com aquele efetuado na seção 4.2.1. Partindo da fórmula (4.25), obtemos

$$\begin{aligned} \dot{U}^{TO,DF} &= \frac{2\pi}{\hbar} |M^{DEF}|^2 G_b \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}, \lambda} (\hbar\omega_\lambda) \left(\nu^\lambda(T_\lambda) - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_\lambda} - 1} \right) \\ & [f_{\vec{k}-\vec{q}}^b - f_{\vec{k}}^b] \delta(E_{\vec{k}-\vec{q}}^b - E_{\vec{k}}^b + \hbar\omega_\lambda). \end{aligned} \quad (4.33)$$

A soma sobre o índice λ diz respeito às três possíveis polarizações das vibrações da rede: uma polarização longitudinal (ω_{to}) e duas polarizações transversais, que descrevemos aproximadamente através de uma única frequência (ω_{to}). A expressão $\nu^\lambda(T_\lambda)$ é a distribuição de Planck e, de acordo com nosso modelo, $T_{to} = T_R$ ($T_R \equiv$ temperatura da rede). O termo G_b vale 0.5 e representa a integral de "overlap" das funções de onda. Este termo está discutido em detalhes no apêndice A.1.

Somando (4.33) sobre os vetores de onda \vec{q} encontramos

$$\begin{aligned} \dot{U}^{TO,DF} &= G_b \sum_{\lambda} \frac{2\omega_\lambda m_b^*}{\hbar\pi} |M|^2 \left(\nu^\lambda(T_\lambda) - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_\lambda} - 1} \right) \\ & \sum_{\vec{k}} [f^b(E_{\vec{k}}^b - \hbar\omega_\lambda) - f^b(E_{\vec{k}}^b)] \left(k^2 - \frac{2m_b^*\omega_\lambda}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (4.34)$$

dada a restrição

$$k^2 \geq \frac{2m_b^*\omega_\lambda}{\hbar}. \quad (4.35)$$

Por fim, resta-nos substituir o elemento de matriz (4.32) em (4.34) e somar sobre todos os estados de valência \bar{k} para chegarmos à expressão que descreve a taxa de relaxação de energia entre portadores e fônons ópticos por potencial de deformação

$$\begin{aligned} \dot{U}^{TO,DF} = G_b \sum_{\lambda} \frac{(DK)_b^2 m_b^*}{\rho \pi^3} \left(\nu^{\lambda}(T_{\lambda}) - \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{\lambda}} - 1} \right) \\ \int_{\sqrt{\frac{2m_b^* \omega_{\lambda}}{\hbar}}}^{\infty} k^2 \left(k^2 - \frac{2m_b^* \omega_{\lambda}}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} [f^b(E_{\bar{k}}^b - \hbar \omega_{\lambda}) - f^b(E_{\bar{k}}^b)] dk . \end{aligned} \quad (4.36)$$

4.3 Fônons LO fora do equilíbrio

Nesta seção vamos descrever com mais rigor a dinâmica dos fônons LO. Anteriormente consideramos que estes fônons formavam um sistema em equilíbrio interno e eram descritos por uma distribuição de Planck caracterizada pela temperatura própria $T_{lo}(t)$. Porém isto não é suficiente para representá-los corretamente, porque, como veremos a seguir, dois fatores comprometem este tratamento simples: o tempo de vida dos fônons LO e certas propriedades da interação com os portadores. Isto, em princípio, nos obriga a calcular a população de cada modo independentemente.

Entretanto temos um número muito grande de vetores de onda \vec{q} (da ordem de 10^{22}), o que torna a nós impossível realizar este cálculo para todos os modos. Como solução calculamos a população para os 20 modos mais significativos e ajustamos três polinômios distintos ($\nu_n^{LO}(q)$, com $n = 1, 2$ e 3) aos resultados obtidos, onde entendemos que são mais significativos aqueles modos que fornecem o ajuste mais fiel a real distribuição de fônons LO. Vários conjuntos foram testados até chegarmos ao conjunto ideal, quando a inclusão de um novo elemento ν_q^{LO} não altera os coeficientes dos polinômios. Adiante desenvolvemos os termos que compõem $\dot{\nu}_q^{LO}$ e discorreremos sobre o método proposto acima.

4.3.1 Evolução temporal dos fônons LO

A expressão que descreve a evolução temporal dos fônons de vetor de onda q é obtida a partir de uma equação de fluxos, muito similar àquela utilizada para determinar a dinâmica dos portadores (seção 3.1)

$$\begin{aligned} \dot{\nu}_q^{LO} = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} |M_q|^2 \left\{ f_k^{\alpha} (1 - f_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha}) (\nu_{\vec{q}}^{LO} + 1) \right. \\ & \left. - f_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha} (1 - f_k^{\alpha}) \nu_{\vec{q}}^{LO} \right\} \delta \left(E_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha} - E_k^{\alpha} + \hbar\omega_{lo} \right), \end{aligned} \quad (4.37)$$

Nesta fórmula M_q é o elemento de matriz da interação considerada e a função delta representa a conservação de energia durante a colisão; a conservação de momentum cristalino também já foi determinada ao acoplarmos o estado \vec{k} ao $\vec{k} - \vec{q}$, onde \vec{q} é o vetor de onda do fônon.

Somando a expressão (4.37) sobre todos os estados eletrônicos obtemos a variação total do número de fônons com vetor de onda q, provocada por sua interação com todo o plasma (figura 4.1).

Manipulando algebricamente (4.37) encontramos

$$\begin{aligned} \dot{\nu}_q^{LO} = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\alpha} |M_q|^2 \left[\nu_{\vec{q}}^{LO} - \left(e^{\beta\hbar\omega_{lo}} - 1 \right)^{-1} \right] \sum_{\vec{k}} (f_k^{\alpha} - f_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha}) \\ & \delta \left(E_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha} - E_k^{\alpha} + \hbar\omega_{lo} \right); \end{aligned} \quad (4.38)$$

que é somada em \vec{k} , fornecendo

$$\begin{aligned} \dot{\nu}_q^{LO} = & \sum_{\alpha} \frac{V m_{\alpha}^*}{\hbar^3 \pi q} |M_q|^2 \left[\nu_{\vec{q}}^{LO} - \left(e^{\beta\hbar\omega_{lo}} - 1 \right)^{-1} \right] \\ & \int_{k_{min}}^{k_{max}} k [f^{\alpha}(E_k^{\alpha}) - f^{\alpha}(E_k^{\alpha} - \hbar\omega_{lo})] dk. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Quanto aos limites de integração, são determinados pela equação delta e valem

$$\begin{aligned} k_{max} &= \infty \\ k_{min} &= \frac{q}{2} + \frac{m_{\alpha}^* \omega_o}{\hbar q}. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Estes valores revelam um aspecto muito importante sobre a dinâmica dos fônons, que não se restringe apenas aos LO, mas também aos AC e TO.

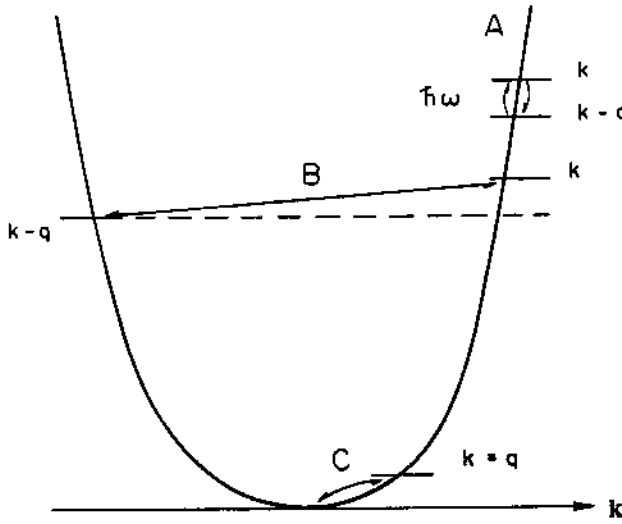


Figura 4.1: Transições de portadores entre estados na banda de condução. Figura a): fônon com pequeno vetor de onda. Figura b): fônon com grande vetor de onda. Figura c): vetor de onda que permite ao maior número de portadores participar da interação.

Tomemos os fônons com pequeno q : quando $q \rightarrow 0$ temos $k_{min} \rightarrow \infty$. Isto ocorre porque as condições $\Delta E^\alpha = \hbar\omega_{l_0}$ e $\Delta k = q = 0$ só podem ser satisfeitas simultaneamente por elétrons muito energéticos (figura 4.1-a). Portanto, em condições normais, poucos portadores podem absorver ou emitir fônons de pequeno comprimento de onda. Por outro lado, consideremos fônons com q grande: para $q \rightarrow \infty$ também encontramos $k_{min} \rightarrow \infty$, e as razões são as mesmas citadas acima (figura 4.1-b). Então, também serão poucos os portadores em condições de interagir com fônons de grande comprimento de onda. Mas quanto é grande e pequeno neste caso? As curvaturas das bandas de energia determinam tais valores, mas para o GaAs, e muitos outros semicondutores, podemos dizer que os modos menores que 10^5 cm^{-1} e maiores que 10^7 cm^{-1} não são efetivamente excitados.

O modo que permite o maior número de interações entre portadores e fônons é aquele que minimiza k_{min} (figura 4.1-c):

$$q = \sqrt{\frac{2m_\alpha^* \omega_{l_0}}{\hbar}}, \quad (4.41)$$

ou seja, $q \approx 2,5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$ para os elétrons e $q \approx 6,9 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$ para os burcos.

Seguindo com a fórmula para ν_q^{LO} , substituímos o elemento de matriz (4.32) em (4.39) e encontramos a variação de fônons LO devido à interação não polar com os

portadores

$$\begin{aligned} \dot{\nu}_q^{LO,DF} = G_b \frac{(DK)_b^2 m_b^*}{2\pi q \hbar^2 \rho \omega_{lo}} \left[\nu_q^{LO} - (e^{\beta \hbar \omega_{lo}} - 1)^{-1} \right] \\ \int_{\frac{q}{2} + \frac{m_b^* \omega_{lo}}{\hbar q}}^{\infty} k [f^\alpha(E_k^\alpha) - f^\alpha(E_k^\alpha - \hbar \omega_{lo})] dk . \end{aligned} \quad (4.42)$$

Como fizemos na seção 4.2.2, apenas os buracos participam deste acoplamento.

Para a interação polar o elemento de matriz é

$$\begin{aligned} \dot{\nu}_q^{FR} = \sum_{\alpha} \frac{2m_{\alpha}^* e^2 \omega_{lo}}{\hbar^2} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{q^2}{(q^2 + q_D^2)^2} \left[\nu_q^{LO} - (e^{\beta \hbar \omega_{lo}} - 1)^{-1} \right] \\ \int_{\frac{q}{2} + \frac{m_b^* \omega_{lo}}{\hbar q}}^{\infty} k [f^\alpha(E_k^\alpha) - f^\alpha(E_k^\alpha - \hbar \omega_{lo})] dk . \end{aligned} \quad (4.43)$$

O potencial de Fröhlich apresenta dependência em q^{-1} e, portanto, favorece a interação entre portadores e fônons de pequeno comprimento de onda.

Por fim, a interação anarmônica entre os fônons LO e os outros modos: o formalismo usado é a aproximação por tempo de relaxação, como pode ser visto abaixo

$$\dot{\nu}_q^{LO,AN} = - \frac{\nu_q^{LO} - (e^{\beta_R \hbar \omega_{lo}} - 1)^{-1}}{\tau} , \quad (4.44)$$

onde τ é o tempo de vida do fônons LO (definimos $\tau = 5ps$ [23]) e $\beta_R = 1/kT_R$.

Com isso obtemos as expressões necessárias para calcular a evolução temporal de ν_q^{LO} (equação 3.21). Porém, é inconcebível fazê-lo para todos os vetores de onda pois, como dissemos há pouco, sua quantidade é enorme (da ordem de 10^{22}). Para contornar esta dificuldade e conseguirmos uma função que seja capaz de descrever a distribuição de fônons ao longo do tempo procedemos da seguinte maneira: utilizamos a fórmula (3.21) para calcular as populações (ν_q^{LO}) de uma quantidade N de modos, dividimos o espaço q em três intervalos e ajustamos três diferentes polinômios a cada um destes domínios. Desta forma, o polinômio que resultou do ajuste feito ao conjunto de valores ν_q^{LO} , com q contido em um destes três intervalos, deve representar a distribuição dos fônons com vetores de onda pertencentes a este intervalo (vide figura 4.2). Tais polinômios têm grau 2 e são assim escritos

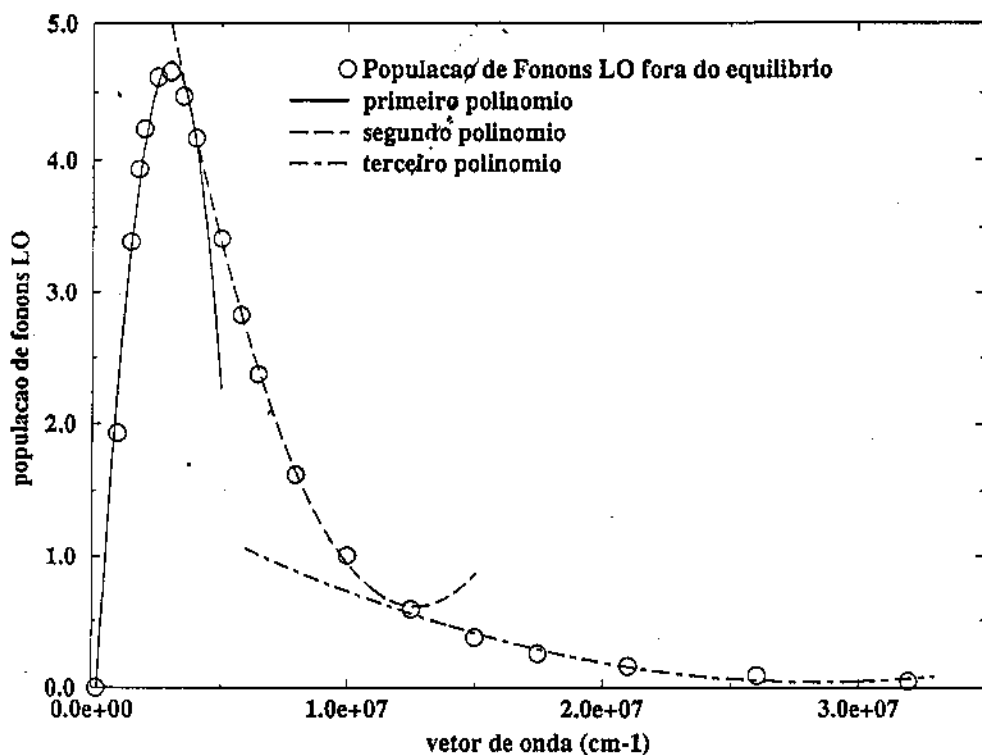


Figura 4.2: Polinômios de segundo grau ajustados aos valores ν_q^{LO} , calculados pela fórmula (3.21).

$$\nu_n^{LO}(q) = \sum_{i=0}^2 a_{i,n} q^i = a_{2,n} q^2 + a_{1,n} q + a_{0,n} , \quad (4.45)$$

onde o índice n ($n=1,2$ e 3) nos indica o polinômio em questão e seus coeficientes são obtidos pelo método de mínimos quadrados. É importante mencionar que os coeficientes $a_{i,n}$ têm o tempo como parâmetro, porque a cada intervalo temporal um novo ajuste deve ser feito aos recém calculados ν_q^{LO} , de maneira que os polinômios tragam consigo informações sobre a dinâmica dos fônons.

Os modos escolhidos formam três conjuntos, que somam, ao total, 20 elementos. Estes vetores de onda e os polinômios que representam a função de distribuição de fônons dentro de cada domínio são:

$$\begin{array}{l}
2 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1} \leq q \leq 3.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \\
\nu_1^{LO}(q) \leftarrow \left\{ \begin{array}{l} q_1 = 2 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1} \\ q_2 = 10^6 \text{ cm}^{-1} \\ q_3 = 1.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \\ q_4 = 1.8 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \\ q_5 = 2 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \\ q_6 = 2.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \\ q_7 = 3 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \\ q_8 = 3.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \end{array} \right. \\
3.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \leq q \leq 1.25 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1} \\
\nu_2^{LO}(q) \leftarrow \left\{ \begin{array}{l} q_9 = 4 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \\ q_{10} = 5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \\ q_{11} = 5.8 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \\ q_{12} = 6.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \\ q_{13} = 8 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1} \\ q_{14} = 10^7 \text{ cm}^{-1} \\ q_{15} = 1.25 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1} \end{array} \right. \\
1.25 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1} \leq q \leq 3.2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1} \\
\nu_3^{LO}(q) \leftarrow \left\{ \begin{array}{l} q_{16} = 1.5 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1} \\ q_{17} = 1.75 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1} \\ q_{18} = 2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1} \\ q_{19} = 2.6 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1} \\ q_{20} = 3.2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1} \end{array} \right.
\end{array}$$

Para os vetores de onda $q < 2.5 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$ e $q > 3.2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1}$, devido à pouca intensidade na interação destes modos com os portadores, sua população é tomada como aquela no equilíbrio térmico. Podemos assegurar que estes pontos formam um grupo representativo e que sua quantidade é suficiente para garantir a boa qualidade do ajuste, pois cálculos que levavam em conta até 80 modos forneceram resultados completamente equivalentes. Nosso critério de seleção dá ênfase aos vetores de onda que se acoplam mais intensamente com os portadores ($10^5 \text{ cm}^{-1} < q < 10^7 \text{ cm}^{-1}$), pois o maior excesso de fônons ocorre neste intervalo.

Nas duas seções subsequentes mostramos como empregar os polinômios $\nu_n^{LO}(q)$

nas expressões que determinam o fluxo de energia entre portadores e fônons LO.

4.3.2 Interação portadores-fônons LO via Potencial de Fröhlich

A fórmula que descreve a transferência de energia dos portadores para os fônons LO, quando os últimos são descritos por uma função de distribuição do tipo $(e^{\beta\hbar\omega_{lo}} - 1)^{-1}$, é

$$\begin{aligned} \dot{U}^{FR} = & \sum_{\alpha} G_{\alpha} \frac{m_{\alpha}^* e^2 \omega_{lo}^2}{\pi^2 \hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \left(\nu^{LO}(\beta_{lo}) - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{lo}} - 1} \right) \\ & \int_{\sqrt{\frac{2m_{\alpha}^* \omega_{lo}}{\hbar}}}^{\infty} k (f^{\alpha}(E_k^{\alpha} - \hbar\omega_{lo}) - f^{\alpha}(E_k^{\alpha})) \\ & \int_{q_1}^{q_2} \frac{q^3}{(q^2 + q_D^2)^2} dq dk, \end{aligned} \quad (4.46)$$

com q_2 e q_1 dados por (4.29).

Porém ao tratarmos os fônons LO como um sistema não termalizado a expressão acima deixa de ser válida, pois temos agora ν_q^{LO} , que não pode ser fatorada durante a integração sobre \vec{q} .

Utilizando os polinômios (4.45) para representar ν_q^{LO} , reescrevemos (4.47)

$$\begin{aligned} \dot{U}^{FR} = & \sum_{\alpha,n} \frac{m_{\alpha}^* e^2 \omega_{lo}^2}{\pi \hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \int_{\sqrt{\frac{2m_{\alpha}^* \omega_{lo}}{\hbar}}}^{\infty} k (f^{\alpha}(E_k^{\alpha} - \hbar\omega_{lo}) - f^{\alpha}(E_k^{\alpha})) \\ & \int_{q_1}^{q_2} \left(\nu_n^{LO}(q) - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{lo}} - 1} \right) \frac{q^3}{(q^2 + q_D^2)^2} dq dk. \end{aligned} \quad (4.47)$$

com

$$\begin{aligned} \int_{q_1}^{q_2} \left(\nu_n^{LO}(q) - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{lo}} - 1} \right) \frac{q^3}{(q^2 + q_D^2)^2} dq = & \left(a_{0,n} - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{lo}} - 1} \right) \int_{q_1}^{q_2} \frac{q^3}{(q^2 + q_D^2)^2} dq \\ & + \sum_{i=1}^2 a_{i,n} \int_{q_1}^{q_2} \frac{q^{3+i}}{(q^2 + q_D^2)^2} dq \end{aligned} \quad (4.48)$$

Por fim obtemos

$$\dot{U}^{FR} = \sum_{\alpha,n} \frac{m_{\alpha}^* e^2 \omega_{lo}^2}{\pi^2 \hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \int_{\sqrt{\frac{2m_{\alpha}^* \omega_{lo}}{\hbar}}}^{\infty} k (f^{\alpha}(E_k^{\alpha} - \hbar\omega_{lo}) - f^{\alpha}(E_k^{\alpha}))$$

$$\left[a_{2,n} \Phi_{2,n}(k) + a_{1,n} \Phi_{1,n}(k) + \left(a_{0,n} - \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{lo}} - 1} \right) \Phi_{0,n}(k) \right] dk \quad (4.49)$$

estando as expressões $\Phi_{i,n}$ calculadas no apêndice 2.

4.3.3 Interação portadores-fônons LO via potencial de deformação

O tratamento que damos a este tipo de interação é muito similar ao descrito na seção anterior. Para uma população de fônons LO em equilíbrio interno

$$\begin{aligned} \dot{J}^{LO,DF} &= G_b \frac{m_b^*(DK)_b^2}{2V\rho\hbar\pi} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{k} \left(f^b(E_k^b - \hbar\omega_{lo}) - f^b(E_k^b) \right) \\ &\quad \left(\nu^{LO}(\beta_{lo}) - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{lo}} - 1} \right) \int_{q_1}^{q_2} q dq \end{aligned} \quad (4.50)$$

Substituindo os polinômios $\nu_n^{LO}(q)$ encontramos

$$\begin{aligned} \dot{J}^{LO,DF} &= G_b \sum_n \frac{m_b^*(DK)_b^2}{2V\rho\hbar\pi} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{k} \left(f^b(E_k^b - \hbar\omega_{lo}) - f^b(E_k^b) \right) \\ &\quad \int_{q_1}^{q_2} \left[a_{2,n} q^2 + a_{1,n} q + \left(a_{0,n} - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{lo}} - 1} \right) \right] q dq \end{aligned} \quad (4.51)$$

e, em seguida, o resultado final, que pode ser escrito na forma

$$\begin{aligned} \dot{J}^{LO,DF} &= G_b \sum_n \frac{m_b^*(DK)_b^2}{8\rho\hbar\pi^3} \int_{\sqrt{\frac{2m_b^*\omega_{lo}}{\hbar}}}^{\infty} k \left(f^b(E_k^b - \hbar\omega_{lo}) - f^b(E_k^b) \right) \\ &\quad \left[a_{2,n} \Psi_{2,n}(k) + a_{1,n} \Psi_{1,n}(k) + \left(a_{0,n} - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{lo}} - 1} \right) \Psi_{0,n}(k) \right] dk . \end{aligned} \quad (4.52)$$

As expressões $\Psi_{i,n}$ encontram-se calculadas no apêndice 2.

4.4 Interação portadores-fônons AC via potencial de deformação

Temos dois tipos de interações envolvendo os fônons acústicos e os portadores [37]: uma delas é causada por potenciais de longo alcance e chama-se interação piezoelétrica, a outra deve-se a perturbações locais nas bandas de energias e constitui o espalhamento por potencial de deformação; neste último caso os mecanismos que dão origem ao acoplamento são os mesmos destacados na seção 4.2.2. O espalhamento piezoelétrico é relevante a baixas temperaturas ou em cristais piezoelétricos submetidos a campos ou tensões externas, sendo portanto, desconsiderado neste trabalho; este espalhamento, como o polar óptico, sofre influência significativa da blindagem eletrônica.

O elemento de matriz da interação portadores-fônons AC por meio do potencial de deformação é [11]

$$|\langle \vec{k} \pm \vec{q} | H^{AC} | \vec{k} \rangle|^2 = |M_q^{AC}|^2 = \frac{E_1^2 \hbar q}{2\rho V s}, \quad (4.53)$$

onde E_1 é o potencial de deformação acústico e $q = |\vec{k} - \vec{k}'|$. Os ramos transversais acústicos não interagem com os portadores no formalismo do potencial de deformação, pois a polarização destes modos de vibração é perpendicular ao seu vetor de onda [40]; então o termo acima refere-se apenas à interação portadores-fônons LA. A grandeza s representa a velocidade longitudinal de propagação do som, que consideramos $s = 2.5 \cdot 10^5 \frac{m}{s}$ [41].

O espalhamento por fônons acústicos é quase elástico quando $E^\alpha \gg \hbar s q$, o que ocorre frequentemente com os elétrons; portanto, dizemos que esta interação é pouco eficiente na relaxação de energia, mas importante na relaxação de momento cristalino [42].

O cálculo da relaxação de energia já nos é conhecido e fazemos como nos itens anteriores; partindo da fórmula (4.25) obtemos inicialmente

$$\begin{aligned} \dot{U}^{AC} = & \sum_{\alpha} \left(\frac{2\pi m_{\alpha}^* s}{\hbar^2 V} \right) \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}} |M_q^{AC}|^2 \frac{1}{k} \left(\nu_{\vec{q}}^{AC}(T_R) - \frac{1}{e^{\beta \hbar s q} - 1} \right) \\ & [f_{\vec{k}-\vec{q}}^{\alpha} - f_{\vec{k}}^{\alpha}] \delta \left(\frac{q}{2k} + \frac{m_{\alpha}^* s}{\hbar k} - \cos \theta \right). \end{aligned} \quad (4.54)$$

Fazemos, agora, duas aproximações que levam em conta as características dos fônons AC. Primeiro: as vibrações acústicas tem pequena energia — sua frequência é da ordem de THz — o que nos permite escrever

$$\nu_q^{AC}(T_R) = \frac{1}{e^{\beta \hbar s q} - 1} \simeq \frac{1}{\beta_R \hbar s q} \quad (4.55)$$

sempre que a energia do banho térmico é maior que a energia do fônon envolvido na transição, $\hbar s q \ll k_B T_R$. Segundo: a energia dos fônons é usualmente bem menor que a energia dos elétrons. Uma estimativa grosseira para pequenos vetores de onda nos mostra que

$$\begin{aligned} E^e &\simeq \frac{3k_B T_e}{2} = 39 \text{meV} \quad (T_e = 300 \text{K}) \\ &= 129 \text{meV} \quad (T_e = 1000 \text{K}) \end{aligned}$$

$$E^{AC} \simeq 1 \text{meV} .$$

Assim sendo podemos expandir a função de distribuição "perturbada", $f^\alpha(E_k^\alpha - \hbar s q)$, em torno do valor E_k^α , obtendo

$$f^\alpha(E_k^\alpha - \hbar s q) \simeq f^\alpha(E_k^\alpha) - \frac{df^\alpha(E_k^\alpha)}{dE_k^\alpha} \hbar s q. \quad (4.56)$$

Ao substituir (4.53), (4.55) e (4.56) na expressão para \dot{U}^{AC} fazemos

$$\begin{aligned} \dot{U}^{AC} &= \sum_\alpha \left(\frac{3m_\alpha^* E_1^2}{4\pi \hbar V \rho} \right) \left(\frac{1}{\beta} - \frac{1}{\beta_R} \right) \sum_{\vec{k}} \frac{1}{k} \frac{df^\alpha(E_k^\alpha)}{dE_k^\alpha} \\ &\times \int_0^\infty q^3 dq \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \delta \left(\frac{q}{2k} + \frac{m_\alpha^* s}{\hbar k} - \cos \theta \right) \end{aligned} \quad (4.57)$$

$$\dot{U}^{AC} = \sum_\alpha \left(\frac{3m_\alpha^* E_1^2}{4\pi \hbar V \rho} \right) \left(\frac{1}{\beta} - \frac{1}{\beta_R} \right) \sum_{\vec{k}} \frac{1}{k} \frac{df^\alpha(E_k^\alpha)}{dE_k^\alpha} \frac{1}{4} \left(2k - \frac{2m_\alpha^* s}{\hbar} \right)^4, \quad (4.58)$$

com $k \geq \frac{m_{\alpha}^* s}{\hbar}$.

Por fim escrevemos

$$\dot{U}^{AC} = \sum_{\alpha} \left(\frac{3m_{\alpha}^* E_1^2}{16\pi^3 \hbar \rho} \right) \left(\frac{1}{\beta} - \frac{1}{\beta_R} \right) \int_{\frac{m_{\alpha}^* s}{\hbar}}^{\infty} k \frac{df^{\alpha}(E_k^{\alpha})}{dE_k^{\alpha}} \left(2k - \frac{2m_{\alpha}^* s}{\hbar} \right)^4 dk, \quad (4.59)$$

onde

$$\frac{df^{\alpha}(E_k^{\alpha})}{dE_k^{\alpha}} = \frac{-\beta}{4 \cosh \left[\frac{\beta}{2} (E_k^{\alpha} - \mu^{\alpha}) \right]}. \quad (4.60)$$

4.5 Interação Fônon-Fônon

Ao estudarmos vibrações atômicas em cristais expandimos o potencial cristalino numa série de potências do deslocamento iônico em relação à sua posição de equilíbrio [36]. Usualmente, basta-nos o primeiro termo não nulo — quadrático nos deslocamentos. Através de algumas manipulações algébricas obtemos, por fim, um conjunto de pseudo-partículas não interagentes: os fônons.

A baixas temperaturas o acoplamento entre fônons pode ser desconsiderado, porém, com o crescimento da temperatura cristalina devemos levar em conta a interação entre fônons no processo de relaxação térmica — o tempo de vida do fônon decresce com o aumento da temperatura. Isto é feito rigorosamente quando consideramos os termos de terceira e quarta ordem, que determinam, respectivamente, processos envolvendo 3 e 4 fônons [40].

Os termos anarmônicos também são importantes em outros fenômenos: expansão térmica, condução de calor em isolantes, termodinâmica de cristais, etc.

Entretanto, o espalhamento fônon-fônon tem um tratamento difícil, que não cabe a este trabalho, assim vamos representá-lo através de um termo fenomenológico chamado "aproximação de tempo de relaxação".

Esta prática, amplamente utilizada em teoria cinética elementar e em outros campos da física, consiste em supor que o excesso de energia dos fônons LO decai exponen-

cialmente, por meio da interação com os fônons componentes do banho térmico. O tempo de decaimento é marcado por um parâmetro τ_{AN} , característico do tipo de material e da faixa de temperatura na qual trabalhamos. Fisicamente impomos que a energia dos fônons LO diminui até um valor limite, que é representado pela energia deste sistema quando $T_{lo} = T_R$; neste caso dizemos que todos os modos ópticos estão termalizados com o banho térmico.

Na seção 4.3.1 obtivemos uma expressão que representa a interação anarmônica dos fônons LO não termalizados entre si, agora desenvolvemos uma fórmula análoga para a aproximação que considera os fônons LO internamente termalizados. O tempo característico τ_{AN} foi obtido do trabalho de Chang et al. [43], a partir da largura da linha Raman no GaAs. Como resultado encontramos $\tau_{AN} = 30ps$, quando $T_R = 300K$.

Matematicamente escrevemos este termo da seguinte forma

$$\dot{U}^{BANHO} = -\frac{U^{LO} - U_0}{\tau_{AN}}, \quad (4.61)$$

onde

$$U^{LO} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \left(\frac{1}{e^{\beta_{lo} \hbar \omega_{lo}} - 1} \right) \hbar \omega_{lo} \quad (4.62)$$

é a energia do sistema de fônons LO. U_0 , que também pode ser escrito como U_{equil} , é obtida substituindo-se β_{lo} por β_R , em (4.62).

Como ω_{lo} não depende do vetor de onda \vec{q} fazemos, $\sum_{\vec{q}} = \frac{V}{V_c} \sum$, onde V_c é o volume da célula unitária. Desta forma obtemos a expressão final para (4.61)

$$\dot{U}^{BANHO} = -\frac{\hbar \omega_{lo}}{\tau_{AN} V_c} \left(\nu^{LO}(T_{lo}) - \nu^{LO}(T_R) \right). \quad (4.63)$$

²O número de estados na primeira zona de Brillouin é igual ao número de células unitárias do cristal. Portanto, sendo $V = V_c N$, nós temos $\sum_{\vec{q}} = \frac{V}{V_c}$.

4.6 Difusão ambipolar de portadores

A difusão ambipolar de portadores é um mecanismo importante no processo de relaxação térmica em semicondutores – para metais, as correntes de difusão não têm papel importante, pois a densidade de portadores livres é praticamente constante em todo o material [44]. Este mecanismo se constitui da difusão conjunta de elétrons e buracos devido a campos elétricos internos, gerados pela não homogeneidade na distribuição de portadores ao longo do cristal. Basicamente, se supomos $N_e = N_b$ e a mobilidade dos elétrons maior que a dos buracos, os elétrons tendem a se difundir mais rapidamente que os buracos. Esta separação de cargas provoca o surgimento de um campo elétrico que diminui a velocidade de difusão dos elétrons e acelera a dos buracos.

A fórmula frequentemente utilizada no estudo da difusão ambipolar envolve o coeficiente de difusão de Einstein [44] [45], porém, estudos mais elaborados [46, 47] podem levar em conta efeitos de muitos corpos, como: estreitamento do gap, renormalização da massa efetiva, etc; que são importantes apenas em situações onde há grande concentração de portadores. Em nosso modelo vamos utilizar um termo fenomenológico, baseado na aproximação de tempo de relaxação, para descrever os efeitos causados pela difusão ambipolar a concentração de portadores,

$$\dot{N}^e = \dot{N}^b = -\frac{N}{\tau_{DIF}}, \quad (4.64)$$

e à densidade de energia dos portadores

$$\dot{U}^{DIF} = -\frac{U^e + U^b}{\tau_{DIF}}. \quad (4.65)$$

Supomos que $N^e = N^b = N$, sempre, pois estamos estudando um semicondutor intrínseco.

Se a transferência de energia por colisões (entre portadores e fônons) cessa em intervalos que podem alcançar centenas de picosegundos, quando as duas temperaturas se igualam, a difusão ambipolar persiste enquanto os potenciais químicos não atingem seu valor de equilíbrio – ou, enquanto a densidade de portadores não é homogênea no cristal.

Capítulo 5

Os resultados e sua análise

Este capítulo é dedicado a análise dos resultados que obtivemos usando o formalismo descrito anteriormente, são dados que revelam a dinâmica de portadores e fônons, desde sua geração até sua termalização.

Para que o estudo fosse sistemático, também com o objetivo de propiciar a observação de certos fenômenos e excluir outros, que poderiam dificultar desnecessariamente o trabalho, determinamos que certas características e parâmetros são comuns a todos os conjuntos de dados.

Sobre o pulso óptico, ele tem formato gaussiano com $1ps$ de largura total à meia altura ("full width at middle height" - FWHM) e supomos que é monocromático, com fótons de energia $1,735 eV$ (a menos que especifiquemos o contrário). A última das considerações determina que criamos pares elétron-buraco com excesso de energia igual a $300 meV$, então podemos desconsiderar em nosso modelo os vales satélites, a banda de buracos leves e aquela deslocada pela interação spin-órbita. A largura temporal do pulso foi assim escolhida pois buscamos distinguir, da melhor forma possível, duas etapas: a de geração dos portadores daquela de sua relaxação térmica. Além disso, com um pulso de pequena duração, podemos desprezar alguns efeitos transientes que ocorrem durante a geração do plasma e têm tratamento extremamente complexo [16] [6] [25]. Quanto à sua intensidade, diferentes valores foram utilizados para estudarmos a influência da concentração dos portadores no processo de relaxação.

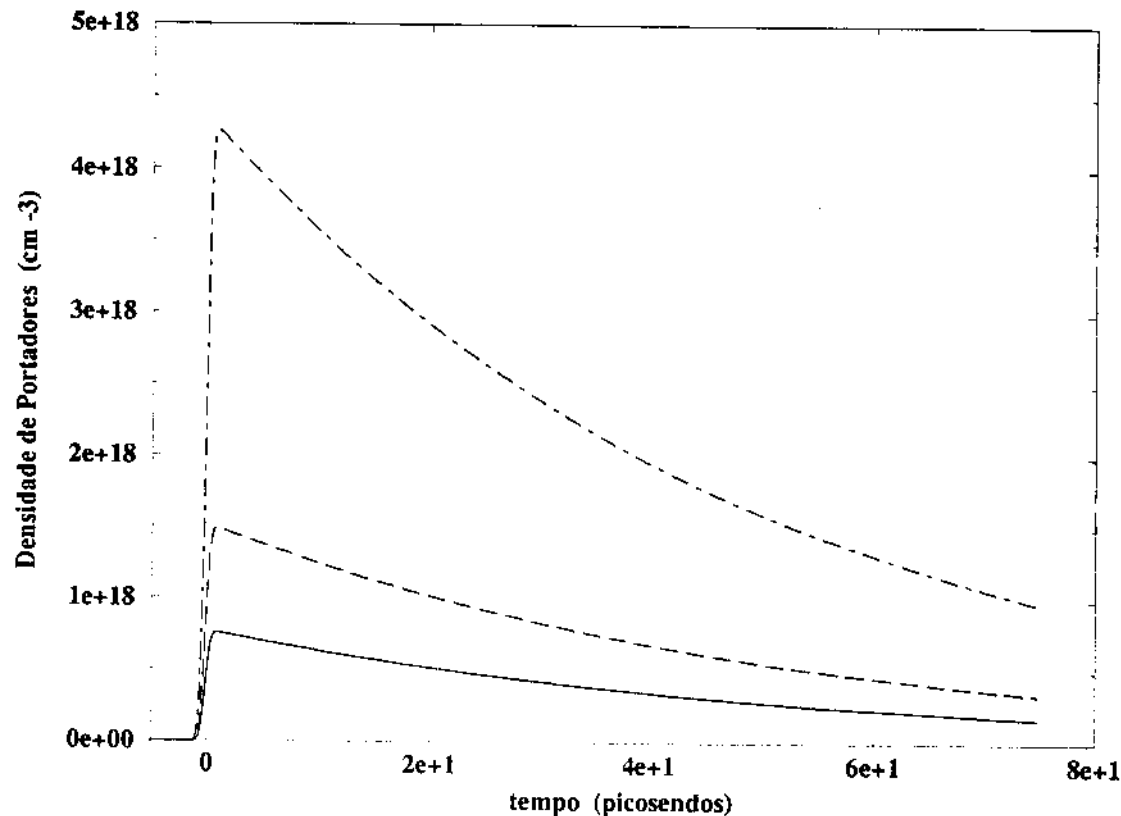


Figura 5.1: Densidade de portadores como função do tempo de atraso relativo ao centro do pulso óptico ($\hbar\omega_{\text{foton}} = 1.735\text{eV}$ e $\Delta t_{\text{pulso}} = 1\text{ps}$). Intensidades do pulso: $5\mu\text{J}/\text{cm}^2$ (sólido), $10\mu\text{J}/\text{cm}^2$ (tracejado) e $30\mu\text{J}/\text{cm}^2$ (traço-ponto).

Outro parâmetro que definimos previamente é o tempo característico de difusão ambipolar: $\tau_{DIF} \equiv 50\text{ps}$. Este valor foi estimado a partir de dados experimentais [48], em concentrações próximas às que encontramos em nossos resultados.

Nas seções seguintes consideramos alguns dos aspectos pertinentes à relaxação de semicondutores fotoexcitados. A seção 5.1 destaca prioritariamente aqueles ligados aos portadores, enquanto as seções 5.2 e 5.3 enfocam a dinâmica dos fônons quentes e sua interação com o plasma. Por fim, a seção 5.4 diz respeito a um fenômeno que ocorre nestes sistemas quando submetidos às condições extremas de excitação: o "overshoot" de temperatura dos fônons quentes.

5.1 Evolução temporal do plasma fotoexcitado

O GaAs intrínseco, em equilíbrio térmico à temperatura ambiente, apresenta densidade de elétrons livres da ordem de 10^6 cm^{-3} , e o mesmo número de buracos ocupando os estados de valência. Entretanto a incidência de um pulso óptico ressonante (como outras formas de perturbações externas) pode alterar significativamente essas grandezas.

Consideremos inicialmente os efeitos da radiação sobre o número de portadores livres, conforme apresentados na figura 5.1. A característica mais evidente dessas curvas é a produção, extremamente rápida, em alguns picosegundos, de um plasma eletrônico de densidade muitas ordens de grandeza maior que a concentração dessas partículas no equilíbrio. Analisando a relação entre as intensidades dos pulsos e as quantidades de portadores por eles gerados, notamos que esta é linear: $N_1 = 7.5 \cdot 10^{17} \text{ port/cm}^3$ para $I_1 = 5 \mu\text{J/cm}^2$, $N_2 = 1.5 \cdot 10^{18} \text{ port/cm}^3$ para $I_2 = 10 \mu\text{J/cm}^2$ e $N_3 = 4.3 \cdot 10^{18} \text{ port/cm}^3$ para $I_3 = 30 \mu\text{J/cm}^2$; mostrando evidências de que a amostra não foi saturada e o coeficiente de absorção $\alpha(\vec{q}, \lambda; t)$, fórmula (4.13) pode ser considerado uma constante dentro dos limites expressos acima. Como uma estimativa, calculando a densidade de estados da banda de condução à energia de 300 meV , encontramos $g^e(300 \text{ meV}) \approx 6.7 \text{ port/eVcm}^3$; portanto devemos esperar mudanças significativas no coeficiente de absorção quando incidimos sobre a amostra pulsos com intensidades maiores que $200 \mu\text{J/cm}^2$, pois, neste caso sim, serão criados portadores suficientes para ocupar uma porção considerável dos estados eletrônicos acoplados pela radiação. O segundo aspecto que nos chama a atenção é o decaimento da curva de densidade, porém, nesta fase, em uma taxa muito mais lenta que a de geração. Na verdade as três curvas apresentam a mesma taxa de decaimento exponencial, determinada pelo tempo característico da difusão ambipolar ($\tau_{DIF} = 50 \text{ ps}$) que representa o processo de difusão de pares de portadores para fora da região ativa, onde a densidade do plasma é menor.

A incidência do laser sobre a amostra muda outra propriedade dos portadores, que é sua energia térmica. Este fluxo de energia envolvendo os portadores, desde a absorção de fótons até a interação com fônons, pode ser estudado por meio da evolução temporal da temperatura do plasma (figura 5.2), que é uma variável intensiva diretamente ligada a energia dos portadores¹

¹Este procedimento é muito comum, porém apresenta pontos delicados que precisam ser analisados com cuidado. Discutindo rapidamente, pois existem trabalhos detalhados sobre o assunto [49] [50], devemos notar que a densidade de energia do plasma não é função da temperatura apenas, na verdade temos $U(T, \mu)$ ou, consoantemente, $U(T, N)$. Porém em limites não saturados, onde a distribuição de Fermi-Dirac pode ser substituída pela de Maxwell-Boltzmann, é possível escrever $U(T)$. Assim, concluímos que mais direta é

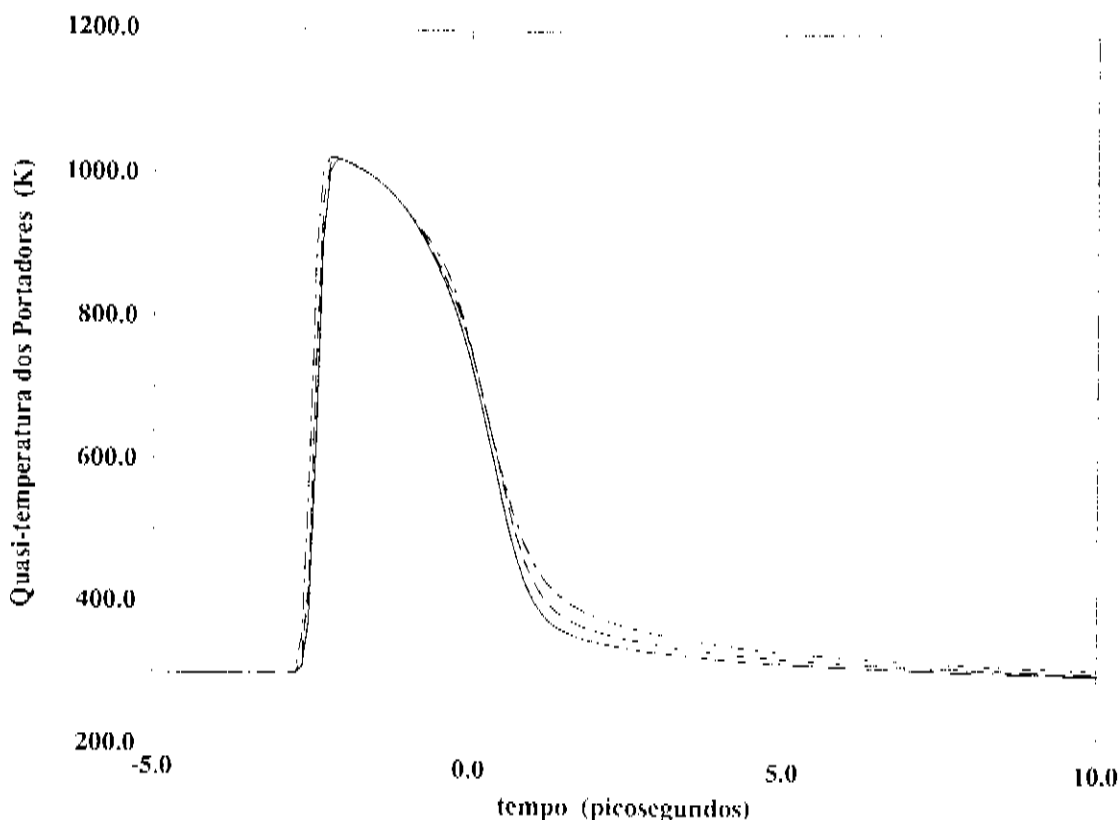


Figura 5.2: Evolução temporal da quasi-temperatura dos portadores em função do atraso relativo ao centro do pulso óptico ($(\hbar\omega_{\text{foton}} = 1.735\text{eV}$ e $\Delta t_{\text{pulso}} = 1\text{ps}$). Três pulsos foram considerados: $5\mu\text{J}/\text{cm}^2$ (sólido), $10\mu\text{J}/\text{cm}^2$ (tracejado) e $30\mu\text{J}/\text{cm}^2$ (traço-ponto).

Como vemos na figura 5.2, os primeiros portadores livres são criados pouco antes do centro do pulso ($\Delta t = 0\text{ps}$) ter atingido a amostra, isto é, pelo fótons que compõem sua cauda. Observamos, também, que a temperatura do plasma nestes instantes iniciais é muito superior à temperatura da rede ($T_R = 300\text{K}$), como prevíamos no parágrafo anterior. Utilizando o princípio da equipartição torna-se possível estimar a temperatura com que são gerados os primeiros pares elétron-buraco, enquanto sua densidade não é suficiente para saturar a distribuição ($N < 10^{17}\text{cm}^{-3}$). Para estes casos consideramos a expressão $\hbar\omega = E_g(T_R) = 2 \times \frac{3}{2}kT$, onde o fator multiplicativo 2 é consequência da hipótese de termalização instantânea entre elétrons e buracos, e desta fórmula obtemos, quando $\hbar\omega = 1.735\text{eV}$ e $E_g(300\text{K}) = 1.435\text{eV}$, a temperatura inicial do plasma $T = 1160\text{K}$. Todavia, se formos cuidadosos, veremos que o pico da curva de temperatura tem valor um pouco menor que este que acabamos de encontrar, devido à interações entre os portadores e a rede cristalina - pois lembremos que o tempo de emissão de fônons LO é da ordem de poucas centenas de femtosegundos [23].

a relação entre energia e temperatura quanto menor for a densidade de portadores.

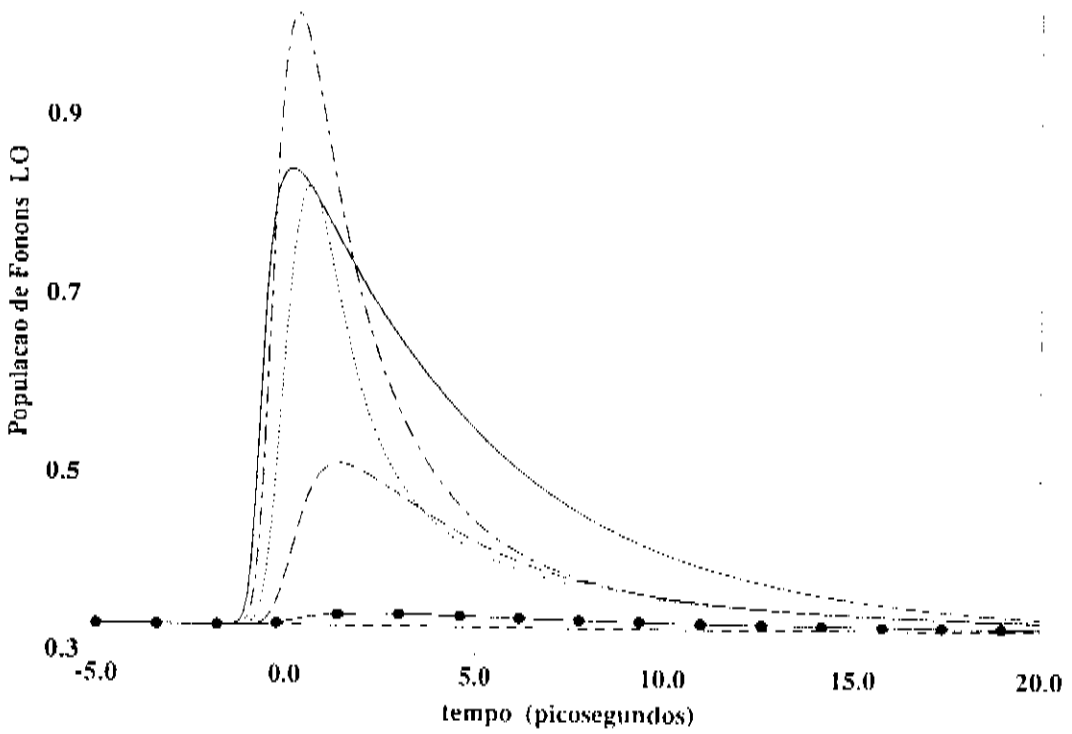


Figura 5.3: População de fônons LO, para diferentes vetores de onda, em função do tempo de atraso relativo ao centro do pulso óptico ($I_{pulso} = 30 \mu J/cm^2$, $h\omega_{foton} = 1.735 eV$ e $\Delta t_{pulso} = 1 ps$). Vetores de onda considerados: $2 \cdot 10^5 cm^{-1}$ (traço curto), $10^6 cm^{-1}$ (sólido), $2.5 \cdot 10^6 cm^{-1}$ (traço-ponto), $5 \cdot 10^6 cm^{-1}$ (pontilhado), $10^7 cm^{-1}$ (traço-longo) e $2.1 \cdot 10^7 cm^{-1}$ (sólido e ponto).

Logo após terem sido criados, os portadores livres (supondo-os já termalizados) iniciam um processo de interação com a rede, por meio do qual são emitidos e absorvidos fônons, principalmente os LO neste semiconductor polar. Porém, se a temperatura do plasma for maior que a dos fônons, prevalece a emissão sobre a absorção, de maneira que o plasma vai perdendo seu excesso de energia, até que o fluxo de energia entre estes sistemas cessa e a temperatura de ambos se iguala. Assim explicamos a queda da temperatura dos portadores (figura 5.2).

A figura 5.2 mostra pequenas diferenças entre as três curvas de temperatura, que atribuímos as diferentes intensidades de cada um dos pulsos e, após haver acabado a ação da radiação, aos efeitos causados por influência da concentração de portadores. Quanto a esta segunda questão, será considerada mais detalhadamente na próxima seção.

5.2 Dinâmica dos fônons quentes

O cuidado empregado na elaboração de um modelo capaz de descrever fielmente os fônons LO, considerando muitas de suas características dinâmicas, tal que nos obrigou a calcular a evolução temporal de cada um dos modos independentemente, sortiu os resultados que apresentamos nesta seção.

Na seção anterior acompanhamos todos os passos da evolução temporal dos portadores quentes, desde sua criação até sua termalização, por meio de gráficos de densidade (figura 5.1) e quasi-temperatura (figura 5.2). Não se falou dos fônons, que deixamos para serem analisados agora. Considerando o modelo que trata os fônons LO de maneira mais simples, onde todos os modos estão termalizados entre si, teríamos como resultado da relaxação térmica do plasma a produção de fônons LO (e outros tipos de fônons, mas por enquanto falamos dos LO) em taxas iguais para todos os modos. Isto é, ao assumirmos que a função de Planck descreve a distribuição de fônons LO, estamos dizendo que todos os modos de vibração que compõem o espaço \vec{q} estão sendo igualmente excitados, ou desexcitados, em todo o instante de tempo enquanto durar o processo de termalização dos portadores quentes; e terão sempre o mesmo número de ocupação de fônons. Por outro lado, considerando o segundo modelo, que é mais detalhado, devemos calcular a evolução da população de cada modo independentemente e obtemos os resultados da figura 5.3. Este gráfico contém 6 curvas, cada uma delas correspondente a um único vetor de onda, que representam o número de ocupação dos fônons LO em função do tempo. Logo vemos que a produção de fônons LO não é igual para todos os modos: o vetor de onda $q = 2 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$ praticamente não foi excitado e sua população é constante no tempo; os modos $q = 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $2.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$ têm seu número de ocupação bruscamente aumentado, decaindo lentamente em seguida; e os dois restantes, $q = 10^7 \text{ cm}^{-1}$ e $2.1 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1}$, possuem pequena taxa de produção. Passados pouco mais de 15 ps, todos os modos voltam a ser igualmente populados.

Como foi previsto na seção 4.3.1, o modo de vibração que interage mais intensamente com os elétrons quentes tem vetor de onda próximo a $2.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$, ao passo que tal intensidade decresce à medida que deixamos este ponto - os buracos produzem poucos fônons quentes, se comparados aos elétrons, pois seu excesso de energia é pequeno

devido a sua grande massa efetiva.

Durante os primeiros instantes a taxa de emissão dos fônons LO é maior que sua velocidade de decaimento, por isso ocorre esta geração excessiva de fônons, aos quais damos o nome de fônons quentes. Entretanto, passados alguns picosegundos, após as curvas terem atingido seus picos, é o excesso de energia dos portadores e a taxa de decaimento dos fônons LO se sobrepõe à de produção. Temos, então, a termalização dos modos que iguala a população de todos eles.

Uma comparação mais direta entre a dinâmica de portadores e fônons LO é conseguida quando usamos a temperatura. Porém, somente é possível atribuir uma quasi-temperatura para os fônons se supomos que eles estão internamente termalizados. Assim, definimos um novo parâmetro, ligado a cada vetor de onda, que representa a temperatura deste modo se sua população fosse descrita pela função de distribuição de Planck. A ele damos o nome de "pseudo-temperatura" do fônons do modo q e o definimos como

$$\nu_q^{LO} = \left[\exp \frac{\hbar\omega_{LO}}{kT_q} - 1 \right]^{-1}, \quad (5.1)$$

$$T_q \equiv \frac{\hbar\omega_{LO}}{k} \frac{1}{\ln \left(\frac{1}{\nu_q} + 1 \right)} \quad (5.2)$$

Podemos dizer que a pseudo-temperatura do modo é uma medida do seu número de ocupação.

A figura 5.4 apresenta a relação entre as curvas de pseudo-temperaturas de alguns modos e a curva de quasi-temperatura dos portadores excitados que criaram esses fônons. Nela podemos notar aspectos interessantes, como os valores, muito altos, alcançados pela pseudo-temperatura de certos modos ($q = 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $2.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$); contrapondo-se à pequena excitação dos modos $q = 2 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$ e $q = 2.1 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1}$, cujas pseudo-temperaturas mantêm-se praticamente iguais à temperatura da rede.

Mais notável ainda é a comparação desta figura 5.4 com a figura 5.5, que mostra a evolução temporal da quasi-temperatura (T_{LO}) do sistema de fônons LO, quando supomos que estes estão internamente termalizados. Isto significa que ao considerarmos o

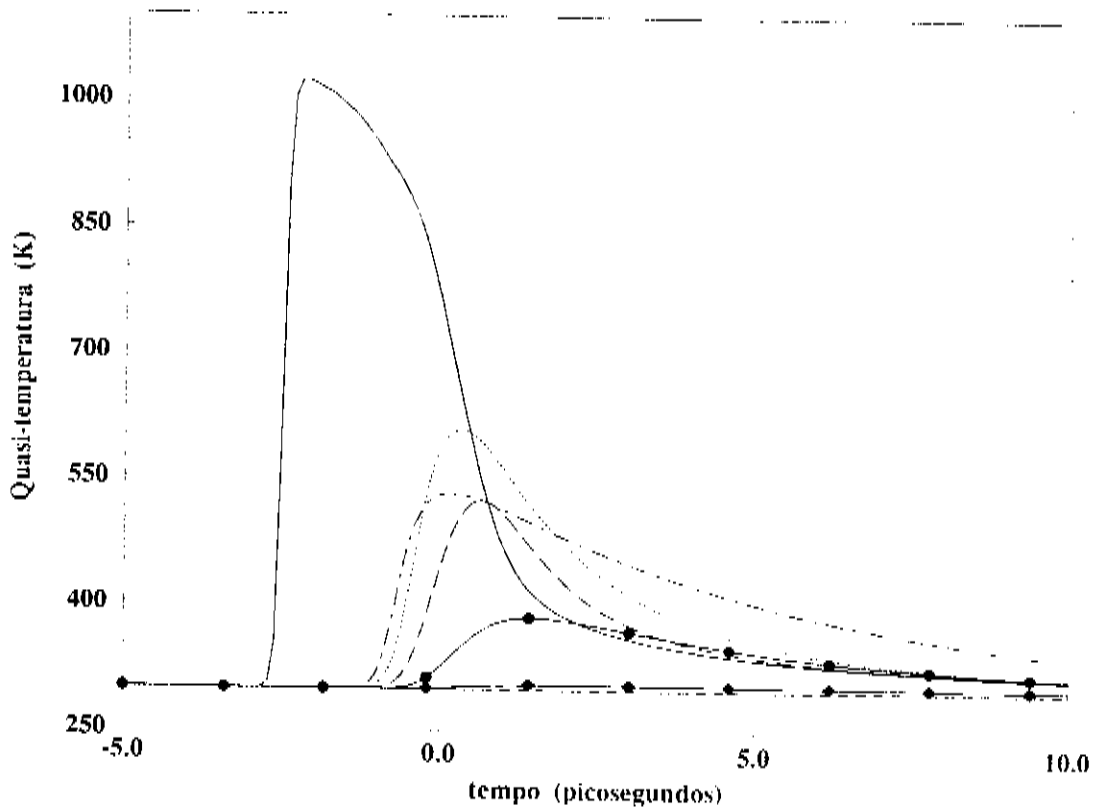


Figura 5.4: Quasi-temperatura dos portadores (linha cheia) e pseudo-temperaturas de alguns modos LO como função do tempo de atraso relativo ao centro do pulso óptico ($I_{pulso} = 30 \mu J/cm^2$, $\hbar\omega_{foton} = 1.735 eV$ e $\Delta t_{pulso} = 1 ps$). Vetores de onda considerados: $2 \cdot 10^5 cm^{-1}$ (traço-curto), $10^6 cm^{-1}$ (traço-ponto), $2.5 \cdot 10^6 cm^{-1}$ (pontilhado), $5 \cdot 10^6 cm^{-1}$ (traço-longo), $10^7 cm^{-1}$ (sólido-ponto) e $2.1 \cdot 10^7 cm^{-1}$ (sólido-diamante). É possível observar o "overshoot" de temperatura de alguns modos.

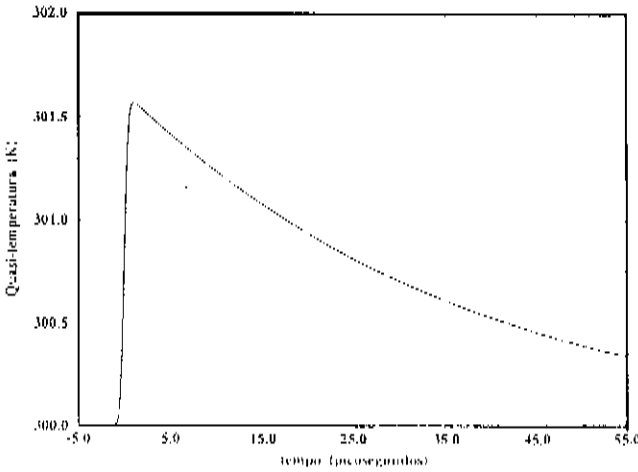


Figura 5.5: Quasi-temperatura dos fônons LO (T_{lo}) em função do tempo de atraso em relação ao centro do pulso ($I_{pulso} = 30 \mu J/cm^2$, $\hbar\omega_{foton} = 1.735 eV$ e $\Delta t_{pulso} = 1 ps$).

modelo de quasi-temperatura única, onde os portadores se acoplam indistintamente com os fônons de qualquer comprimento de onda, estamos dividindo o excesso de energia transferido aos fônons entre os 10^{22} modos de vibração existentes. Temos, portanto, a diferença de temperatura entre as curvas 5.4 e 5.5.

Um segundo ponto merece nossa atenção: o atraso com que cresce a pseudo-temperatura dos fônons em relação à quasi-temperatura do plasma. Isto ocorre porque nos primeiros instantes da interação do pulso com a amostra, temos pequena densidade de portadores, embora com alta quasi-temperatura, o que provoca uma pequena produção de fônons. Como mostra o gráfico, gerados portadores em quantidade suficiente ($N(\Delta t = -1 \text{ ps}) \approx 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) as pseudo-temperaturas dos modos mais sensíveis começam a aumentar, ainda que a quasi-temperatura do plasma tenha decaído. Tal comportamento pode ser justificado matematicamente com facilidade, pois, se passamos a descrever a distribuição de portadores por funções de Maxwell-Boltzmann, teríamos como resultado final da expressão (4.37) $\nu_q^{LO} \propto N^{PORT}$, ou seja, a taxa de produção de fônons seria diretamente proporcional à densidade de portadores livres.

A blindagem eletrônica também causa um decréscimo na emissão, ou absorção, dos fônons, porque diminui a intensidade da interação polar. Porém seu efeito sobre as curvas da figura 5.4 serão discutidos adiante.

Por fim, cessada a influência do laser, o sistema deve evoluir em direção ao estado de equilíbrio térmico, onde as pseudo-temperaturas de todos os modos e a quasi-temperatura dos portadores se igualam a temperatura do banho térmico ($T_R = 300 \text{ K}$). O gráfico 5.4 mostra que a termalização deve ocorrer aproximadamente 15 ps após o pico da excitação óptica.

Outro ponto de interesse que a figura 5.2 nos revela é o aumento das pseudo-temperaturas de alguns modos ($q = 10^6 \text{ cm}^{-1}$, $2.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e $5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$), que crescem rapidamente até ultrapassarem a quasi temperatura dos portadores, ficando bem acima desta última. A este fenômeno dá-se o nome de "overshoot" da temperatura dos fônons; vamos considerá-lo em detalhes adiante.

5.3 Influência dos fônons quentes na relaxação térmica dos portadores

Nas duas seções anteriores discutimos a evolução temporal do plasma e dos fônons LO. A seguir verificamos a influência dos fônons quentes no processo de relaxação térmica dos portadores.

Como discutimos na seção 4.3.1 e pudemos confirmar nos resultados da seção 5.2, os portadores são forçados, por imposições dinâmicas de conservação de energia e momentum, a interagir mais intensamente com um conjunto reduzido de fônons que possuem vetores de onda dentro de uma pequena região do espaço recíproco (cerca de 20% de todo o espaço). É possível dizer, então, que o acoplamento com esses modos vai determinar, efetivamente, a taxa de decaimento da temperatura dos portadores quentes. Como a pseudo-temperatura desses modos é muito alta devemos esperar que o modelo que trata os modos independentemente provoque uma redução na velocidade de decaimento da quasi-temperatura dos portadores quentes, quando comparada com o modelo que considera a quasi-temperatura T_{lo} .

A figura 5.6 mostra esse efeito para várias concentrações de plasma. É possível verificar que a diferença entre as curvas aumenta a medida que cresce a densidade de portadores, pois também aumenta a produção de fônons quentes, intensificando o processo.

Nosso modelo teórico, que desconsidera os vales laterais, limita a geração de fônons quentes ao processo de cascata, que pode ser visto na figura 2.2 do capítulo 2. Neste processo os fônons quentes são produzidos por portadores de alta energia, que emitem sucessivos fônons LO durante o seu decaimento até estados de menor energia. Assim, esperamos que o efeito dos fônons quentes sobre a relaxação térmica do plasma seja maior quando criamos pares elétron-buraco com grande excesso de energia. Utilizando um pulso óptico com fótons de $2.035eV$ podemos criar portadores com o dobro de energia cinética e obtemos os dados da figura 5.7. É importante salientar que tal situação não corresponde à realidade, pois em nosso modelo desconsideramos os vales laterais, que tornam-se importantes quando criamos pares elétron-buraco com energia maior que $300 meV$, mas com

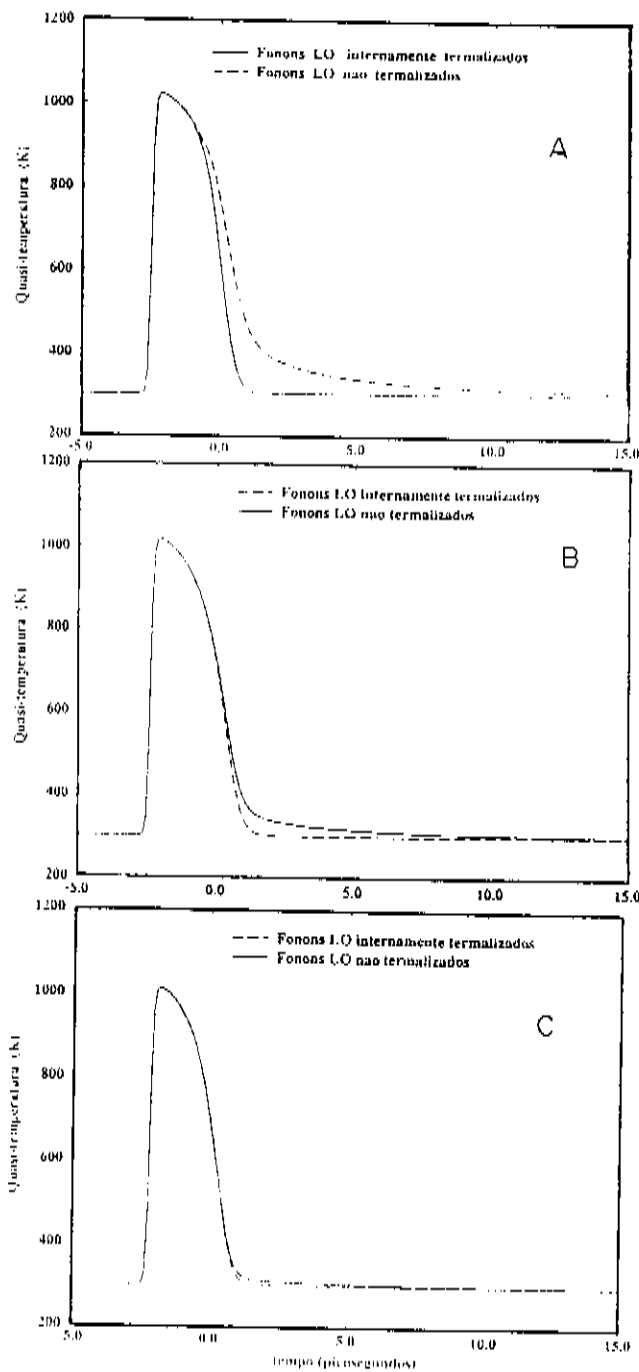


Figura 5.6: Quasi-temperatura dos portadores em função do atraso relativo ao centro do pulso óptico ($\hbar\omega_{foton} = 1.735eV$ e $\Delta t_{pulso} = 1ps$). Pulsos de três intensidades são considerados e diferentes concentrações de portadores são atingidas: a) $I_{pulso} = 30\mu J/cm^2$ e $N = 4.510^{18}cm^{-3}$, b) $I_{pulso} = 3\mu J/cm^2$ e $N = 4.510^{17}cm^{-3}$ e c) $I_{pulso} = 0.3\mu J/cm^2$ e $N = 4.510^{16}cm^{-3}$. A curva sólida mostra o cálculo com tratamento modo-a-modo dado aos fônons LO e a tracejada trata os fônons LO internamente termalizados.

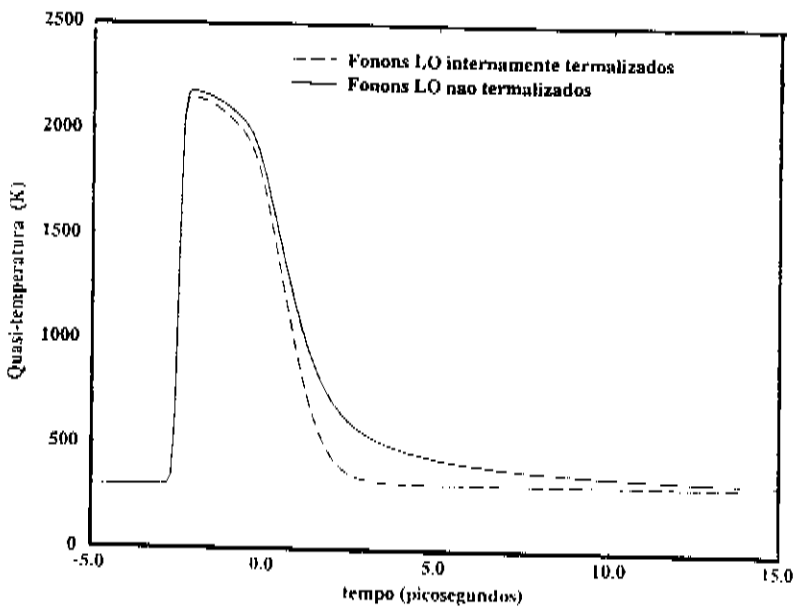


Figura 5.7: Quasi-temperatura dos portadores como função do tempo de atraso relativo ao centro do pulso óptico ($I_{pulso} = 30 \mu J/cm^2$, $\hbar\omega_{foton} = 2.035 eV$ e $\Delta t_{pulso} = 1 ps$). Temos: fônons LO internamente termalizados (tracejado) e fônons LO não termalizados entre si (sólido).

este gráfico buscamos ressaltar a importância da energia do portador no efeito "cascata" de produção de fônons quentes.

5.4 "Overshoot" da temperatura dos fônons

O "overshoot" da temperatura dos fônons LO foi experimentalmente observado no GaAs em 1990 [24]. Neste experimento de espalhamento Raman, realizado com a amostra mantida à temperatura ambiente, pares elétron-buraco foram criados por fótons de 2.0 eV num pulso óptico de 0.6 ps de duração a banda deslocada pela interação spin-órbita foi desconsiderada na análise dos dados deste trabalho. A transição intervalas desempenha um papel fundamental na dinâmica de portadores criados com tamanha energia, e foi nesse mecanismo que se baseou a explicação de D.S. Kim e P. Yu para o efeito de "overshoot" que observaram em seu experimento. Neste trabalho foi suposto que os portadores se termalizam instantaneamente e são descritos por funções de distribuição do tipo Fermi-Dirac (como fazemos nesta tese). Segundo sua interpretação, os portadores criados no vale Γ geram fônons LO e, em seguida, são rapidamente espalhados para os vales laterais, onde continuam o processo de relaxação térmica. Entretanto alguns poucos elétrons continuam no vale Γ e, devido à transição intervalas, sua temperatura cai rapidamente pois somente os elétrons de alta energia podem ser espalhados para os vales satélites. Restando apenas os

elétrons de baixa energia no vale central. Por outro lado, os fônons que foram produzidos por portadores de alta energia não tem condições de serem reabsorvidos pelos elétrons de baixa energia que permanecem no vale Γ , dando origem ao "overshoot" de temperatura dos fônons com vetor de onda $q = 7.510^5 \text{ cm}^{-1}$.

Este resultado tem sua interpretação inteiramente baseada na transição intervalas e sugere que apenas este mecanismo pode explicar o "overshoot" de temperatura observado, pois simulações que realizaram sem que estas interações tenham sido levadas em conta não apresentaram concordância com os resultados experimentais.

Entretanto nossos resultados, que desconsideram os vales laterais, apresentam o "overshoot" de temperatura de vários modos (figura 5.4). Para explicar a ocorrência deste efeito em nossos resultados recorreremos a outra explicação que desconsidera os vales L e X. Segundo o modelo que propomos, o "overshoot" de temperatura que vemos na figura 5.4 se deve à blindagem eletrônica da interação polar entre portadores e fônons LO. Como discutimos na seção 4.2.1, a blindagem é um efeito de muitos corpos, provocado pelo próprio plasma, que atua de forma a atenuar o acoplamento polar portador-fônon LO; ela é considerada em nossas fórmulas quando introduzimos a constante dielétrica $\epsilon_{RPA} = 1 + \frac{q_D^2}{q^2}$ (fórmulas 4.18 e 4.19) no elemento de matriz de Fröhlich e obtemos neste caso

$$|M_q^{POLAR}|^2 = \frac{|M_q^{FRÖHLICH}|^2}{\epsilon_{RPA}^2} = \frac{2\pi\epsilon^2\hbar\omega_{lo}}{V} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon_\infty & \epsilon_0 \end{pmatrix} \frac{q^2}{(q^2 + q_D^2)^2} \quad (5.3)$$

$$|M_q^{POLAR}|^2 \propto \frac{1}{(q^2 + q_D^2)^2} \quad (5.4)$$

O parâmetro q_D é conhecido como comprimento de onda de Debye Hückel, e um crescimento no valor de q_D representa um aumento na blindagem.

Sendo a blindagem um efeito de muitos corpos, é natural esperar que q_D seja sensível à densidade do plasma, como verificamos ao comparar as figuras 5.8a) e b). É importante notar que, assim como a concentração de portadores livres cresce muitas ordens de grandeza após a incidência do pulso, o valor do comprimento de onda de Debye também aumenta várias ordens de grandeza: no início temos $q_D \approx 10 \text{ cm}^{-1}$, causado por

10^6 port/cm^3 , e ao final do pulso encontramos $q_D \approx 4.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$, quando $N^{PORT} \approx 4.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Portanto a relação entre o vetor de onda de Debye e o valor do vetor de onda do fônon será responsável pelo "overshoot". Enquanto a concentração é tal que $q_D < 10^5 \text{ cm}^{-1}$ o efeito da blindagem eletrônica sobre na interação polar pode ser desprezado e os fônons com $q \geq 5 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$ são gerados por um potencial de Fröhlich que pode ser considerado não blindado - os modos com vetor de onda menor que estes serão sempre pouco excitados. Neste período as pseudo-temperaturas de alguns modos sobem violentamente (figura 5.2). Mas q_D continua a crescer, juntamente com a densidade de portadores, e quando atinge seu valor máximo ($q_D \approx 4.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$) blinda a interação polar entre portadores e fônons com comprimentos de onda menores que q_D , mantendo-se extremamente excitados esses modos de vibração durante a termalização do plasma.

Para verificar a hipótese sugerida acima, simulamos o mesmo processo sem que fosse levada em conta a blindagem eletrônica e obtivemos os dados apresentados na figura 5.9, onde constatamos que o "overshoot" desapareceu.

O "overshoot" da pseudo-temperatura dos fônons também pode ser observado durante o processo de excitação e termalização dos fônons LO (figura 5.10). Neste gráfico temos as populações de fônons LO em função dos seus comprimentos de onda, onde o tempo de atraso em relação ao pico do pulso óptico aparece como um parâmetro. No início todos os modos estão igualmente populados, o que devemos esperar de uma distribuição de equilíbrio. Com a geração dos primeiros portadores surgem também os fônons quentes, que no início do processo se limitam a uma estreita faixa de comprimentos de onda, com pequenos vetores q . Estes são os modos que serão blindados logo a seguir, quando a concentração aumentar - por enquanto a blindagem não tem grande efeito e a emissão destes fônons é alta. Cessado o efeito do pulso a emissão destes fônons diminui bastante, pois muitos portadores já perderam seu excesso de energia, e o decaimento dos fônons LO, em fônons AC, torna-se importante. O pico que surge nas curvas de distribuição dos fônons, após o decaimento do pulso óptico, está centrado em vetores de onda da ordem de $q \approx 3 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$ e é consequência da blindagem que estes modos sofrem durante a

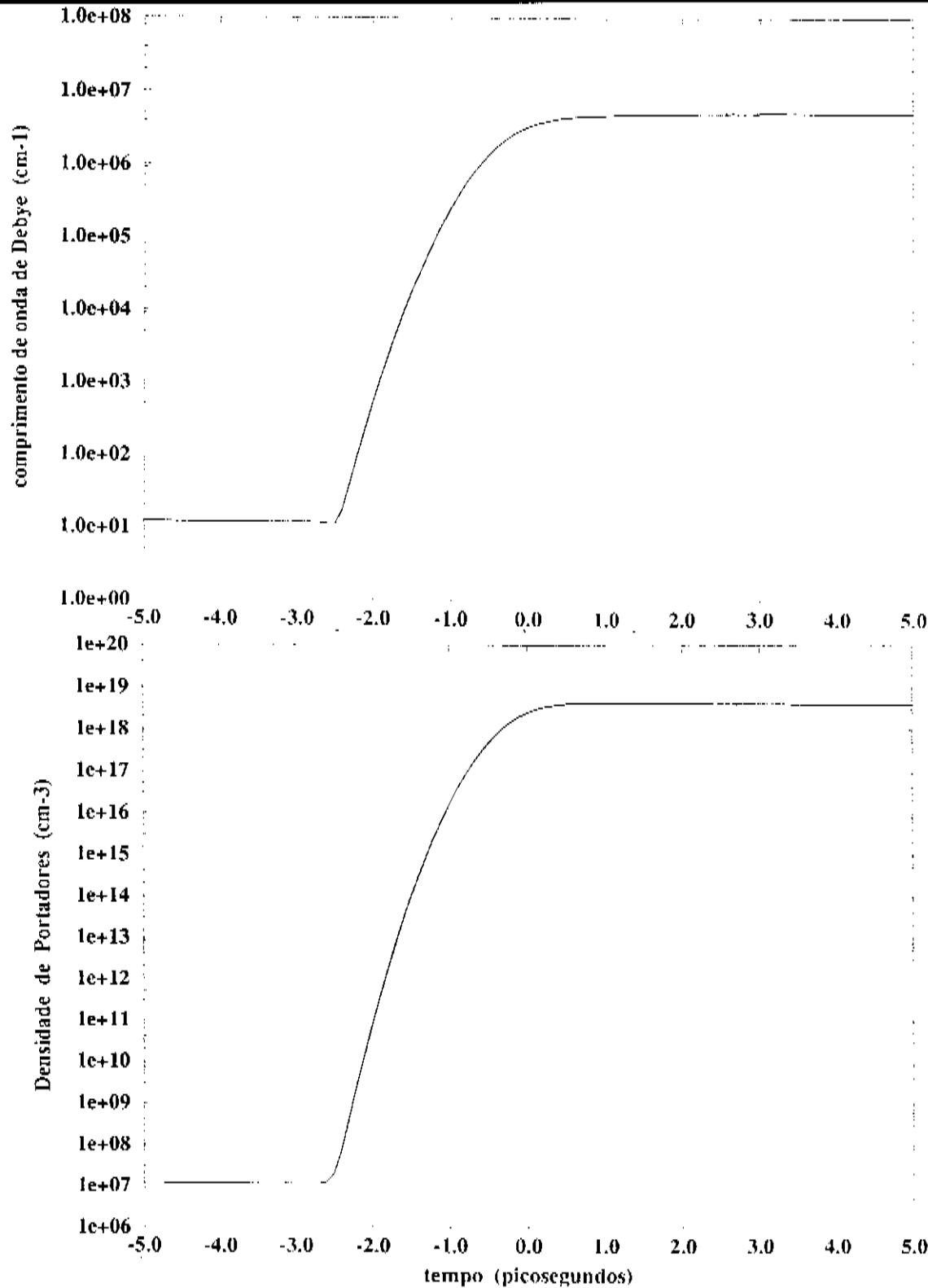


Figura 5.8: Figura a) Comprimento de onda de Debye Hückel em função do tempo de atraso relativo ao centro do pulso óptico. Figura b) Densidade de portadores em função do atraso relativo. Para ambos os gráficos temos: $I_{pulso} = 30\mu J/cm^2$, $\hbar\omega_{foton} = 1.735eV$ e $\Delta t_{pulso} = 1ps$.

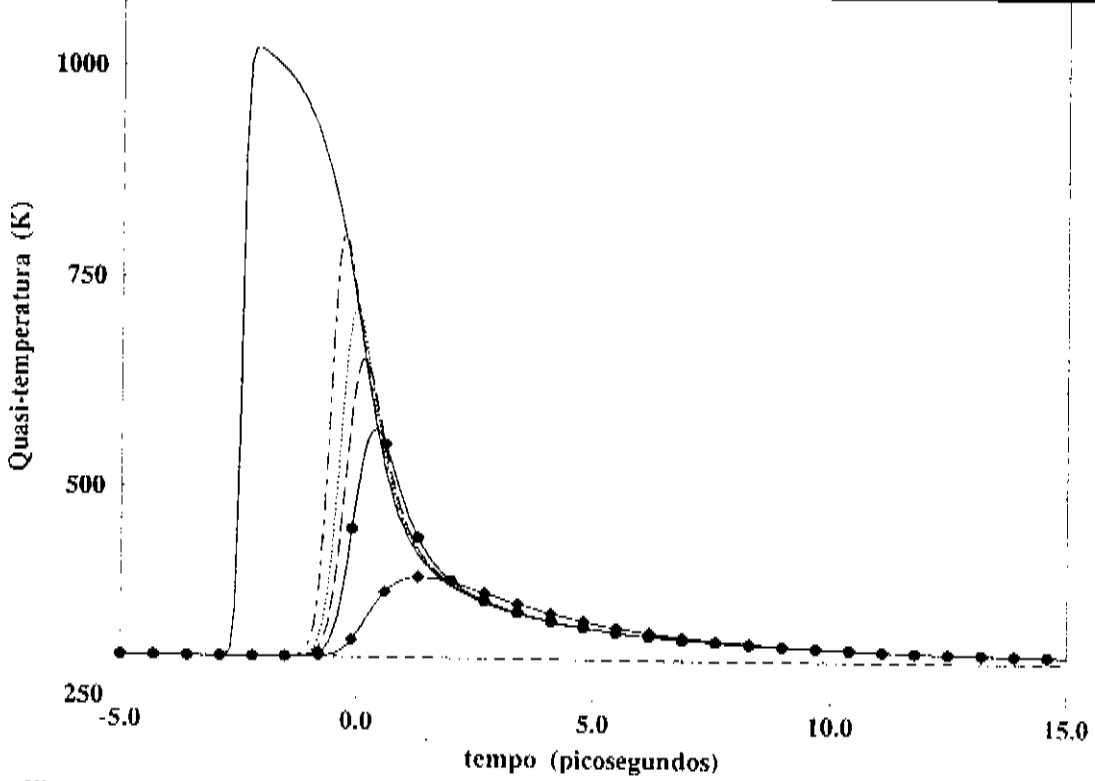


Figura 5.9: Quasi-temperatura dos portadores e pseudo-temperaturas de alguns modos LO como função do tempo de atraso relativo ao centro do pulso ($I_{pulso} = 30 \mu J/cm^2$, $\hbar\omega_{foton} = 1.735 eV$ e $\Delta t_{pulso} = 1 ps$). Vetores de onda considerados: $2 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$ (traço curto), 10^6 cm^{-1} (traço-ponto), $2.5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$ (pontilhado), $5 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$ (traço-longo), 10^7 cm^{-1} (sólido-ponto) e $2.1 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1}$ (sólido-diamante). A blindagem eletrônica é excluída do modelo e desaparece o "overshoot" dos fônons LO.

relaxação dos portadores. Com o passar do tempo este pico desaparece e obtemos uma reta levemente deslocada para cima da posição de equilíbrio, que representa um apopulação de fônons LO termalizada a temperatura $T_{LO} > T_{REDK} = 300 K$. Desta forma podemos concluir que o pico remanescente nas curvas de termalização dos fônons LO é consequência da blindagem e caracteriza, de outra maneira, o "overshoot" de temperatura dos fônons LO. Concluimos que os modos que foram livremente excitados enquanto a blindagem é pequena não conseguem devolver, na mesma taxa, o excesso de energia que receberam dos portadores.

A figura 5.11 ilustra o mesmo processo, entretanto não levamos em conta a blindagem eletrônica no cálculo destes dados. Como podemos notar a geração de fônons quentes é maior, como deveríamos esperar, já que não há blindagem enfraquecendo a interação polar. Porém não notamos os picos da figura 5.11, porque os fônons estão livres para serem reabsorvidos pelos portadores. Neste caso os fônons quentes, de quaisquer modo, são criados com a mesma velocidade com que são absorvidos e não há atraso na

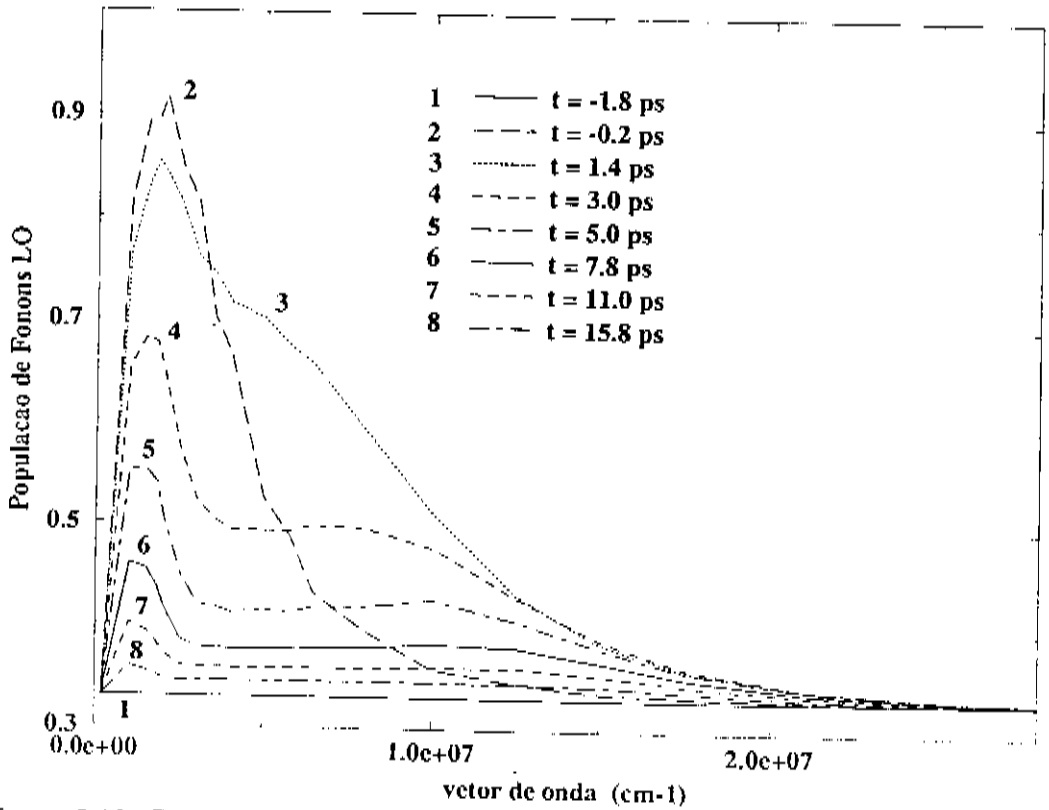


Figura 5.10: Distribuição de fônons LO em função do vetor de onda. O tempo de atraso relativo ao centro do pulso óptico é um parâmetro para as diversas curvas. ($I_{pulso} = 30\mu J/cm^2$, $\hbar\omega_{foton} = 1.735eV$ e $\Delta t_{pulso} = 1ps$).

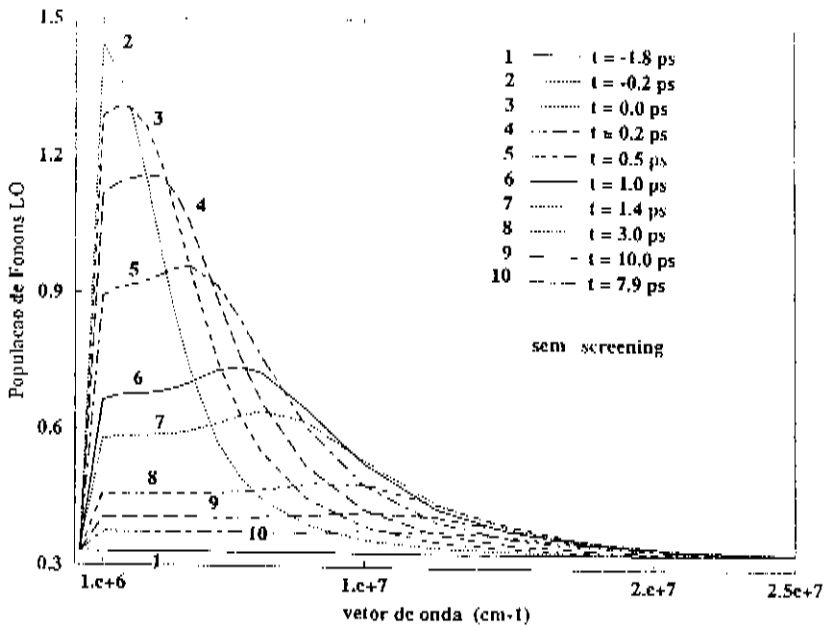


Figura 5.11: Densidade de fônons LO em função do vetor de onda. O tempo de atraso relativo ao centro do pulso óptico é um parâmetro para as diversas curvas. ($I_{pulso} = 30\mu J/cm^2$, $\hbar\omega_{foton} = 1.735eV$ e $\Delta t_{pulso} = 1ps$). A blindagem eletrônica foi excluída do cálculo.

termalização de quaisquer um deles. O estado final da distribuição é equivalente em ambos os casos.

De volta ao mecanismo proposto por Kim e Yu [24] [23], consideramos que merece ser revisto. Pois, recentemente, Kim publicou um trabalho [22] que analisa o processo de criação de fônons quentes na liga AlGaAs, excitada por fótons com 2.33 eV em pulsos de 1.5 ps de duração. Neste trabalho é defendida a idéia de que a grande maioria dos fônons passíveis de observação pela técnica Raman são criados pelos portadores originários da banda deslocada pela interação spin-órbita, isto é, aqueles que não possuem energia suficiente para serem espalhados para os vales laterais. Kim considera que poucos portadores (no caso elétrons) teriam condições de gerar fônons antes de serem espalhados pela transição intervalas - como justificativa o artigo afirma que o tempo necessário para emissão de um fônon é da ordem de 200 fs , enquanto o tempo que o portador leva para ser espalhado para o vale lateral está em torno de 20 fs (tais dados encontram respaldo em outras publicações). Como vemos estes resultados se opõem ao trabalho de Kim e Yu [24], que atribui como principal causa do "overshoot" a transição intervalas dos elétrons de alta energia; e o próprio Kim, neste último trabalho [24], sugere que os resultados anteriormente obtidos sem que se levasse em conta a banda deslocada pela interação spin-órbita fossem reavaliados.

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho estudamos a dinâmica de portadores e fônons quentes, gerados no arseneto de gálio após a incidência de pulsos ópticos.

No capítulo 2, onde estabelecemos as principais características de nosso modelo físico, definimos que os portadores estão em quasi-equilíbrio termodinâmico e a evolução temporal de suas propriedades é dada em função de quasi-temperaturas e quasi-potenciais químicos, associamos os fônons TO e AC com um banho térmico de temperatura fixa e analisamos duas formas de tratamento que foram aplicadas ao estudo da dinâmica dos fônons LO: consideramos tal sistema internamente termalizado, caracterizado pela temperatura própria T_{lo} , e completamente fora do equilíbrio, quando foi preciso calcular a evolução de cada modo independentemente. No terceiro capítulo utilizamos a Eq. de Boltzmann para obtermos expressões que descrevem a evolução temporal do sistema, enquanto os termos de interações da Eq. de Boltzmann foram calculados, a partir da Regra de Ouro de Fermi, no capítulo 4.

No capítulo 5 apresentamos os resultados de nosso trabalho, onde pudemos acompanhar a geração de portadores fotoexcitados de grande energia cinética e sua posterior relaxação térmica. A dinâmica dos fônons LO recebeu tratamento minucioso, fornecendo detalhes do processo de excitação e termalização dos fônons quentes. Entre eles verificamos a interação, excepcionalmente forte, entre os fônons LO de comprimentos de onda $10^5 \text{ cm}^{-1} < q < 10^7 \text{ cm}^{-1}$ e os portadores, que foi responsável pelo "aquecimento"

excessivo destes modos, e o fenômeno de "overshoot" da temperatura dos fônons LO. Variando a intensidade e a energia do pulso óptico, foi possível concluir que o efeito dos fônons quentes na relaxação térmica dos portadores é maior a medida que crescem a densidade e energia do plasma.

Por fim, foi proposto um novo modelo, baseado na blindagem eletrônica da interação polar, capaz de explicar adequadamente o efeito de "overshoot" da pseudo-temperatura dos fônons LO sem a inclusão da interação intervalas. Para trabalhos futuros pretendemos acrescentar em nosso modelo os vales laterais e verificar o efeito conjunto da blindagem eletrônica e do espalhamento intervalas na evolução da pseudo-temperatura dos fônons LO; pretendemos também considerar elétrons excitados a partir da banda de valência "split-off" na descrição da dinâmica de não-equilíbrio.

Apêndice A

Função de "overlap" e relaxação térmica dos buracos

Neste apêndice elaboramos os cálculos que introduzem alguns dos efeitos da simetria \mathbf{p} , dos estados de valência, na relaxação de energia.

Quando um elétron (ou buraco) é excitado do estado \vec{k} , na banda i , para um estado \vec{k}' , na banda j , o elemento de matriz da transição contém um termo multiplicativo cuja forma é [51]

$$G_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{1}{2} \sum_{\mu_1, \mu_2} \left| \int u_{j, \mu_2, \vec{k}'}^*(\vec{r}) u_{i, \mu_1, \vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r} \right|^2, \quad (\text{A.1})$$

onde $u(\vec{r})$ representa a parte periódica da função de Bloch e a soma é feita sobre os spins. A expressão (A.1) é conhecida como função de "overlap", pois representa a superposição das funções de onda dos estados inicial e final.

Para funções de onda com simetria esférica - caso dos elétrons situados próximos ao centro da banda de condução - G é igual a unidade para quaisquer vetores de onda \vec{k} e \vec{k}' . Temos então a situação mais simples.

Entretanto funções de onda de menor simetria apresentam $G \leq 1$. Este é o caso dos buracos, cujas funções de onda têm simetria predominantemente \mathbf{p} no topo da banda de valência, assim permanecendo por valores de \vec{k} relativamente grandes nos compostos III-V

de gap intermediário [51], como o GaAs. Desta forma, fazemos uma boa aproximação ao atribuirmos simetria \mathbf{p} aos buracos pesados, escrevendo para a transição intrabanda

$$G_{ii}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{1}{4} (1 + 3\cos^2\gamma) \quad (\text{A.2})$$

onde γ é o ângulo entre os vetores \vec{k} e \vec{k}' .

Porém as considerações feitas acima refletem-se de maneira diferente nos mecanismos de relaxação de energia descritas neste trabalho. É o que procuramos fundamentar a seguir.

Segundo Harrison, numa primeira aproximação, somente os buracos se acoplam com os fônons ópticos via interação não polar por potencial de deformação [39], justificando a inclusão da função de "overlap" neste cálculo.

Na interação polar, por outro lado, a utilização da função de "overlap" não se justifica, diante de sua pequena influência sobre a relaxação térmica dos portadores e das grandes complicações algébricas que causa. Neste caso, as dificuldades matemáticas são consequência do termo de blindagem eletrônica e do polinômio $\nu_n^{LO}(q)$, que descreve a população de fônons LO em termos dos seus vetores de onda. Quanto a importância deste efeito na relaxação térmica, consideramos pequena, pois cerca de 88% da energia cinética dos portadores fotoexcitados está na banda de condução.¹ Assim, são os elétrons que determinam efetivamente o ritmo da relaxação no semiconductor. Portanto na interação polar não consideramos os efeitos da função de "overlap". Com relação à interação buracos-fônons AC vale o mesmo argumento, com o reforço de que esta interação é bem menos intensa que aquelas envolvendo fônons ópticos.

Enfim, a expressão do fluxo de energia entre buracos e fônons ópticos na interação não polar, incluindo a função de "overlap" [52], é

¹Tal disparidade entre a energia cinética absorvida por elétrons e buracos fotoexcitados tem sua razão nas diferentes curvaturas das bandas de condução e valência. Com a criação de um par elétron-buraco, $\frac{\mu}{m_c^*}(\hbar\omega - E_g)$ se transforma em energia cinética da banda de condução e $\frac{\mu}{m_h^*}(\hbar\omega - E_g)$ vai para a banda de valência; onde μ é a massa efetiva $\frac{m_c^* m_h^*}{m_c^* + m_h^*}$.

$$\dot{J}^{TO,DF} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \left(\nu^{TO}(T_R) - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{to}} - 1} \right) \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}, \mu} |M^{DEF}|^2 \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{1}{4} (1 + 3\cos^2\gamma) \hbar\omega_{to} (f_{\vec{k}-\vec{q}}^b - f_{\vec{k}}^b) \delta(E_{\vec{k}-\vec{q}}^b - E_{\vec{k}}^b + \hbar\omega_{to}).$$

O ângulo γ , que define a separação entre \vec{k} e \vec{k}' , depende de $q = |\vec{k}' - \vec{k}|$, portanto fazemos

$$\dot{J}^{TO,DF} = \frac{m_b^* \omega_{to}}{\hbar^2 \pi} |M^{DEF}|^2 \left(\nu^{TO}(T_R) - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{to}} - 1} \right) \sum_{\vec{k}} \frac{1}{k} (f^b(E_{\vec{k}}^b - \hbar\omega_{to}) - f^b(E_{\vec{k}}^b))$$

$$\int_0^\infty q dq \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \frac{1}{4} (1 + 3\cos^2\gamma) \delta(E_{\vec{k}-\vec{q}}^b - E_{\vec{k}}^b + \hbar\omega_{to}) \quad (\text{A.4})$$

onde θ representa o ângulo entre \vec{k} e \vec{q} .

Nós podemos relacionar θ e γ da seguinte forma

$$\left. \begin{aligned} q^2 &= k'^2 + k^2 - 2kk' \cos\gamma \\ k'^2 &= k^2 + q^2 - 2kq \cos\theta \end{aligned} \right\} \rightarrow k - k' \cos(\gamma) = q \cos(\theta) \quad (\text{A.5})$$

$$\cos^2(\gamma) = \frac{(k - q \cos(\theta))^2}{k'^2}. \quad (\text{A.6})$$

Da conservação de energia temos

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m_b^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_b^*} - \hbar\omega_{to} \rightarrow k'^2 = k^2 - \frac{2m_b^* \omega_{to}}{\hbar}. \quad (\text{A.7})$$

Ao substituímos (A.7) em (A.6) resulta

$$\cos^2\gamma = \frac{(k - q \cos(\theta))^2}{k^2 - \frac{2m_b^* \omega_{to}}{\hbar}}. \quad (\text{A.8})$$

Aplicando o resultado acima na equação (A.4) e efetuando a integral sobre θ surge a expressão

$$\dot{J}^{TO,DF} = \frac{m_b^* \omega_{to}}{\hbar^2 \pi} |M^{DEF}|^2 \left(\nu^{TO}(T_R) - \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{to}} - 1} \right) \sum_{\vec{k}} \frac{1}{k} (f^b(E_k^b - \hbar \omega_{to}) - f^b(E_k^b))$$

$$\int_{q_{min}}^{q_{max}} \frac{q}{4} \left[1 + \frac{3}{k^2 \left(k^2 - \frac{2m_b^* \omega_{to}}{\hbar b a \tau} \right)} \left(k^2 - \frac{m_b^* \omega_{to}}{\hbar} - \frac{q^2}{2} \right) \right] dq, \quad (A.9)$$

onde

$$q_{max} = k + \sqrt{k^2 - \frac{2m_b^* \omega_{to}}{\hbar}} \quad (A.10)$$

$$q_{min} = k - \sqrt{k^2 - \frac{2m_b^* \omega_{to}}{\hbar}} \quad (A.11)$$

Temos por fim um conjunto de integrais em q , simples, porém trabalhosas, que resultam na fórmula final para \dot{J}^{TO}

$$\dot{J}^{TO,DF} = \frac{(DK)^2 m_b^*}{2\rho\pi^3} \left(\nu^{TO}(T_R) - \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{to}} - 1} \right) \int_{\sqrt{\frac{2m_b^* \omega_{to}}{\hbar}}}^{\infty} [f^b(E_k^b - \hbar \omega_{to}) - f^b(E_k^b)] k^2 \left(k^2 - \frac{2m_b^* \omega_{to}}{\hbar} \right)^2 dk, \quad (A.12)$$

ou

$$\dot{J}^{TO,DF} = G_b \frac{(DK)^2 m_b^*}{\rho\pi^3} \left(\nu^{TO}(T_R) - \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{to}} - 1} \right) \int_{\sqrt{\frac{2m_b^* \omega_{to}}{\hbar}}}^{\infty} [f^b(E_k^b - \hbar \omega_{to}) - f^b(E_k^b)] k^2 \left(k^2 - \frac{2m_b^* \omega_{to}}{\hbar} \right)^2 dk \quad (A.13)$$

se fazemos $G_b = \frac{1}{2}$. A introdução de distorções na banda de valência parabólica provoca uma queda na taxa de relaxação de energia dos buracos para os fônons TO.

Apêndice B

Cálculo de $\Phi_{i,n}$ e $\Psi_{i,n}$

Neste apêndice apresentamos as integrais que surgem da substituição de $\nu^{LO}(\beta_{l\alpha})$ por $\nu_n^{LO}(q)$ nas expressões para a relaxação de energia entre portadores e fônons LO.

Inicialmente partimos de (4.48),

$$\int_{q_1}^{q_2} \left(\nu_n^{LO}(q) - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{l\alpha}} - 1} \right) \frac{q^3}{(q^2 + q_D^2)^2} dq = \left(a_0 - \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_{l\alpha}} - 1} \right) \int_{q_1}^{q_2} \frac{q^3}{(q^2 + q_D^2)^2} dq + \sum_{i=1}^2 a_i \int_{q_1}^{q_2} \frac{q^{3+i}}{(q^2 + q_D^2)^2} dq, \quad (\text{B.1})$$

que compõe $\hat{U}^{LO,PO}$ e escrevemos

$$\Phi_2(k) = \int_{q_1}^{q_2} \frac{q^5}{(q^2 + q_D^2)^2} dq = \frac{q_2^2 - q_1^2}{2} - \frac{2q_D^4}{2} \left(\frac{1}{q_2^2 + q_D^2} - \frac{1}{q_1^2 + q_D^2} \right) - q_D^2 \ln \left(\frac{q_2^2 + q_D^2}{q_1^2 + q_D^2} \right) \quad (\text{B.2})$$

$$\Phi_1(k) = \int_{q_1}^{q_2} \frac{q^4}{(q^2 + q_D^2)^2} dq = (q_2 - q_1) + \frac{q_D^2}{2} \left(\frac{q_2}{q_2^2 + q_D^2} - \frac{q_1}{q_1^2 + q_D^2} \right) - \frac{3}{2} q_D \left(\arctan \frac{q_2}{q_D} - \arctan \frac{q_1}{q_D} \right) \quad (\text{B.3})$$

$$\Phi_0(k) = \int_{q_1}^{q_2} \frac{q^3}{(q^2 + q_D^2)^2} dq = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{q_2^2 + q_D^2}{q_1^2 + q_D^2} \right) + \frac{q_D^2}{2} \left(\frac{1}{q_2^2 + q_D^2} - \frac{1}{q_1^2 + q_D^2} \right) \quad (\text{B.4})$$

com

$$q_2 = k + \sqrt{k^2 - \frac{2m_\alpha^* \omega_{l_0}}{h}}$$

$$q_1 = k - \sqrt{k^2 - \frac{2m_\alpha^* \omega_{l_0}}{h}}$$

O segundo conjunto de integrais é obtido de

$$\int_{q_1}^{q_2} \left(\nu_n^{I,O}(q) - \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{l_0}} - 1} \right) q dq = \left(a_0 - \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{l_0}} - 1} \right) \int_{q_1}^{q_2} q dq + \sum_{i=1}^2 a_i \int_{q_1}^{q_2} q^{1+i} dq, \quad (\text{B.5})$$

e cada termo tem como resultado

$$\Psi_2(k) = \int_{q_1}^{q_2} q^3 dq = 4k \sqrt{k^2 - \frac{2m_\alpha^* \omega_{l_0}}{h}} \left(k^2 - \frac{m_\alpha^* \omega_{l_0}}{h \text{bar}} \right) \quad (\text{B.6})$$

$$\Psi_1(k) = \int_{q_1}^{q_2} q^2 dq = \frac{4}{3} \sqrt{k^2 - \frac{2m_\alpha^* \omega_{l_0}}{h}} \left(2k^2 - \frac{m_\alpha^* \omega_{l_0}}{h \text{bar}} \right) \quad (\text{B.7})$$

$$\Psi_0(k) = \int_{q_1}^{q_2} q^2 dq = 2k \sqrt{k^2 - \frac{2m_\alpha^* \omega_{l_0}}{h}} \quad (\text{B.8})$$

Bibliografia

- [1] L. Landau e A. Kompanejev ; Physik Z. Sowjetunion **6** , 163 (1934).
- [2] F. Seitz ; Phys. Rev. **76** , 1376 (1949).
- [3] M.P. Kesler e E.P. Ippen ; Appl. Phy. Lett. **51** , 1756 (1987).
- [4] H. Haug e S.W. Koch ; Phys. Rev. A **39** , 1887 (1989).
- [5] J.R. Meyer, F.J. Bartoli e M.R. Kruer ; Phys. Rev. B **21** , 1559 (1980).
- [6] W.H. Knox, C. Hirlimann, D.A.S. Miller, J. Shah, D.S. Chenola e C.V. Shank ; Phys. Rev. Lett. **56** , 1191 (1986).
- [7] A. Elci, M.O. Scully, A.L. Smirl e J.C. Matter ; Phys. Rev. B **16** , 191 (1977).
- [8] M.Pugnet, J.Collet e A. Cornet ; Solid State Commun. **38** , 531 (1981).
- [9] S.A. Lyon ; Journal of Luminescence **35** , 121 (1986).
- [10] E.J. Yoffa ; Phys. Rev. B **23** , 1909 (1981).
- [11] E.M. Conwell; High-Field Transport in Semiconductors - Solid State Physics Suppl, vol 9 (Academic, New York, 1968).
- [12] S.M. Sze ; Physics of Semiconductor Devices , (Wiley, New York, 1969) .
- [13] J. Shah e R.C.C. Leite ; Phys. Rev. Lett. **22** , 1304 (1969).
- [14] F.A. Menezes, N. Jannuzzi, J.G.P. Ramos, R. Luzzi e R.C.C. Leite ; Phys. Rev. B **11** , 2213 (1975).

- [15] R. Ulbrich ; Phys. Rev. B **8** , 5719 (1973).
- [16] J. Collet, T. Amand e M. Pugnet ; Phys. Lett. **96A** , 368 (1983).
- [17] P. Kocevar; J. Phys. **C5**, 3349 (1972)
- [18] P. Kocevar; Acta Phys. Austriaca **37**, 259 (1973)
- [19] P. Kocevar; Physica **134B**, 155 (1985)
- [20] B.K. Ridley ; Rep. Prog. Phys. **54** , 169 (1991)
- [21] C.L. Collins e Peter Yu ; Phys. Rev. B **30** , 4501 (1984).
- [22] D.S. Kim, J.M. Jacob, J.F. Zhou, J.J. Song, H. Hou, C.W. Tu e H. Morkoç; Phys. Rev. B **45**, 13973 (1992)
- [23] D.S Kim e Peter Yu; Phys. Rev. B **43**, 4158 (1991)
- [24] D.S. Kim e Peter Yu; Phys. Rev. Lett **64**, 946 (1990)
- [25] T.L. Koch, L.C. Chiu, C. Harder e A Yariv ; Appl. Phys. Lett. **41**(1) , 6 (1982).
- [26] D.W. Bailey e C.J. Stanton ; Phys. Rev. B **42** , 3423 (1990).
- [27] G. Mourou, W.H. Knox e S. Williamson ; Picosecond Electronic Devices , (Academic, New York, 1984).
- [28] B.B. Hu, X.C. Zhang e D.H. Auston ; Phys. Rev. Lett. **67** , 2709 (1991).
- [29] J.R. Chelikowsky e M.L. Cohen ; Phys. Rev. Letters **32** , 674 (1974).
- [30] D.K. Ferry, J.R. Barker e C. Jacoboni ; Physics of Nonlinear Transport in Semiconductors (Plenum, New York, 1984).
- [31] P. Bordone, C. Jacoboni, P. Lugli e L. Reggiani; Physica **134B**, 169 (1985)
- [32] H. Mori ; Prog. Theor. Phys. **33** , 423 (1965).

- [33] D.N. Zubarev ; Nonequilibrium Statistical Thermodynamics (Plenum, New York, 1974) , capítulo IV.
- [34] B. Robertson ; Phys. Rev. **144** , 151 (1966) ou "Application of Maximum Entropy Formalism to Nonequilibrium Statistical Mechanics" em The Maximum Entropy Formalism ; R.D. Levine e M. Tribus (MIT Press , Cambridge , 1978).
- [35] F. Wooten; Optical Properties of Solids (Academic, New York, 1972).
- [36] J.M. Ziman ; Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids (Oxford Univ. Press, Oxford, 1960).
- [37] B.R. Nag ; Electron Transport in Semiconductors - Springer Series in Solid-State Science , vol 11 (Springer, Berlin, 1980).
- [38] S. Das Sarma, J.K. Jain e R. Jalabert ; Phys. Rev. B **37** , 6290 (1988).
- [39] W. Harrison ; Phys. Rev. **104** , 1281 (1956).
- [40] O. Madelung ; Introduction to Solid State Theory - Springer Series in Solid State Sciences (Springer, Berlin, 1978).
- [41] Physics of Group IV elements and III-V Compounds - Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology - vol. 17a ; (Springer, Berlin, 1982) , pag. 234.
- [42] C. Jacoboni e L. Reggiani ; Adv. Phys. **28** , 493 (1979).
- [43] R.K. Chang, J.M. Ralston e D.E. Keating ; pag 369-379.
- [44] R.A. Smith ; Semiconductors (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1978).
- [45] J.R. Meyer ; Phys. Rev. B **21** , 1554 (1980).
- [46] J.F. Young e H.M. Van Driel ; Phys. Rev. B **26** , 2147 (1982).
- [47] M. Wautelet e J.A. van Vechten ; Phys. Rev. B **23** , 5551 (1981).
- [48] J. Collet e T. Amand ; Physica **134B** , 394 (1985).

- [49] D. Bimberg e J. Mycielski, Phys. Rev B **31**, 5490 (1985)
- [50] A.C.S. Algarte ; Phys. Rev. B **43** , 2408 (1991).
- [51] J.D. Wiley ; Semicouductors and Semimetals, vol 10, editores: R.K. Willardson e A.C. Beer (Academic, New York, 1979)
- [52] M. Costato e L. Reggiani, Phys. Stat. Sol. (B) **58**, 471 (1973)