

"ESTUDO DA MOBILIDADE ELETRÔNICA NOS
COMPOSTOS InGaAsP"

Maurício Francisco Ceolin

Tese apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" para obtenção do título de Mestre em Física.

outubro/83

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Marcio D'Olne Campos pela orientação e pe
la paciência.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Ao Grupo do, L.P.D. pela boa vontade.

Ao Dr. Francisco Carlos Prince pela confecção das
amostras.

Ao companheiro Hélio R. Zwi pelo incentivo e pe
las frutíferas discussões.

PREFÁCIO

Este trabalho visa, basicamente, calcular a partir de resultados experimentais duas grandezas importantes para o conhecimento dos mecanismos de transporte de carga na liga quaternária semicondutora InGaAsP.:

- a) a densidade de impurezas ionizáveis
- b) o potencial de espalhamento por desordem da rede.

Costumeiramente, a obtenção de tais resultados, necessita de dados experimentais mais completos (coletados em temperaturas próximas à do hélio líquido) e de uma complexa análise computacional. Aqui, por motivos vários, mais principalmente pela decisão de acompanhar passo a passo a evolução dos experimentos e dos cálculos, visando uma maior familiaridade com o problema, assumimos um maior dispêndio de tempo na procura de resoluções alternativas e aceitamos a possibilidade de obter resultados um pouco menos precisos. Isso, no entanto, nos parece não ter ocorrido.

Os capítulos I e II fazem um levantamento do problema estudado, descrevem o material utilizado e esboçam o arcabouço da teoria de transporte de carga.

No capítulo III descreveremos a teoria dos três processos de espalhamento que nos serão úteis. Tanto neste capítulo, como nos anteriores, as deduções são francamente voltadas para o que será necessário na fase de análise (parte final deste trabalho). As partes suprimidas, o foram, porque consideradas desnecessárias à compreensão do texto. Estas podem ser encontra

das facilmente na literatura citada.

O capítulo IV descreve equipamento experimental, a analisa as suas possibilidades e preve os resultados que poderiam ser encontradas.

A descrição e a análise dos resultados é feita no capítulo V.

Ao final, relatamos as conclusões que decorrem imediatamente dos resultados apresentados, e resumimos os possíveis caminhos abertos durante o trabalho e que não foram percorridos com a necessária atenção nem analisados profundamente. Estes ficam como sugestão para possíveis continuações.

ÍNDICE

CAPÍTULO I	- INTRODUÇÃO	1
	1) Mobilidade Eletrônica	1
	2) O Material Estudado: InGaAsP	2
CAPÍTULO II	- TRANSPORTE DE CARGA EM SEMICONDUTORES ...	5
	1) A Equação de Boltzman	5
	2) O Tempo de Relaxação	9
	3) A Densidade de Corrente	13
	4) Condutividade Elétrica e Mobilidade Eletrônica	15
	5) O Efeito Hall	16
CAPÍTULO III	- OS PROCESSOS DE ESPALHAMENTO	21
	1) Esboço da Teoria de Espalhamento	21
	2) Espalhamento por Impurezas Ionizadas .	23
	3) Espalhamento por Fonons Ópticos Polari- zes	28
	4) Espalhamento por Desordem no Potencial	30
	4.1) Introdução	30
	4.2) O Potencial Virtual	31
	4.3) O Limite de Mobilidade por Desor- dem	32
CAPÍTULO IV	- PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL	34
	1) As Amostras - Os Contatos	34
	2) Arranjo Experimental - Os Equipamentos	35
	3) Fontes de Erro Experimental	38
	4) Resultados Experimentais	41

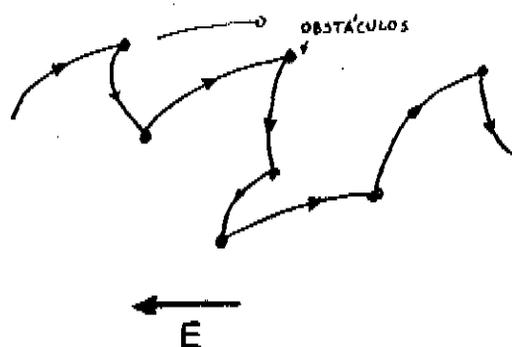
CAPÍTULO V	- MÉTODO DA ANÁLISE DA MOBILIDADE	46
	1) Cálculo da Mobilidade	46
	2) Métodos de Análise	49
	3) Resultados da Análise	51
	4) Fontes de Erro na Análise	53
CAPÍTULO VI	- CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	56
REFERÊNCIAS	58

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

1) Mobilidade Eletrônica

Quando um semicondutor é submetido a um campo elétrico, os elétrons de sua banda de condução são acelerados. Se a rede cristalina fosse perfeita, os elétrons não sofreriam oposição ao seu deslocamento e a condutividade do cristal seria infinita. A presença de imperfeições no cristal e o próprio movimento térmico dos íons que formam a rede limitam o movimento dos elétrons. Nestas condições, o movimento dos elétrons pode ser visualizado, classicamente, como uma sucessão de segmentos interrompidos por choques com obstáculos diversos; cada segmento tem uma direção completamente aleatória com uma velocidade térmica ligeiramente perturbada por uma aceleração na direção do campo elétrico.



Movimento térmico dos elétrons perfurado por um campo elétrico

O resultado do movimento conjunto de todos os elétrons da banda de condução é o equivalente ao que teríamos se considerássemos que todos os elétrons tivessem uma só velocidade média constante na direção do campo. Essa velocidade será proporcional à intensidade do campo elétrico. Assim:

$$\vec{v} = \mu \vec{E}$$

A constante de proporcionalidade, μ , chamada mobilidade eletrônica, depende da temperatura e das propriedades in-trínsecas do material, sendo independente do campo elétrico, ao menos na região de baixo campo.

No sentido acima esboçado, a mobilidade é uma medida dos efeitos das imperfeições do potencial cristalino sobre os portadores de carga. É, portanto, um bom indicador de qualidade do material analisado.

As imperfeições do potencial cristalino podem ser causadas por defeitos estruturais (dislocações, vacâncias, grãos, etc. ...), defeitos químicos (impurezas neutras ou ionizadas), pe-las vibrações térmicas da rede (fonons ópticos e acústicos) ou ainda, no caso de ligas, pela aleatoriedade na distribuição dos materiais constituintes pelos pontos da rede.

A análise da variação da mobilidade com a tempera-tura pode fornecer dados importantes para o conhecimento do mate-rial; essencialmente é este o tema a ser desenvolvido neste tra-balho.

2) O Material Estudado: (InGaAsP)

A liga quaternária cristalina $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$, pode ser crescida sobre substrato de InP ou GaAs, por epi-taxia de fase líquida ou gasosa. A concentração de As pode ser variada de 0 a 1, levando atrelada a ela a concentração de Ga (usando-se InP como substrato, $y \approx 2.1x$), sem que o ca-samento com o parâmetro de rede do substrato deixe de ser quase perfeito. Esta propriedade permite que se consiga compostos cu-jo "gap" pode variar entre 0,73 e 1,35 eV, intervalo que con-tem a região de mínima perda e mínima dispersão das fibras ópti

cas, o que permite que o material tenha grande utilização, nos sistemas de comunicação óptica.^(1,2)

Várias grandezas físicas do material aparecem como parâmetros nos cálculos que desenvolveremos. A massa efetiva dos elétrons na banda de condução tem presença constante nas equações para os tempos de relaxação dos três processos de espalhamento aqui analisados. A energia dos fonons ópticos polares determina a taxa de espalhamento dos elétrons por eles, a qual também depende das constantes dielétricas de alta frequência e estática. O espalhamento por desordem depende da constante de rede do material.

A massa efetiva dos elétrons no In Ga AsP tem sido medida basicamente por três métodos: ressonância de magneto-fonons⁽³⁾, por oscilações de resistência no efeito Shubnikov - de Haas⁽⁴⁾ e por ressonância de ciclotron. Os resultados obtidos por vários pesquisadores nem sempre concordam, apresentando às vezes discrepância significativa. Nicholas e outros⁽³⁾ empregando os três métodos enumerados obteve resultados concordantes, na maior parte das possíveis composições. Seus resultados coincidem com os de Perez e outros⁽⁴⁾ e dão para nossas amostras ($y = 0,60$) $m^* = 0,057 m_0$.

O parâmetro de rede da camada epitaxial difere ligeiramente da do substrato e depende da composição da liga. Nahory⁽⁵⁾ e outros mediram o parâmetro de rede das ligas abrangendo todo o espectro de composições, usando uma variante do método de Bond⁽⁶⁾ de difração de raios x. Para a composição aqui analisada, $a = 5,8688 \text{ \AA}$.

O espectro Raman do In Ga AsP apresenta dois modos ópticos de vibrações de rede, um relativo ao InP e outro similar

ao ternário $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$. Para a nossa composição, a razão entre as intensidades é próxima à unidade⁽⁷⁾ e, Takeda e outros⁽⁸⁾ mostraram que se pode calcular a mobilidade limitada por fonons ópticos polares com um modelo a um único fônion com energia (em k) $\Theta = 442\text{k}$; a qual concorda com os resultados experimentais de Pinczuk⁽⁷⁾.

A constante dielétrica não tem determinação experimental na maioria dos pontos de composição. Emprega-se o método de interpolação desenvolvido por Moon e outros⁽⁴¹⁾ que produz resultados satisfatórios quando aplicado a grandezas como a massa efetiva, o parâmetro de rede e o valor do gap, para determiná-la. O método se baseia nos valores das grandezas dos binários ou dos ternários constituintes da liga, e a grandeza do quaternário é calculada por:

$$Q(x,y) = xy T_{BC} + x(1-y) T_{BD} + y(1-x) T_{AC} + (1-x)(1-y)T_{AD}$$

para compostos quaternários da forma $A_{1-x}B_xD_{1-y}$ onde T_{ij} é o parâmetro do binário ij. O valor obtido por esta interpolação, para nossa composição é 13,3 para a constante dielétrica estática e de 11,1 para a constante dielétrica de alta frequência.

CAPÍTULO II

TRANSPORTE DE CARGA NOS SEMICONDUTORES

1) Equação de Transporte de Boltzmann

Em um cristal perfeito a função de onda de Bloch dos elétrons, $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ pode subsistir inalterada indefinidamente. Se um campo de forças exterior $V(\vec{r})$ for aplicado ao cristal perfeito, o estado de todos os elétrons contidos numa zona de Brillouin se modificará segundo a equação:

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = - \frac{1}{\hbar} \nabla V(\vec{r}) \quad (1)$$

Na condição de equilíbrio anterior à aplicação do campo, a distribuição dos elétrons entre os estados permitidos pela estrutura do cristal, pode ser descrita pela função de distribuição $f(\vec{r}, \vec{k})$. A alteração das funções de onda dos elétrons provocada pela introdução de um campo de forças externo, introduzirá modificações na função de distribuição, de modo que esta se desenvolverá no tempo segundo:

$$\begin{aligned} \frac{df(\vec{r}, \vec{k}, t)}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} \cdot \frac{d\vec{k}}{dt} \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\vec{r}} f \cdot \vec{v} - \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V \end{aligned} \quad (2)$$

Tendo em conta que o número de estados permitidos se conserva durante uma trajetória no espaço de fases (\vec{r}, \vec{k}) ; (teorema de Liouville)⁽⁸⁾ e que o número de elétrons permanece constante, temos que:

$$\frac{df}{dt} = 0$$

Então

$$-\frac{\partial f}{\partial t} = \nabla_{\vec{r}} f \cdot \vec{v} - \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V \quad (3)$$

Por esta equação se pode ver que a variação da função de distribuição em relação ao tempo, se deve a uma superposição da variação da posição dos elétrons no espaço real e da variação do seu vetor de onda.

A até agora alegada perfeição do cristal é irreal; todos os cristais possuem um número grande de imperfeições de vários tipos. O conjunto destes defeitos age como um campo de forças interno, que perturba o movimento dos elétrons. Ao contrário das forças exteriores que produzem uma variação lenta na função de onda dos elétrons e cuja ação depende fracamente da posição, o campo de forças interiores é extremamente local e normalmente produz variações bruscas no movimento eletrônico. A zona de ação de uma perturbação local não se estende por uma distância maior do que 10^{-9} m e considerando-se que a velocidade térmica dos elétrons é da ordem de 10^4 m/s, a interação durará cerca de 10^{-13} segundos. Uma interação tão curta causa uma variação tão brusca na velocidade dos elétrons quanto uma colisão clássica, por este motivo a ação das imperfeições é tratada pela teoria semiclassical do espalhamento de elétrons.

A existência de campos internos e a diferença na sua ação comparada à do campo externo, obriga que se desmembre o termo da equação (3) referente à ação de forças nas suas partes externa e interna,

$$\nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V = \nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V_A + \nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V_C \quad (4)$$

onde o primeiro termo representa a ação das forças aplicadas ex-

ternamente e o segundo, chamado termo de colisão, a ação do campo de forças internas.

Em virtude da extrema localização dos centros de espalhamento, cada um age diferentemente sobre os elétrons, o que torna impraticável a análise dinâmica da sua ação. A forma analítica do termo de colisão tem, portanto, que ser feita usando-se procedimentos estatísticos.

Suponhamos que, sob o efeito de uma colisão, as partículas passem de um estado (\vec{r}, \vec{k}) a um estado (\vec{r}', \vec{k}') . Seja $\omega(\vec{k}, \vec{k}')$ a probabilidade desta transição. Durante a "colisão" de um elétron com um centro de espalhamento, as coordenadas do elétron não sofrem variação notável, motivo pelo qual a probabilidade de transição é independente das coordenadas \vec{r} e \vec{r}' .

Dentro dos volumes elementares $d\tau_k$ e $d\tau_{k'}$, que circundam os pontos \vec{k} e \vec{k}' respectivamente, o número de estados permitidos é $\frac{d\tau_k}{4\pi^3}$ e $\frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3}$, e o número de estados ocupados é $f(r, k) \frac{d\tau_k}{4\pi^3}$ e $f(r, k') \frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3}$, respectivamente.

Em virtude do princípio de Pauli, o número de transições entre os dois volumes depende não somente da probabilidade de transição e do número de estados ocupados, mas também do número de estados vazios. Assim, no intervalo de tempo dt , o número de estados ocupados no volume de fase $d\tau_k$ deverá variar, em razão das transições de elétrons entre os dois volumes, de:

$$- dt \{ \omega(k, k') \frac{d\tau_k}{4\pi^3} f(\vec{r}, k) [1 - f(\vec{r}, k')] \frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3} \\ + dt \{ \omega(k', k) \frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3} f(\vec{r}, k') [1 - f(\vec{r}, k)] \frac{d\tau_k}{4\pi^3} \}$$

O primeiro termo dá conta da diminuição do número de par

tículas no volume $d\tau_k$ devido às transições para o volume $d\tau_{k'}$, o segundo relata o aumento deste número devido às transições inversas.

É razoável⁽¹⁰⁾ supor que a probabilidade de transição em ambas as direções seja igual [$\omega(kk') = \omega(k'k)$]. Então, estendendo o volume $d\tau_k$, para toda a zona de Brillouin, a variação total do número de partículas no volume $d\tau_k$, no intervalo de tempo dt , será

$$dt \frac{d\tau_k}{4\pi^3} \int_{V_k} \{ \omega(k, k') [f(\vec{r}, \vec{k}') - f(\vec{r}, \vec{k})] \} \frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3} \quad (5)$$

Reintegrando a equação (3), tendo em vista (4), obtemos,

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \vec{v} \cdot \nabla_r f + \frac{1}{\hbar} \nabla V_A \cdot \nabla_k f + \int \omega(k, k') [f(\vec{r}, \vec{k}') - f(\vec{r}, \vec{k})] \frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3}$$

que é a equação de transporte de Boltzmann.

No caso estacionário: $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$, o que implica que:

$$\vec{v} \cdot \nabla_r f - \frac{1}{\hbar} \nabla V_A \cdot \nabla_k f = \int \omega(k, k') [f(\vec{r}, \vec{k}') - f(\vec{r}, \vec{k})] \frac{d\tau_{k'}}{4\pi^3} \quad (7)$$

que mostra que a variação da função de distribuição devida à ação do campo exterior aplicado e ao movimento das partículas é compensado pela ação dos centros espalhadores internos ao cristal.

A validade da equação de Boltzmann é inquestionável desde que:

- os campos de forças exteriores não modifiquem o espectro energético do cristal.
- os processos estudados não sejam de curta duração, pois

a equação de Boltzmann é semiclássica e processos muito rápidos levariam a uma grande incerteza nos valores das energias envolvidas. (Princípio de Incerteza de Heisenberg)

2) O tempo de Relaxação

A equação de transporte de Boltzmann tem solução geral dificilmente encontrável. A dificuldade é bastante reduzida com a hipótese do tempo de relaxação dos processos de espalhamento envolvidos.

Suponhamos que em certo momento a ação dos campos exteriores seja suprimida. O sistema neste momento se encontra fora do equilíbrio e traze-lo de volta a uma situação estacionária é tarefa dos centros espalhadores. A hipótese mais simples que se pode fazer sobre a evolução do processo de relaxação é dizer que a rapidez de restabelecimento do equilíbrio é proporcional a quanto o sistema está fora dele. Assim, se $f_0(\vec{r}, \vec{k})$ é a função de distribuição no equilíbrio,

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(\vec{k})} \quad (8)$$

onde $\tau(\vec{k})$ é o tempo de relaxação do processo.

Comparando a equação (8) com a equação (6), com os campos externos anulados, temos para o tempo de relaxação:

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{V_k} \omega(k, k') \frac{f(r, k, t) - f(\vec{r}, \vec{k}', t)}{f(r, k, t) - f_0(\vec{r}, \vec{k})} d\tau_{k'} \quad (9)$$

Se o tempo de relaxação não depende dos campos externos, temos

$$\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{\hbar} \nabla V_A \cdot \nabla_{\vec{k}} f = - \frac{f(\vec{r}, \vec{k}) - f_0(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(\vec{k})} \quad (10)$$

Esta expressão descreve os efeitos de transporte nos estados estacionários nos casos onde o tempo de relaxação pode caracterizar plenamente os processos envolvidos.

Uma solução de (10) pode ser obtida na forma de uma série, onde cada termo é da ordem da derivada do anterior e menor que aquele:

$$f(\vec{r}, \vec{k}) = f_0(\vec{r}, \vec{k}) + f_1(\vec{r}, \vec{k}) + f_2(\vec{r}, \vec{k}) + \dots$$

Em primeira aproximação

$$f(\vec{r}, \vec{k}) = f_0(\vec{r}, \vec{k}) + f_1(\vec{r}, \vec{k}) \quad (11)$$

substituindo em (10)

$$\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f - \frac{1}{\hbar} \nabla V_A \cdot \nabla_{\vec{k}} f = - f_1(\vec{r}, \vec{k}) \quad (12)$$

Usando a distribuição de Fermi-Dirac,

$$f_0(\vec{r}, \vec{k}) = [\exp(\frac{\epsilon - F}{kT}) + 1]^{-1}$$

e admitindo que o nível de Fermi e a temperatura não dependem da posição temos:

$$\nabla_{\vec{r}} f_0 = 0; \quad \nabla_{\vec{k}} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \hbar \vec{v}$$

Assim, colocando o campo externo como sendo da forma da força de Lorentz e considerando as equações (10) e (12), temos:

$$- f_1 \frac{(\vec{r}, \vec{k})}{\tau(\vec{k})} = \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f_1 + (e\vec{E} + e\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{v} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} + \frac{1}{\hbar} (e\vec{E} + e\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{k}} f_1$$

As derivadas de f_1 são da mesma ordem de f_2 , portanto desprezíveis dentro da aproximação que estamos usando. Então:

$$f_1(\vec{r}, \vec{k}) = -\tau(\vec{k}) e \vec{E} \cdot \vec{v} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \quad (14)$$

Assim, em primeira aproximação a função de distribuição é independente do campo magnético.

$$f(\vec{r}, \vec{k}) = f_0(\vec{r}, \vec{k}) - e\tau(\vec{k}) \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \vec{E} \times \vec{v} \quad (15)$$

Quando, como no nosso caso, se deseja considerar os efeitos do campo magnético é necessário reter o termo em $\nabla_k f_1$. Suponhamos que $f_1(\vec{r}, \vec{k})$ possa ser posta na forma:

$$f_1(\vec{r}, \vec{k}) = -\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \vec{\chi} \cdot \vec{v} \quad (16)$$

onde $\vec{\chi}$ é uma função vetorial desconhecida que contém implicitamente os campos externos. Então, se a massa efetiva é escalar:

$$\nabla_k f_1 = -\frac{d}{d\vec{k}} \left(\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \vec{\chi} \cdot \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon}{d\vec{k}} \right) = -\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \vec{\chi} \frac{\hbar}{m^*} - \vec{v} \cdot \frac{d}{d\vec{k}} \left(\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \vec{\chi} \right) \quad (17)$$

Deste modo,

$$\frac{e}{\hbar} (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \nabla_k f_1 = -\frac{e}{m^*} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \vec{\chi} \cdot (\vec{v} \times \vec{B}) \quad (18)$$

Portanto:

$$f_1(\vec{r}, \vec{k}) = -e \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left(\tau \vec{E} + \frac{e\tau}{m^*} \vec{\chi} \times \vec{B} \right) \cdot \vec{v} \quad (19)$$

A função $\vec{\chi}$ é, portanto

$$\vec{\chi} = e \vec{E} \tau + \frac{e\tau}{m^*} \vec{\chi} \times \vec{B}$$

para resolvê-la em termos dos campos exteriores, adotemos para simplificar

$$\vec{\psi} = \frac{e\tau}{m^*} \vec{B}; \quad \vec{A} = e\tau\vec{E}$$

então

$$\vec{\chi} = \vec{A} + \vec{\chi} \times \vec{\psi}$$

como as identidades vetoriais

$\vec{\chi} \cdot \vec{\psi} = \vec{A} \cdot \vec{\psi}$ e $\vec{\chi} \times \vec{\psi} = \vec{\psi} - \vec{A}$ se verificam, temos:

$$\vec{\chi} = \frac{\vec{A} + \vec{A} \times \vec{\psi} + \vec{\psi}(\vec{A} \cdot \vec{\psi})}{1 + \psi^2}$$

ou seja

$$\vec{\chi} = \frac{e\tau\vec{E} + \frac{e^2\tau^2}{m^*} \vec{E} \times \vec{B} + \frac{e^2\tau^2}{m^{*2}} \vec{B}(\vec{E} \cdot \vec{B})}{\frac{e^2\tau^2}{m^{*2}} B^2} \quad (21)$$

No caso em que \vec{E} e \vec{B} são perpendiculares

$$\vec{\chi} = \frac{e\tau\vec{E} + \frac{e^2\tau^2}{m^*} \vec{E} \times \vec{B}}{1 + \frac{e^2\tau^2}{m^*} B^2} \quad (22)$$

e, portanto; a distribuição dos elétrons nos estados quânticos sob a ação de campos elétricos e magnéticos externos perpendiculares entre si, pode ser vista a partir das equações (13),

(16) e (22):

$$f(\vec{r}, \vec{k}) = f_0(\vec{r}, \vec{k}) - \frac{\partial f_0}{\partial \vec{E}} \frac{e\tau \vec{E} \cdot \vec{v} + \frac{e^2 \tau^2}{m} (\vec{E} \times \vec{B}) \cdot \vec{v}}{1 + \frac{e^2 \tau^2}{m} B^2} \quad (23)$$

O cálculo acima foi realizado com o intuito de se poder deduzir uma expressão analítica do efeito Hall; na mesma linha de raciocínio, calculamos agora uma expressão para a densidade de corrente.

3) Densidade de Corrente

Os elétrons que ocupam um volume elementar do espaço dos vetores de onda, e um volume unitário do cristal, podem transportar uma densidade elementar de corrente:

$$d\vec{j} = e \vec{v} \frac{d\tau_k}{4\pi^3} f(\vec{r}, \vec{k})$$

A densidade total de corrente por unidade de volume do cristal, será:

$$\vec{j} = \frac{e}{4\pi^3} \int_{V_k} \vec{v} f_1 d\tau_k \quad (24)$$

tendo em conta as equações (16) e (23), a equação (24) se torna:

$$\vec{j} = - \frac{e}{4\pi^3} \int \vec{v} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \left(\frac{e\tau \vec{E} \cdot \vec{v} + \frac{e^2 \tau^2}{m} (\vec{E} \times \vec{B}) \cdot \vec{v}}{1 + \frac{e^2 \tau^2}{m} B^2} \right) d\tau_k$$

Substituindo

$$\mu(\vec{k}) = \frac{e\tau(\vec{k})}{m^*} \quad ; \quad \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{d\vec{k}}$$

onde $\mu(\vec{k})$ é a mobilidade do elétron ocupando o estado \vec{k} , temos

$$\begin{aligned} \vec{j} &= - \frac{e}{4\pi^3} \int_{V_k} \left[\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left(\frac{e\tau \vec{E} + \frac{e^2\tau^2}{m^*} \vec{E} \times \vec{B}}{1 + \mu^2 B^2} \right) \cdot \vec{v} \right] \vec{v} d\tau_k \\ &= - \frac{e}{12\pi^3} \int_{V_k} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \left(\frac{e\tau \vec{E} + \frac{e\tau}{m^*} \vec{E} \times \vec{B}}{1 + \mu^2 B^2} \right) v^2 d\tau_k \end{aligned} \quad (25)$$

ou

$$\vec{j} = - \frac{e^2}{12\pi^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{\tau v^2 \vec{E}}{1 + \mu^2 B^2} d\tau_k - \frac{e^3}{12\pi^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{v^2 \tau / m^* \vec{E} \times \vec{B}}{1 + \mu^2 B^2} d\tau_k$$

A fim de simplificar a notação e posterior resolução, introduzimos os coeficientes cinéticos (cujo sentido físico se verá adiante);

$$K_{rs}^{ij} = - \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\varepsilon^{r-1} \tau^s}{1 + \mu^2 B^2} v_i v_j d\tau_k \quad (26)$$

Assim, a densidade de corrente pode ser expressa por:

$$\vec{j} = e^2 \vec{E} K_{11} + \frac{e^3}{m^*} \vec{E} \times \vec{B} K_{12} \quad (27)$$

4) Condutividade Elétrica e Mobilidade Eletrônica

A condutividade elétrica $\bar{\sigma}$ é definida como a constante de proporcionalidade entre os valores do campo elétrico aplicado e a densidade de corrente obtida.

$$\vec{j} = \bar{\sigma} \vec{E}$$

Das fórmulas deduzidas na seção anterior pode-se, para $B = 0$, escrever a condutividade escalar como:

$$\sigma = e^2 K_{11} \quad (28)$$

Pode-se demonstrar⁽¹¹⁾ que o coeficiente cinético K_{11} pode ser relacionado com a densidade de portadores através de:

$$K_{11} = \frac{n \langle \tau \rangle}{m^*} \quad (29)$$

onde $\langle \tau \rangle$ é o valor médio do tempo de relaxação entre todos os elétrons participantes da corrente elétrica. Assim:

$$\sigma = \frac{e^2 n \langle \tau \rangle}{m^*} = en\mu_D \quad (30)$$

onde μ_D é a mobilidade média dos elétrons.

Então, se a condutividade $\bar{\sigma}$ é um escalar, e como a resistividade $\bar{\rho} = \frac{1}{\sigma}$

$$\mu_D = \frac{1}{\rho en} \quad (31)$$

A média sobre o tempo de relaxação dos elétrons é feita⁽¹²⁾ na ausência de campo magnético, da forma:

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-x} \tau(x) dx}{\int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-x} dx}; \quad x = \frac{\epsilon}{kT} \quad (32)$$

então, se o tempo de relaxação $\bar{\epsilon}$ é uma função potência da energia, $\tau(x) = \tau_0 x^p$, onde τ_0 é em geral função da temperatura, mas não da energia do portador, $\langle \tau \rangle$ pode ser escrito em termos da função gama de Euler

$$\langle \tau \rangle = \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + p)}{\Gamma(5/2)} \quad (33)$$

Uma tabela para o valor de $\langle \tau \rangle / \tau_0$ para os valores de p relativos aos processos de espalhamento mais comumente encontrados é dada abaixo:

p	1/2	3/2	- 1/2
$\frac{\langle \tau \rangle}{\tau_0}$	$\frac{8}{3\sqrt{\pi}}$	$\frac{8}{\sqrt{\pi}}$	$\frac{4}{3\sqrt{\pi}}$

5) O Efeito Hall

Suponhamos um semicondutor homogêneo a uma temperatura T constante, submetido a um campo elétrico $\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$ e a um campo magnético $\vec{B} = (0, B, 0)$. Numa experiência em que

se imponha que a densidade de corrente seja $\vec{j} = (j_x, 0, 0)$, podemos escrever, baseados em (27), que:

$$j_x = e^2 E_x K_{11} - \frac{e^3}{m^*} K_{12} E_z B \quad (34)$$

$$j_y = 0 = e^2 E_y K_{11} \quad (35)$$

$$j_z = e^2 E_z K_{11} + \frac{e^3}{m^*} K_{12} E_x B = 0 \quad (36)$$

De (35) implica que $E_y = 0$

De (36) em (34),

$$j_x = e^2 K_{11} E_x \left(1 + \frac{e^2}{m^*} \frac{K_{12}^2}{K_{11}^2} \right) \quad (37)$$

Podemos definir a mobilidade de Hall dos elétrons como:

$$\mu_H = \frac{e}{m^*} \frac{K_{12}}{K_{11}} \quad (38)$$

Como se pode ver na referência (11) esta grandeza difere da mobilidade média dos elétrons μ_0 apenas por uma constante multiplicativa. Temos então:

$$j_x = \sigma_B E_x = e^2 K_{11} (1 + \mu_H^2 B^2) E_x \quad (39)$$

onde σ_B é a condutividade elétrica do material na presença do campo magnético

$$\sigma_B = e^2 K_{11} (1 + \mu_H^2 B^2) \quad (40)$$

Das condições que impusemos no experimento, podemos ver que a apli

cação de uma corrente na direção x , e de um campo magnético na direção y faz com que apareça um campo elétrico na direção z . A relação

$$R_H = - \frac{E_y}{j_x B} \quad (41)$$

é praticamente independente dos campos externos aplicados (enquanto eles sejam fracos) e R_H é a constante de Hall. Do conjunto de expressões anteriores, pode-se tirar que:

$$R_H = \frac{\mu_H}{\sigma B} = \frac{\frac{e}{m^*} \frac{K_{12}}{K_{11}}}{e^2 K_{11} \left[1 + \frac{e^2}{m^{*2}} \frac{K_{12}^2 B^2}{K_{11}^2} \right]} \quad (42)$$

Usando as expressões para K_{11} e K_{12} , no limite de campos magnéticos fracos, conforme deduzidas na referência (11):

$$K_{11} = \frac{n}{m^*} \langle \tau \rangle, \quad K_{12} = \frac{n}{m^*} \langle \tau^2 \rangle, \quad (\mu^2 B^2 \ll 1)$$

temos

$$R_H = \frac{1}{en} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \quad (43)$$

de modo que R_H é uma medida da concentração de elétrons na banda de condução do material estudado. O fator $\frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}$ depende do mecanismo de espalhamento atuante e se o tempo de relaxação é uma função potência da energia,

$$\tau = \tau_0 E^p,$$

segundo a referência (6), temos:

$$\frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} = \frac{\Gamma(-\frac{5}{2})\Gamma(5/2)}{[\Gamma(-\frac{5}{2} + p)]^2} \quad (44)$$

Para os principais mecanismos de espalhamento

p	1/2	2/2	-1/2
$\frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}$	1,13	1,93	1,18

Ainda dentro do limite de campos magnéticos fracos, a mobilidade

se escreve:
$$\mu_H = \frac{e}{m^*} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle} \quad (45)$$

A mobilidade média dos elétrons foi definida como:

$$\mu_D = \frac{e \langle \tau \rangle}{m} \quad , \quad \text{então}$$

$$\mu_H = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \mu_D = r_H \mu_D \quad (46)$$

As expressões deduzidas nesta secção e nas anteriores sugerem duas maneiras de se calcular a mobilidade média dos elétrons. Uma delas é usar a expressão, com base nas medidas de R_H e ρ .

$$\mu_H = \frac{R_H}{\rho} = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \mu_D \quad (47)$$

A dificuldade com este cálculo é que o fator $\frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}$

não e facilmente calculável quando interagem simultaneamente vários processos de espalhamento. Ela pode ser amenizada considerando que nos limites de temperaturas altas e com campos magnéticos fortes $\langle \tau \rangle^2 = \langle \tau \rangle^2$ e portanto $\mu_H = \mu_D$ (6). Note-se que campo magnético forte é aquele para o qual $\mu_H B \gg 1$. Para um material cuja mobilidade seja da ordem de $5000 \frac{\text{cm}^2}{\text{v.s}}$, esta condição se cumpre com campos magnéticos da ordem de 60 RG.

A segunda maneira de se medir a mobilidade é sugerida pela equação (40), que pode ser posta da forma:

$$\mu_H = \frac{1}{B} \sqrt{\frac{\tau_B - \tau_0}{\tau_0}} \quad (48)$$

De forma que se pode medir a mobilidade através da variação da condutividade elétrica com o campo magnético. As dificuldades aqui aumentam, pois variando-se o campo magnético, o fator $\frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle}$ varia, e se vários processos de espalhamentos estão atuando o seu cálculo se torna praticamente impossível. Assim, é preferível calcular a mobilidade de Hall e compará-la diretamente com a mobilidade média do elétrons através de uma estimativa do fator r_H , feita através da comparação do valor de R_H , para alto e baixo campo. Convém ressaltar que aqui admitiremos que $r_H = 1$, dado fornecido por estudos alheios, que serão citados em outro momento.

CAPÍTULO III

OS PROCESSOS DE ESPALHAMENTO

1) Esboço da Teoria de Espalhamento

Em um cristal perfeito, uma corrente elétrica se manteria indefinidamente mesmo depois da supressão do campo elétrico que a gerou. Nos cristais reais, a interação dos portadores de corrente com as perturbações do potencial periódico, faz com que a corrente se extinga rapidamente após o desligamento do campo externo. Então:

$$j(t) = j_0 \exp(-t/\langle t_0 \rangle)$$

O parâmetro $\langle t_0 \rangle$, tempo médio de relaxação da corrente, mede a rapidez de aniquilamento da corrente, isto é, do retorno do sistema ao equilíbrio sob a ação dos centros espalhadores.

Os defeitos geradores de centro de espalhamento podem ser estruturais (deslocações, lacunas, junção de grão, etc. ...) ou químicos (átomos ou íons de impureza). As vibrações térmicas de rede, sob a forma de fonons acústicos ou ópticos, também atuam como fonte de espalhamento.

A teoria formal do espalhamento de entidades quânticas é extremamente complexa, seu desenvolvimento é longo e foge do interesse geral deste trabalho, razões pelas quais aqui faremos apenas um esboço, abordando somente as particularidades que nos serão úteis; mais detalhes podem ser obtidos facilmente na literatura, notadamente nas obras citadas.

A relaxação da corrente está intimamente ligada à relaxação do momento dos portadores de carga. O tempo de relaxação

do momento, τ_m , que é igual ao inverso da probabilidade de que um portador de corrente sofra uma colisão com um centro espalhador por unidade de tempo, pode ser escrito como (13):

$$\tau_m = (\sigma_m N_i v)^{-1} \quad (1)$$

onde σ_m é a secção de colisão do centro espalhador, N_i é a sua densidade volumétrica e v é a velocidade do portador.

A secção de colisão, além de ser uma característica do centro espalhador, depende de como o portador se aproxima de le e, como esta aproximação influencia diretamente o desvio que o portador sofrerá na sua velocidade, a secção de espalhamento dependerá do angulo de desvio. Assim, pode-se definir a secção diferencial de espalhamento ($\sigma(\theta)$) em relação ao ângulo de desvio da velocidade do portador e a secção total de espalhamento, σ_m , que é a integral de $\sigma(\theta)$ sobre o ângulo sólido concentrado no espalhador, usando uma função peso que leva em conta a influencia relativa que cada ângulo possui no espalhamento (13), ou seja:

$$\sigma_m = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) (1 - \cos \theta) \sin \theta \, d\theta \quad (2)$$

A função peso, $(1 - \cos \theta)$ pode ser deduzida da variação da velocidade do portador depois de sofrer a colisão:

$$\frac{\delta v}{v} = \frac{v - v \cos \theta}{v} = 1 - \cos \theta \quad (3)$$

O espalhamento pode ser considerado como uma perturbação da função de onda dos elétrons por um potencial $V(\vec{r})$ que induz uma transição entre um e outro dos estados permitidos aos elétrons pela estrutura do cristal. Uma análise quântica, através da teoria de perturbação, fornece para a probabilidade de transição do estado \vec{k} para o estado \vec{k}' por unidade de tempo (regra de Ouro nº 2 de Fermi⁽¹⁴⁾):

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{h} |H_{\vec{k}, \vec{k}'}|^2 \delta(\epsilon(k) - \epsilon(k')) \quad (4)$$

onde $H_{\vec{k}, \vec{k}'}$ é o elemento de matriz do potencial espalhador entre os estados \vec{k} e \vec{k}' e a função delta de Dirac dá conta da conservação de energia. Da equação (1) em conjunto com a equação (4) e colocando $\vec{v}^2 = \frac{h^2 \vec{k}^2}{2m^*} = \epsilon$, pode-se calcular⁽¹⁴⁾ a secção diferencial de colisão

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{m^*}{2\pi h^2}\right) |H_{kk'}|^2$$

portanto, conhecendo-se $H_{kk'}$, pode-se calcular a secção total de colisão (equação 2) e o tempo de relaxação para o processo de espalhamento em questão.

2) Espalhamento por Impurezas Ionizadas

Impurezas químicas entram acidental ou intencionalmen

te no cristal durante o processo de crescimento ou, numa fase posterior, através de difusão. Estes átomos de natureza química estranha aos constituintes do cristal, embora possam ocupar posições normais da rede, atuam diferentemente sobre os elétrons. Seus níveis eletrônicos de energia podem se situar dentro da faixa de energia proibida aos elétrons do cristal puro. Se estes níveis estão próximos aos extremos das bandas (da de valência ou da de condução) os átomos de impurezas são mais facilmente ionizáveis que os átomos normais do cristal, pois os seus elétrons (ou buracos) são mais facilmente promovidos à banda de condução (ou de valência). Assim, neste caso, é provável que em temperaturas intermediárias ($0 < kT < \epsilon_G$), um grande número de átomos de impurezas esteja ionizado.

O íon de impureza gera um potencial coulombiano diferente do que existe nas outras partes do cristal, agindo, portanto, como uma perturbação do potencial periódico. A existência de portadores livres no cristal faz com que este potencial coulombiano seja blindado por este excesso de carga móvel que tenderá a se concentrar nas suas proximidades. Assim, o potencial gerado por um íon de impureza pode ser escrito como⁽¹⁵⁾:

$$V(r) = \pm \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \exp\left(-\frac{r}{L_D}\right) \quad (6)$$

O comprimento de blindagem L_D , pode⁽¹⁶⁾ ser aproximado sem perda de precisão pelo comprimento de Debye, dado por⁽¹⁷⁾:

$$L_D = \left(\frac{k_B T \epsilon_0 \epsilon}{e^2 n}\right)^{1/2} \quad (7)$$

O elemento de matriz do potencial do íon de impureza

entre dois estados eletrônicos \bar{e} :

$$H_{kk'} = - \frac{Ze^2}{\epsilon_0 \epsilon} \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2 + L_D^{-2}} \quad (8)$$

A grande diferença de massa entre o íon, permite su por que o espalhamento seja elástico, isto \bar{e} , que o môdulo do momento do elétron não se altere, assim, $k' = k$, e

$$H_{kk'} = - \frac{Ze^2}{\epsilon_0 \epsilon k^2} \frac{1}{\text{sen}^2(\frac{\theta}{2}) + (2kL_D)^{-2}} \quad (9)$$

Este resultado, colocado nas fórmulas apresentadas na seção anterior, fornece para o tempo de relaxação do momento:

$$\tau_m = \frac{16 (2m^*)^{1/2}}{N_i} \left(\frac{\epsilon_0 \epsilon}{Ze^2}\right)^2 \frac{\epsilon^{3/2}}{\ln(1+b) - \frac{b}{b+1}} \quad (10)$$

onde $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ é a energia cinética do elétron, N_i é a densidade de impurezas ionizadas, e

$$b = (2kL_D)^2 \quad (11)$$

Brooks⁽¹⁸⁾ sugere que a média do tempo de relaxação sobre os valores possíveis da energia seja extraída substituindo-se o valor de b pelo valor que permite que o fator

$$\ln(b+1) - \frac{b}{b+1} \quad (12)$$

atinga o seu valor máximo. Isto se cumpre colocando-se a energia como

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = 3k_B T$$

Assim, de (11) e (12),

$$b = 24 \frac{k_B}{\hbar^2} m^* L_D T \quad (13)$$

Portanto, o tempo de relaxação pode ser posto na forma

$$\tau = \tau_0(T) \epsilon^{3/2} \quad (14)$$

Utilizando a relação (32) do capítulo II, para ϵ^p com $p = 3/2$, temos:

$$\langle \tau \rangle = \tau_0(T) \frac{\Gamma(\frac{5}{2} + \frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{5}{2})} = \frac{8}{\pi^{1/2}} \tau_0(T) \quad (15)$$

de modo que a mobilidade $\mu = \frac{e}{m^*} \langle \tau \rangle$, permitida aos elétrons pelo espalhamento por íons de impureza $\bar{\epsilon}$:

$$\mu_{\text{II}} = \frac{2^{7/2} (4\pi\epsilon_0\epsilon) (k_B T)^{3/2}}{\pi^{3/2} Z^2 e^3 m^{*1/2} N_I [\ln(b+1) - \frac{b}{b+1}]} \quad (16)$$

Com os valores das constantes universais incluídos e fazendo $Z = 1$, isto $\bar{\epsilon}$, considerando as impurezas como simplesmente ionizáveis, temos:

$$\mu_{\text{II}} = 3,29 \times 10^{15} \frac{\epsilon^2}{(\frac{m^*}{m_0})^{1/2} N_I} \frac{T^{3/2}}{\ln(b+1) - \frac{b}{b+1}} \left(\frac{\text{cm}^2}{\text{v.s}} \right) \quad (18)$$

com

$$b = \frac{1,29 \times 10^{14} (\frac{m^*}{m_0}) \epsilon T^2}{n(\text{cm}^{-3})} \quad (19)$$

Deve-se notar que a densidade de portadores que se re

fere a equação (19) é a densidade nas proximidades dos ions de impurezas, a qual pode ser diferente da do resto do cristal. Porém, quando se pode desprezar a densidade de portadores minoritários, e a temperatura é tal que todas as impurezas estão ionizadas sem haver ainda a presença de portadores intrínsecos, a densidade de portadores em todos os pontos do cristal é praticamente constante.

3) Espalhamento por Fonons Ópticos Polares

Um aumento na temperatura de um cristal, resulta no aumento de sua energia interna. Parte desta energia é absorvida pelos átomos que a utilizam para vibrar em torno de suas posições de equilíbrio. Devido às fortes interações existentes entre um átomo e seus vizinhos na rede, a vibração de um deles é transmitida aos outros e a rede toda, ou parte dela, vibra de modo ordenado. A teoria quântica demonstra que as energias correspondentes a estas vibrações pode ser quantizadas, e que elas podem ser tratadas como partículas, no sentido que este termo possui em mecânica quântica. A estas partículas chamamos fonons.

Nos materiais compostos onde as ligações são total ou parcialmente iônicas, existem dois modos principais de vibração, chamados respectivamente de fonons ópticos e fonons acústicos. Se a ligação química em uma célula primitiva é polar, os fonons ópticos são chamados de polares.

A teoria de Bloch para a resolução das funções de onda dos elétrons no cristal, utiliza o potencial da rede considerando os íons fixos em suas posições. Segundo este ponto de vista, as vibrações térmicas do cristal, são obviamente perturbações que interferem no movimento dos portadores de carga. Esta interferência é analisada pelo modelo de espalhamento de portadores de carga por fonons ópticos polares, que esboçaremos a seguir.

O elemento de matriz que descreve a interação entre os portadores de corrente e os fonons ópticos polares, conforme calculado por Frölich e Mott⁽¹⁹⁾ e reformulado por Ehrenreich⁽²⁰⁾, é composto por dois termos devido ao fato de que o número de fo-

nons pode variar, pois um elétron pode absorver a energia de um fonon, portanto aniquilando-o, ou ceder parte da sua energia para a criação de um outro. O elemento da matriz de interação quando o resultado da interação é a criação de um fonon é:

$$H_{k,k+q} = \frac{ee^*}{v\epsilon_0} \left(\frac{h}{2MN\omega} \right)^{1/2} \vec{\sigma}_q \cdot \vec{q} (n_q + 1)^{1/2}$$

e quando ocorre a destruição de um fonon é:

$$H_{k+k-q} = \frac{ee^*}{v\epsilon_0} \left(\frac{h}{2MN\omega} \right)^{1/2} \vec{\sigma}_q \cdot \vec{q} (n_q)^{1/2}$$

Nas expressões acima

- \underline{N} e \underline{v} são respectivamente o número e o volume de cada célula unitária do cristal.
- N_q é a população de fonons no estado cujo momento é $h\vec{q}$ que corresponde a uma energia $h\omega$ e cujo vetor unitário de polarização é $\vec{\sigma}_q$.
- \underline{M} é a massa reduzida dos íons de cada célula unitária.
- e^* é a carga efetiva dos íons e é dada⁽²¹⁾ por:

$$e^* = \left[Mv\epsilon_0\omega^2 \left(\frac{\epsilon_s - \epsilon_d}{\epsilon_s \epsilon_d} \right) \right]^{1/2}$$

onde ϵ_s e ϵ_d são respectivamente as constantes dielétricas estática e de alta frequência.

A energia dos fonons ópticos é da mesma ordem de grandeza da energia cinética dos portadores de carga, o que faz com que o espalhamento seja fortemente inelástico, o que impossibilita⁽²²⁾ a definição de um tempo de relaxação. Esta dificuldade pode ser contornada por uma mudança de variáveis⁽²³⁾ que pro

duz para a mobilidade limitada por fonons ópticos polares, calculada segundo o procedimento esquematizado no início do capítulo, a expressão:

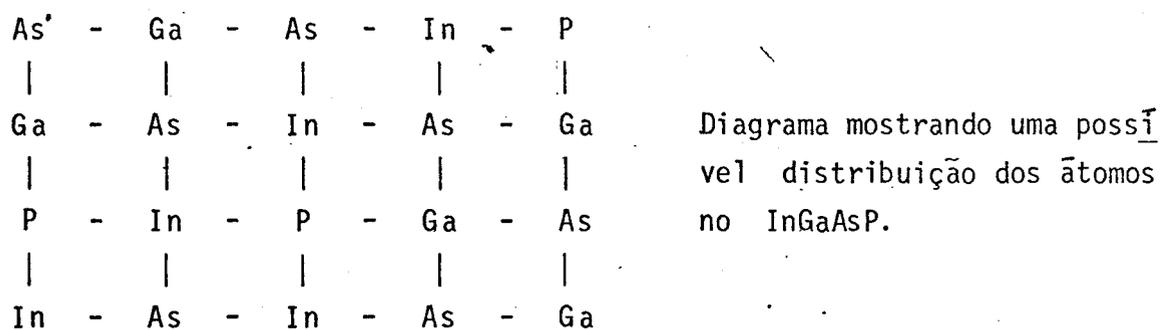
$$\mu_{po} = \frac{16h\epsilon_o(2\pi k_B T)^{1/2}}{(3em^*\omega)^{3/2}} \frac{\epsilon_s \epsilon_d}{\epsilon_s - \epsilon_d} [\exp(\frac{h\omega}{k_B T}) - 1] G(\frac{h\omega}{k_B T})$$

A função $G(\frac{h\omega}{k_B T})$ que aparece devido à mudança de variáveis referida, foi resolvida numericamente e tabelada por Fortini⁽²⁴⁾.

4) Espalhamento por Desordem no Potencial da Rede

4.1) Introdução

Numa liga cristalina quaternária é impossível determinar com exatidão quais são os vizinhos de um determinado átomo. No caso do composto InGaAsP, isto pode ser visto na figura abaixo:



Deste modo torna-se evidente que o potencial não tem simetria translacional e que possui uma componente aleatória. A rigor, a função de onda de Bloch dos elétrons não poderia ser definida em tal arranjo, porém, a introdução de um artifício, a aproximação do cristal virtual, resolve satisfatoriamente este problema, introduzindo como ônus um novo tipo de espalhamento.

4.2) O Potencial Virtual

Suponhamos um cristal cujas células unitárias possam ser ocupadas por átomos ou moléculas de dois tipos A e B; suponhamos ainda que as concentrações relativas destes sejam C_A e C_B respectivamente. Se para cada tipo de ocupação o potencial da célula é V_A ou V_B , o potencial total do cristal será⁽²⁵⁾:

$$V(\vec{r}) = \sum_A V_A(\vec{r}-\vec{y}) + \sum_B V_B(\vec{r}-\vec{y}) \quad (1)$$

onde \vec{y} é qualquer vetor da rede de Bravais.

O potencial do cristal pode ser separado em duas partes:

$$V_1(\vec{r}) = \sum_{\vec{y}} [V_A(\vec{r}-\vec{y}) + V_B(\vec{r}-\vec{y})] \quad (2)$$

e

$$V_2(\vec{r}) = \sum_{\vec{y}} C_{\vec{y}} (V_A(\vec{r}-\vec{y}) - V_B(\vec{r}-\vec{y})) \quad (3)$$

onde $C_{\vec{y}}$ é uma função introduzida por Flinn⁽²⁾ definida apenas nos pontos da rede

$$C_{\vec{y}} = \begin{cases} C_B & \text{para um grupo A em } \vec{y} \\ -C_A & \text{para um grupo B em } \vec{y} \end{cases} \quad (4)$$

e tem as seguintes propriedades

$$\sum_{\vec{y}} C_{\vec{y}} = 0 \quad , \quad \sum_{\vec{y}} C_{\vec{y}} C_{\vec{y}+\vec{y}'} = NC_A C_B$$

O potencial V_1 é o período e define o potencial de Bloch para o cristal. O potencial V_2 é o responsável pelo espalhamento.

4.3) O Limite de Mobilidade por Desordem

Mott⁽²⁷⁾ considerando os efeitos de substituições em ligas diluídas, mostrou que a mudança no potencial que o elétron sente ao mudar de posição no cristal pode ser expressa por:

$$\Delta U = V_2 = \begin{cases} E_0 - E'_0 (r < r_0) \\ 0 (r > r_0) \end{cases}$$

sendo que r , o alcance do potencial, será definido posteriormente.

O elemento de matriz do espalhamento gerado por este potencial \bar{e} , usando a aproximação de Born (ondas planas):

$$H_{kk'} = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\Delta\vec{k}\cdot\vec{r}) \Delta U d\vec{r} \quad \begin{aligned} \Delta\vec{k} &= \vec{k} - \vec{k}' \\ d\vec{r} &= r^2 dr \sin\theta d\theta d\psi \end{aligned}$$

Usando da simetria azimutal e colocando θ como o ângulo entre $\Delta\vec{k}$ e \vec{k}' , a integral se resolve:

$$H_{kk'} = 4\pi \frac{\Delta E}{\Delta k^3} \left[(\text{sen}(\Delta k r_0) - \Delta k r_0 \cos(\Delta k r_0)) \right]$$

Expandindo em série:

$$H_{kk'} = 4\pi \Delta E r_0^3 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{30} k^2 r_0^2 + \dots \right)$$

O segundo termo entre parentesis é pequeno o suficiente para ser desprezado sem problemas. A escolha do valor de r_0 é algo arbitrário; aqui adotaremos⁽²¹⁾ a distância entre primeiros vizinhos numa configuração tetraédrica, $r_0 = \frac{1}{4} \sqrt{3}a$. Assim o quadrado do elemento de matriz \bar{e}

$$|H_{kk'}|^2 = \frac{9\pi^2}{(16)^2} (\Delta E)^2 a^6 ,$$

Seguindo o procedimento da secção 4.1, o tempo de relaxação é dado por:

$$\tau_D = \frac{8\sqrt{2} h^4 N \epsilon^{-1/2}}{3 C_A (1-C_A) (\Delta E)^2 m^{*3/2} (kT)^{1/2}}$$

onde N é o número de centros espalhadores por unidade de volume. Na estrutura dos compostos III - V este número é 4 por célula unitária, Assim

$$\tau_D = \frac{32\sqrt{2}}{3} \frac{h^4 \epsilon^{-1/2}}{C_B (1-C_A) (\Delta E)^2 m^{*3/2} (kT)^{1/2} \Omega} , \quad \Omega \text{ é o volume da célula unitária}$$

Utilizando a relação (32) do capítulo II, com $p = -1/2$,

temos:

$$\langle \tau_D \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \tau_D$$

e portanto :

$$\mu_D = \frac{128\sqrt{2}}{9(\pi)^{3/2}} \frac{h^4 \epsilon^{-1/2}}{(k_B)^{1/2} m^{*3/2} C_A (1-C_A) (\Delta E)^2 \Omega}$$

Para compostos quaternários, incorporando o fator das concentrações no potencial, e introduzindo o valor das constantes, temos, em unidades práticas

$$\mu_D = 9,511 \times 10^2 \frac{(T(K))^{-1/2}}{\left(\frac{m^*}{m_0}\right)^{5/2} (a(\text{Å}))^3 (\Delta v(\text{eV}))^2} \left(\frac{\text{cm}^2}{\text{v.s}}\right)$$

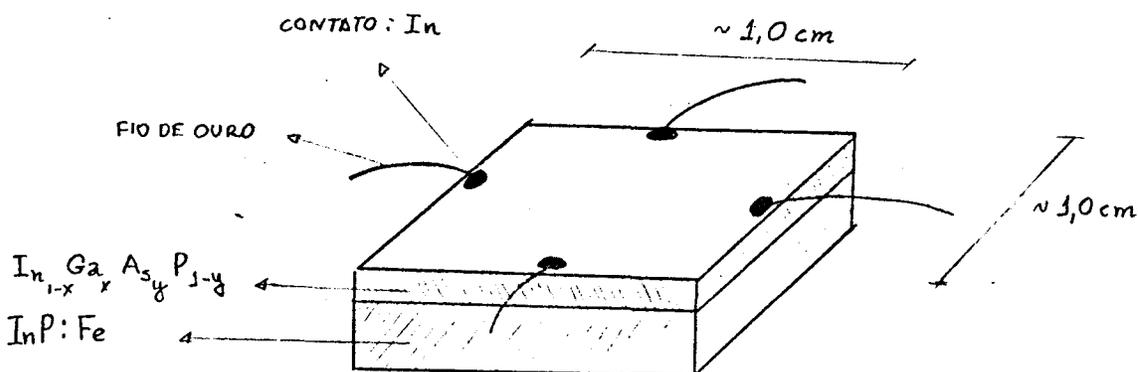
CAPÍTULO IV

PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

1) As Amostras - Os Contatos

As amostras estudadas são camadas de liga quaternária $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ crescidas por epitaxia de fase líquida sobre substratos de fosfeto de índio dopado com ferro para tornar-se semi-isolante. A espessura das camadas varia de $0,5 \mu\text{m}$ a $2,0 \mu\text{m}$; o seu formato é retangular, sendo que o comprimento (próximo a 1 cm) é 50% maior que a largura.

Os contatos são feitos por um recozimento a 400°C de pedaços pequenos de índio sobre a superfície das amostras. Desta forma obtem-se contatos ôhmicos de pequena área e de forma semi-esférica. Os contatos se localizam no meio de cada amostra e muito próximos à sua borda. Busca-se uma configuração ortogonal para as linhas que unem contatos de lados opostos, mas não se obriga que isto aconteça, pois, embora a ortogonalidade facilite as medições, não tem influência sobre os resultados⁽²⁸⁾. Os contatos ocupam cerca de 1% da superfície da amostra, de modo que a sua influência sobre o processo de condução na amostra é pequeno. Aos contatos são soldados fios de ouro de $0,5 \text{ mm}$ de espessura, para que se estabeleça a ligação com os aparelhos de medição.



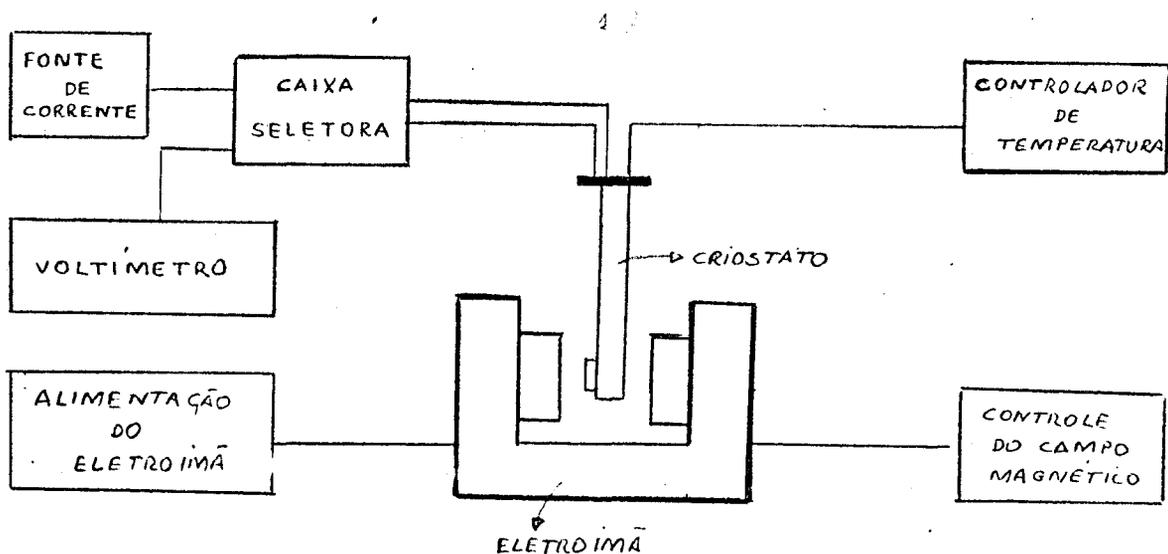
2) Arranjo Experimental - Os Equipamentos

Para a medida da resistividade no método de van der Pauw⁽²⁸⁾, faz-se fluir corrente entre dois contatos próximos e mede-se a tensão resultante entre os dois outros contatos. A fim de se diminuir os erros causados por pequenas inomogeneidades da camada e por não perfeita ohmicidade nos contatos, reverte-se a orientação da corrente e reveza-se os contatos por onde ela flui, obtendo-se uma média das resistividades das várias partes da amostra.

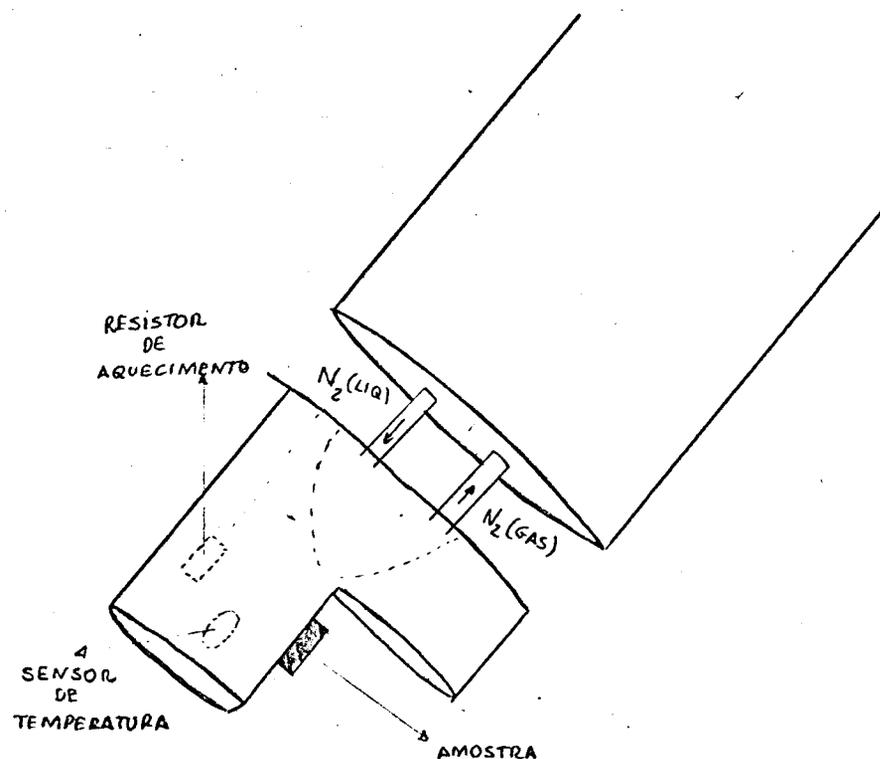
A medida da constante de Hall exige que a corrente passe por dois contatos opostos (preferivelmente, no sentido do comprimento da amostra) e a tensão seja medida entre os dois restantes, na presença de um campo magnético perpendicular à superfície da camada. Para evitar erros com a tensão residual, resultante do fato de os dois contatos onde se mede a tensão de Hall não estarem sobre a mesma equipotencial, aplica-se o campo magnético nos dois sentidos, e extrai-se a média dos resultados.

O equipamento necessário para se efetuar a medição de ambas as grandezas, deve contar com: a) uma fonte de corrente com possibilidade de reversão de polarização; b) um voltímetro de alta sensibilidade; e c) uma fonte de campo magnético com possibilidade de reversão de sentido. Para medidas em função da temperatura, a amostra tem que ser colocada em um criostato com sistema controlador de temperatura. O revezamento da corrente pelos vários contatos é feito por uma caixa seletora.

O arranjo experimental utilizado é o da figura.



A fonte de corrente utilizada fornece (Keithley, Modelo 225) correntes entre 1×10^{-9} A. e 10^{-2} A com precisão de $\pm 0,1\%$ e com alta estabilidade. As tensões, da ordem de dezenas de milivolts, foram medidas por um nanovoltímetro digital (Keithley, Modelo 180) com precisão de 0,1 na região de trabalho. O campo magnético gerado por um eletroímã (Varian) com possibilidade de atingir 10 KG, calibrado pelo fabricante para um incerteza de 50 G; adotou-se um sistema extra de calibração utilizando uma sonda de efeito Hall



conferida em dois outros eletroímãs do Instituto.

O sistema de controle de temperatura (Air Liquide , Modelo RD 4300) permite, segundo o fabricante, uma precisão de 0,5 K; utiliza como sensor um diodo de GaAs; trabalha entre 77 K e 300 K.

Os erros originados dos equipamentos de medição podem ser analisados pelas expressões das grandezas medidas:

$$R_H = \text{const.} \frac{v}{iB} d \quad \text{e} \quad \rho = \text{const.} \frac{v}{i} d,$$

assim o erro total percentual nas medidas originadas por incertezas dos aparelhos de medição $\bar{\epsilon}$, para a constante de Hall:

$$\frac{\Delta R_H}{R_H} = \frac{\Delta v}{v} + \frac{\Delta i}{i} + \frac{\Delta B}{B} + \frac{\Delta d}{d}$$

e, para a resistividade

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = \frac{\Delta v}{v} + \frac{\Delta i}{i} + \frac{\Delta d}{d}$$

ou seja:

$$\frac{\Delta R_H}{R_H} \approx 2,0\% + \frac{\Delta d}{d}$$

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = 0,2\% + \frac{\Delta d}{d}$$

A espessura $\bar{\epsilon}$ é medida em microscópio através da revelação fotográfica da junção, o erro máximo cometido é 10%. Desta forma o erro experimental na determinação da constante de Hall (12%) é da resistividade (10,2%) é praticamente todo originado pela imprecisão na medida da espessura da camada.

A variação da mobilidade é feita através de medidas independentes de R_H e de ρ

$$\mu_H = \frac{R_H}{\rho}$$

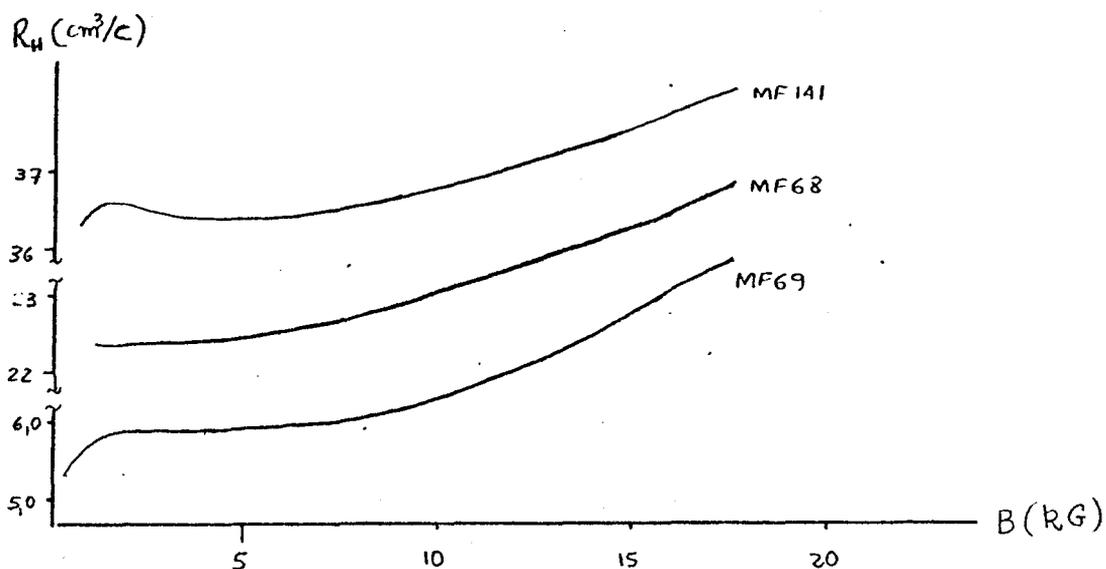
de modo que o erro referente à medida da espessura não causa imprecisão no seu valor. Assim a imprecisão experimental na medida da mobilidade, causada pelos aparelhos de medição é de 2,2%.

3) Fontes de Erro Experimental

A análise feita acima, permitiria calcular a incerteza na avaliação da constante de Hall, na resistividade, e conseqüentemente, na mobilidade de uma amostra, se o modelo utilizado para representar o transporte de carga fosse isento de falha. Fatores vários, que afastam a amostra real daquela que se poderia considerar a amostra ideal para medidas de transporte afetam o resultado final das medições. Os defeitos mais importantes, seus efeitos e os cuidados para reduzir-lhes a influência, quando possível, são:

a) Inomogeneidade - No caso específico das ligas semicondutoras, este problema é particularmente importante, pois se trata não apenas da possibilidade de uma distribuição não uniforme dos dopantes, como também da possibilidade de flutuações locais da composição do material. Inomogeneidades importantes podem ser notadas por um levantamento da constante de Hall em função do ângulo entre o campo magnético e a direção da corrente elétrica. Se a amostra é homogênea a curva obtida é simétrica em torno de 90° (29). As amostras aqui estudadas são aparentemente homogêneas sob este ponto de vista. Um teste mais fino se refere à uma va

riação da constante de Hall com o campo magnético⁽³⁰⁾ causada por inhomogeneidades. Nossas amostras apresentam tal variação, como se vê na figura; e embora não se possa atribuí-la totalmente



à inhomogeneidade, é de se presumir que esta exista pelo menos em pequena escala. A escolha da região de mínima variação ($B = 4$ KG) como ponto de trabalho, e o revezamento dos contatos que portam corrente, permitindo que se meça as grandezas referidas em várias regiões da amostra, reduz a dimensão dos erros cometidos devido à inhomogeneidade.

b) Posição e Área dos Contatos - Van der Pauw, na dedução do seu método⁽²⁸⁾, supõe que os contatos sejam pontuais e se localizam na borda da amostra; e calcula o erro cometido com a área finita dos contatos reais. Van Daal⁽³¹⁾ calculou os efeitos da posição e da área dos contatos e mostrou que o erro cometido é função de crescente da espessura da amostra; na sua configuração mais desfavorável (contatos ocupando 5% da superfície da amostra, e longe da borda) encontrou erros em torno de 20%. Um teste realizado em duas de nossas amostras, mostrou que para três conjuntos de contatos com áreas e posições diferentes — cada conjunto sendo

feito após a remoção do anterior - a diferença não é maior que 3,0%. Por outro lado a comparação das nossas condições padrões (contatos ocupando cerca de 1% da superfície da amostra e localizados a 1 mm da borda) com os gráficos obtidos por Van Daal, mostra que o erro se situa em 5%.

c) Participação do Substrato na Condução - Embora semi-isolante, o substrato pode absorver uma parte da corrente injetada na camada epitaxial, fazendo com que as grandezas medidas sofram influências de suas características. Bhattacharia e outros⁽³²⁾ mostraram para amostras semelhantes, que a redução da espessura do substrato não influi no valor medido da mobilidade, o que, sem ser prova conclusiva, permite supor que a evasão de corrente é pequena, se existir. Numa tentativa de mudar as condições da junção, duas amostras foram crescidas sob as mesmas condições, uma sobre o substrato semi-isolante usual, e outra sobre substrato tipo p, e não apresentaram variação significativa no valor da sua mobilidade (menos de 5%).

d) Região de Transição entre Substrato e Camada - A pequena espessura das camadas estudadas, acentua a importância da espessura da região de transição entre o substrato e a camada. Medidas feitas em amostras de várias espessuras (entre 1 e 7 μm)⁽³²⁾ não apresentam variação suficiente para que se possa dizer que há influência da junção. Há motivos para se crer⁽³³⁾ que a espessura desta região seja da ordem de 100 Å, representando 5% da espessura de nossa amostra mais fina, e portanto não devendo causar um erro na avaliação da mobilidade maior que este valor.

A incerteza na avaliação das grandezas de cada amostra, causadas por erro experimental são: 2,2% para a mobilidade, 10% para a resistividade e 12% para a constante de Hall. A discrepância entre o valor real da amostra, e o valor que se obte-

ria se não existissem as falhas de formulação citadas acima, embora difícil de ser avaliada, conforme vimos, pode ser estimada em cerca de 10%. Assim, temos dois tipos de imprecisão: a diferença entre o valor medido e o valor real (2,2% para a mobilidade) e a diferença entre o valor real e o valor ideal (estimada em 10%). Portanto podemos estimar em 12% a diferença entre o valor medido da mobilidade e o valor que esta teria em uma amostra perfeita (ideal) avaliada sem erro experimental.

4. Resultados Experimentais

Basicamente as medidas experimentais se resumem na determinação do comportamento da constante de Hall e da resistividade, em função da temperatura, entre 77 K e 300 K. Foram feitas medidas da magnetoristância e do comportamento da constante de Hall em função do campo magnético (até 20 kG), mas seus resultados só serão utilizados como elementos subsidiários da análise. A mobilidade de Hall em função da temperatura é derivada das medições efetuadas. ($\mu_H = R_H/\rho$).

4.1) Comportamento de R_H em Função da Temperatura

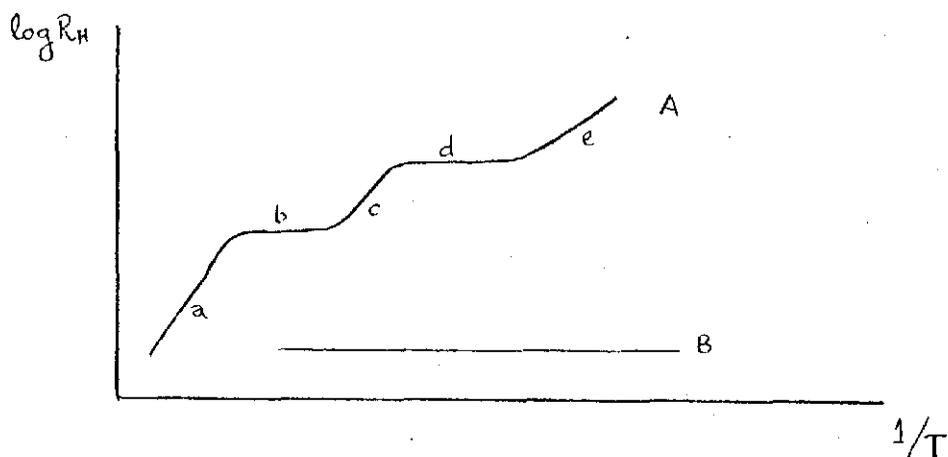
A constante de Hall, sendo proporcional ao inverso da concentração de portadores, pode ser equacionada, na sua dependência da temperatura, aproximadamente por:

$$R_H(T) \propto Ce^{-\left(\frac{g\epsilon}{kT}\right)}$$

onde C é constante; ϵ é a energia dos níveis que fornecem os portadores, em relação ao extremo da banda e, g é uma constante

que depende da existência ou não de compensação da amostra.

O aspecto típico da curva de $\log R_H \times \frac{1}{T}$, como da do na figura abaixo pode ser dividido em regiões que refletem vários regimes de transporte pelos quais o semiconductor passa quando se altera a temperatura a que está submetido.



No regime de altas temperaturas (kT comparável à energia do "gap"), o número de portadores aumenta rapidamente com o aumento da temperatura. Isto se deve ao crescente número de elétrons da banda de valência que conseguem atingir a banda de condução absorvendo energia térmica da rede. A densidade de portadores aumentando, R_H diminui, e este regime corresponde à região (a) da figura, que é o regime intrínseco de transporte.

Num semiconductor tipo n, em dada temperatura todas as impurezas doadoras já perderam seus elétrons para a banda de condução, e portanto um acréscimo de temperatura não consegue aumentar o número de portadores, se as transições intrínsecas ainda não são significativas. O resultado é um patamar, como o da região (b) da figura, com o valor da constante de Hall permanecendo praticamente constante. Este é o regime de exaustão

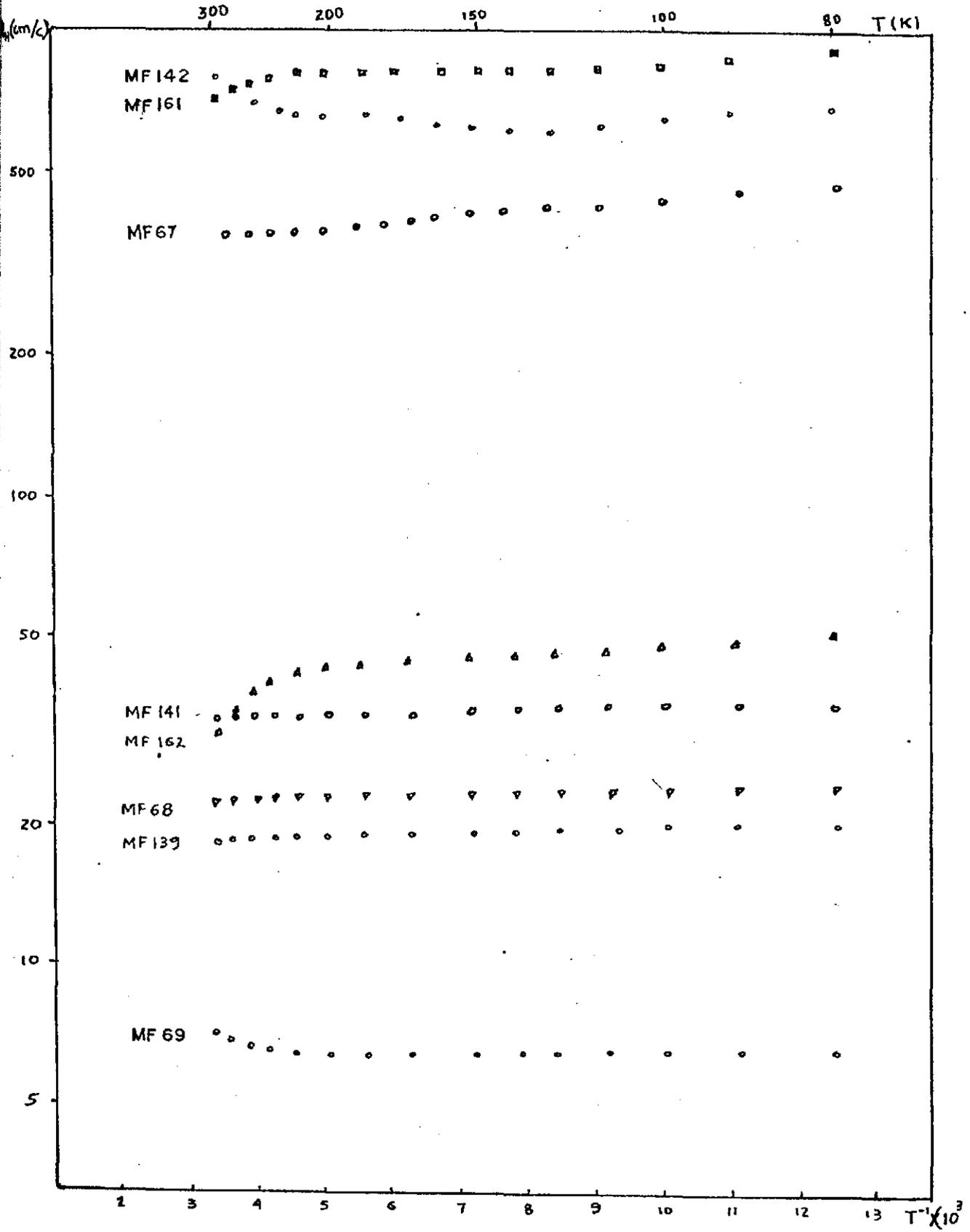
das impurezas. Baixando-se mais a temperatura, os elétrons da banda de condução começam a retornar aos seus níveis originais, associados às impurezas doadoras, conseqüentemente a constante de Hall aumenta. Este é o regime de condição extrínseca.

Nas temperaturas mais baixas, quando praticamente todos os elétrons abandonaram a banda de condução, se a densidade de impurezas é suficiente, os elétrons podem saltar entre os íons restantes (resultado da compensação) estabelecendo o regime de condução por impurezas.

A curva B da figura representa o comportamento típico da constante de Hall, para um semiconductor degenerado, o qual mantém quase inalterada a densidade de portadores em todo o intervalo de temperatura que exclua a região intrínseca. Um semiconductor tipo n é degenerado quando possui níveis doadores de energia muito próximos à banda de condução.

Os resultados obtidos para nossas amostras, resumidos na figura 1, mostram que suas densidades de portadores se mantem praticamente constantes na temperatura, sendo que nas temperaturas próximas à ambiente, já se começa a notar a presença dos portadores intrínsecos. A constância de R_H em função da temperatura pode ser explicada por uma degenerescência ou pelo regime de exaustão de impurezas. A existência de magnetoresistência, como se vê na figura 2, prova⁽¹¹⁾ que as amostras não são totalmente degeneradas, restando, portanto, a hipótese do regime de exaustão de impurezas, que embora não possa ser comprovada, tem aceitação unânime na literatura. Se o semiconductor se encontra no regime de exaustão de impurezas, pode-se dizer, que a densidade de portadores é aproximadamente igual à diferença entre as densidades de impurezas doadoras

FIGURA 1



e as aceitadoras, isto é:

$$n = N_D - N_A$$

e que todos os átomos de impurezas estão ionizados, portanto a densidade de impurezas ionizadas é

$$N_i = N_A + N_D$$

A análise do comportamento de resistividade com a temperatura conduz a resultados semelhantes aos da análise da constante de Hall.

Os resultados obtidos estão sintetizados na figura 3.

A curva da mobilidade em função da temperatura, pode e tem sido usada nos materiais mais simples (Si, Ge, AsGa) para determinação da densidade de impurezas ionizadas, dado que associado aos obtidos pela análise do comportamento da constante de Hall, fornece as densidades de impurezas doadores e aceitadores.

No caso de ligas, a presença de espalhamento por desordem, complica a análise, introduzindo uma outra variável desconhecida: o potencial de espalhamento. A proposta deste trabalho é mostrar que dentro de aproximações razoáveis, a análise pode resultar no conhecimento das grandezas: N_a , N_d e ΔU .

O gráfico da figura 4 mostra o comportamento da mobilidade de amostras de In Ga As P com vários graus de dopagens. A tendência geral é a mobilidade se apresentar praticamente constante entre 80 e 110 K, ponto onde apresenta-se máxima e a partir daí, decrescer rapidamente até a temperatura ambiente.

Na região de temperatura mais baixa (80 - 100 K) a influência principal é das impurezas ionizadas. Nas temperaturas próximas à ambiente, a curva segue principalmente a curva que teria se somente o espalhamento por fônons ópticos polares atuasse. O espalhamento por desordem atenua a curva em todas as regiões de temperatura e torna mais suave a transição nas regiões de influência das duas outras fontes de espalhamento.

CAPÍTULO V

MÉTODO DE ANÁLISE DA MOBILIDADE

1) Cálculo da Mobilidade

Vários processos de espalhamento atuam em um mesmo material e, embora as suas intensidades relativas se alterem com a variação da temperatura, cada um deles influencia o transporte de carga em toda a gama de temperaturas.

Quando a fonte de espalhamento é localizada, como no caso de defeitos ou de desordem, cada colisão é razoavelmente elástica e cada processo é independente dos demais. A mobilidade permitida para os elétrons na presença simultânea destes processos elásticos e independentes, pode ser calculada por

$$\mu_T^{-1} = \sum_i (\mu_i^{-1}) \quad (1)$$

onde μ_i seria a mobilidade se apenas o processo "i" de espalhamento atuasse. Esta expressão diz simplesmente que a probabilidade de que um elétron sofra uma colisão (a qual é inversamente proporcional à mobilidade) é igual à soma das probabilidades de que ele sofra colisões com cada tipo de alvo.

A transferência de energia do elétron para íon fixo na rede, durante uma colisão, é certamente pequena devido à grande diferença entre as massas, e um espalhamento que se baseia neste tipo de colisões pode ser considerado elástico; tal é o caso do espalhamento por desordem e o por impurezas ionizadas. No caso de espalhamentos baseados em colisões entre partículas; elétrons e fônons, por exemplo, pode haver grandes trans

ferências de energia, pois há a possibilidade de alteração no número de fônons. Deste modo o espalhamento por fônons ópticos não poderia ser incluído na expressão dada acima. No entanto, este processo de espalhamento só é efetivo nas temperaturas mais altas. Considerando ainda que a presença de impurezas se faz em concentrações razoáveis, e que a eficiência do espalhamento por desordem é alta em qualquer temperatura, o papel desempenhado pelos fônons como limitadores da mobilidade é pequeno. A sua inclusão dentro da regra de soma exposta, portanto, introduz uma inconsistência muito pequena na maior parte das temperaturas de trabalho.

Neste trabalho, por motivos considerados abaixo, admitiremos que apenas três processos atuam no espalhamento dos portadores:

- a) Espalhamento por impurezas ionizadas,
- b) Espalhamento por fônons ópticos,
- c) Espalhamento por desordem no potencial da rede.

Admitiremos também, pelos motivos expostos acima, que os três processos considerados podem ser inclusos na expressão (1).

Assim, a mobilidade dos elétrons é:

$$1/\mu = 1/\mu_{II} + 1/\mu_{po} + 1/\mu_D$$

Os fônons acústicos do cristal, geram espalhamento de elétrons por deformação do potencial da rede, e um espalhamento piezoelétrico, que se deve aos campos elétricos originados pelo abandono dos íons de suas posições de equilíbrio. Um cálculo, utilizando as expressões existentes na literatura⁽³⁴⁾ para o espalhamento devido aos dois processos, e utilizando os valores calculados por Pearssal⁽³⁵⁾ para as diversas grandezas envolvidas, mostra que o efeito conjunto dos

dois, tem efeito sempre menor que 1% sobre a mobilidade, qualquer que seja a temperatura.

Como apontado por Adams e outros⁽³⁶⁾, o aparecimento de distribuições anormais de cargas, em razão de fronteiras ou ao redor de imperfeições, pode originar um novo processo de espalhamento; o por cargas espaciais. A mobilidade limitada por este processo tem mesma dependência na temperatura ($-1/2$) que o espalhamento por desordem, de modo que o efeito de ambos poderia ser confundido. No entanto a dependência na massa efetiva dos dois é suficientemente diferente para que um estudo da mobilidade em função da pressão⁽³⁶⁾ a que se submete a amostra diferencie os seus efeitos. Estudos feitos neste sentido por vários pesquisadores^(35, 36), mostram que o espalhamento por desordem é predominante sobre o por cargas espaciais, de modo que a influência deste na mobilidade total é pequena. Deste modo, desprezar os mecanismos que certamente atuam no material, à exceção dos três considerados, não introduz um erro superior a 1% na avaliação global da mobilidade. A avaliação do potencial de espalhamento por desordem, porém, pode ser superestimada pela não inclusão do espalhamento por cargas espaciais. Não existe uma análise sobre a dimensão deste superestimação, porém, a julgar-se pelos resultados dos trabalhos citados, ela deve ser pequena.

Um argumento empírico extra em favor da validade da regra de soma dos inversos das mobilidades parciais, é dada por Marsh e outros⁽³⁷⁾. Estes pesquisadores calcularam a mobilidade para o mesmo material em que trabalhamos, usando esta técnica, bem como um método numérico computacional mais sofisticados e encontraram resultados em grande concordância para os dois cálculos.

2) Métodos de Análise

As grandezas do material que estão envolvidas no cálculo da taxa de espalhamento dos elétrons causado por \bar{f}_0 nos ópticos polares, são conhecidas, experimentalmente, com exceção da temperatura de Debye (Θ) dos fônons. Esta, porém pode ser interpolada a partir do método exposto anteriormente, e não há motivos para se duvidar seriamente do seu valor. Assim, a mobilidade limitada por fônons ópticos polares pode ser determinada sem problemas.

A mobilidade limitada por íons de impurezas, conforme expressão desenvolvida na seção III.2, depende, entre outros fatores, da densidade de impurezas aceitadoras. Esta quantidade, que para certos materiais pode ser deduzida do comportamento da constante de Hall a baixa temperatura⁽⁸⁾, não é conhecida com precisão no nosso material. O motivo é que acredita-se⁽³⁸⁾ que o nível doador seja muito próximo do fundo da banda de condução, de modo que a diminuição da temperatura não altera o comportamento da constante de Hall de maneira suficiente para que sua análise propicie resultados confiáveis. A mobilidade limitada por íons de impurezas é deixada então como função da densidade de impurezas aceitadoras.

$$\mu_{II} = f(N_2)$$

No espalhamento por desordem, o potencial de espalhamento é desconhecido. Existem três teorias⁽³⁹⁾, que serão comentadas mais adiante, que conduzem a resultados diferentes. No momento não há qualquer indicação, teórica ou experimental, que permita decidir claramente, qual a mais apropriada entre elas. Os outros parâmetros envolvidos são conhecidos e portanto, a

mobilidade limitada por desordem pode ser colocada como função do potencial do espalhamento.

$$\mu_D = f(\Delta U)$$

A regra de soma dos inversos então se torna:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_{po}} + \frac{1}{f(N_2)} + \frac{1}{f(\Delta U)}$$

Admitindo que $r_H = 1$, isto é, que a mobilidade pode ser substituída por μ_H , pode-se tirar para cada temperatura uma relação entre a densidade de impurezas aceitadoras e o potencial de espalhamento por desordem, na forma:

$$\Delta U = f_i(N_a) \quad \text{para } T = T_i$$

Se houver consistência dos dados experimentais com os modelos de espalhamento utilizados, o conjunto de curvas obtidas variando-se a temperatura, deve convergir para um único ponto, que permite definir os valores de N_i e de ΔU .

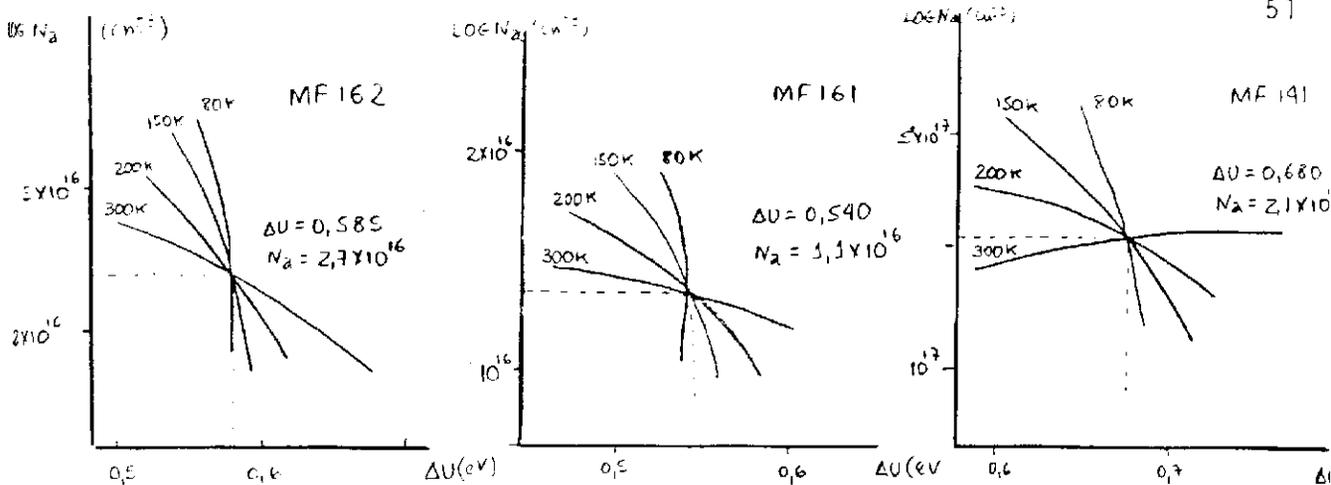
A expressão completa que se obtém é:

$$\Delta U = \left[C_1 T^{-1/2} - C_2 \frac{(2N_A + n)}{T^2} \right]^{1/2} \quad T = T_i$$

onde:

C_1 e C_2 são constantes

É fácil mostrar que a solução de convergência existe e é única, e isto pode ser visto pela figura abaixo onde se traça curvas obtidas para várias temperaturas, dentro dos valores aceitáveis para ΔU e N_a .



Devido aos prováveis erros experimentais e às aproximações da análise, existe uma certa dispersão do ponto de convergência das várias curvas. Porém, esta é pequena e se enquadra dentro da precisão estimada nas outras partes deste trabalho.

3) Resultados da Análise

A análise descrita acima foi feita num conjunto de amostras cuja densidade de portadores varia de $7,7 \times 10^{15}$ a $3,3 \times 10^{17}$ cm⁻³; as mobilidades à temperatura ambiente de 1800 a 2890 cm²/v.s. As características das amostras selecionadas para análise se encontram na tabela 1.

Tabela 1 - Características das Amostras

Amostra	Composição		$n(= \frac{1}{eR_H})$	$\rho(300 \text{ K})$	$\mu(300)$	$\mu(80)$
	x	y				
MF67	0,29	0,63	$1,71 \times 10^{16}$	$1,27 \times 10^{-1}$	2800	3600
MF68	0,27	0,60	$2,70 \times 10^{17}$	$9,51 \times 10^{-3}$	2340	2930
MF139	0,29	0,63	$3,47 \times 10^{17}$	$7,79 \times 10^{-3}$	2200	2550
MF141	0,29	0,63	$1,86 \times 10^{17}$	$1,85 \times 10^{-2}$	1810	1970
MF161	0,29	0,63	$8,74 \times 10^{15}$	$1,76 \times 10^{-1}$	2890	5210
MF162	0,29	0,63	$2,06 \times 10^{16}$	$1,19 \times 10^{-1}$	2560	3860

Os resultados obtidos pelas convergências das curvas, para a concentração de impurezas aceitadoras e o potencial de espalhamento são fornecidos na tabela 2, juntamente com a relação entre a densidade de aceitadores e de doadores.

Resultados da Análise

	$N_A (\text{cm}^{-3})$	$\Delta U (\text{ev})$	N_D/N_A
MF161	$1,1 \times 10^{16}$	0,54	1.7
MF162	$2,5 \times 10^{16}$	0,59	1.6
MF 67	$1,1 \times 10^{16}$	0,67	2.4
MF141	$2,1 \times 10^{17}$	0,68	1.9
MF 68	$1,8 \times 10^{17}$	0,49	1.6
MF139	$2,9 \times 10^{17}$	0,49	2.1

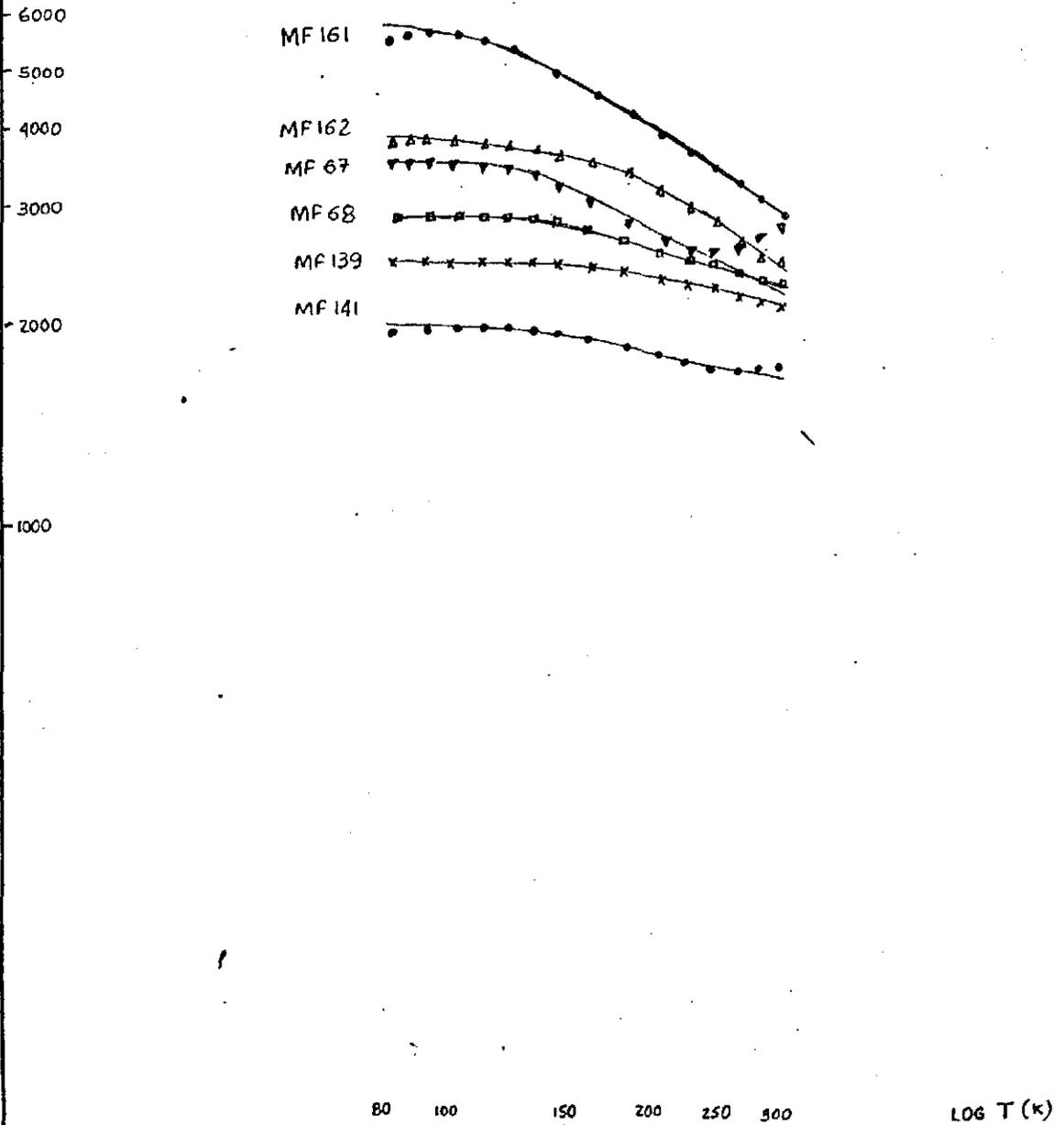
As curvas teóricas da mobilidade para as várias amostras, calculadas utilizando os resultados citados, podem ser vistas na figura, juntamente com os pontos experimentais.

MOBILIDADE

PONTOS EXPERIMENTAIS

E CURVAS TEÓRICAS

$\text{LOG } \mu \left(\frac{\text{cm}^2}{\text{V}\cdot\text{s}} \right)$



4) Fontes de Erro na Análise

A análise realizada contém aproximações de ordem teórica, e depende de parâmetros e relações não satisfatoriamente comprovados. As aproximações principais e suas influências nos resultados obtidos são analisadas a seguir:

1) A relação $\mu^{-1} = \sum_i \mu_i^{-1}$ não é estritamente correta. O principal fator de incorreção, neste caso, é a inelasticidade do espalhamento por fônons ópticos. No arseneto de gálio, onde os fônons ópticos são responsáveis praticamente únicos pelo espalhamento à temperatura ambiente, a aplicação desta regra leva a uma superestimação⁽⁴⁰⁾ da mobilidade. No InGaAsP, a participação de fônons ópticos dá conta, a 300 K, de cerca de 20% do espalhamento total, e a sua participação cai rapidamente com a diminuição da temperatura, sendo que a 200 K, participa em aproximadamente 5%. Portanto, o erro causado pela inclusão dos fônons ópticos na regra da soma dos inversos é próximo a 5%, a 300 K e menor que 1% a 200 K, se se mantém a proporção com o GaAs. Além do caso citado, se existir uma certa interdependência entre os espalhamentos por desordem e por impurezas ionizadas, ela acrescentará imprecisões extras. Talvez o argumento mais forte para considerar-se pequenos os erros provenientes da aplicação desta regra, seja a excelente concordância, entre a curva teórica e os dados experimentais, que ela proporciona.

2) A densidade de impurezas está no limite máximo para o qual a fórmula de Brooks-Herring para o espalhamento por impurezas ionizadas é aceitável. O erro causado pela não adequação da expressão para as amostras, se revela principalmente às temperaturas mais baixas. A comparação da curva teórica com os dados experimentais, a 80 K, fornece diferenças de até 20%, porém

a diferença máxima encontrada a 100 K é 9%; a 120 K não passa de 3%. Embora não se possa relacionar diretamente esta diferença ao erro de formulação introduzido, ela dá uma idéia da dimensão deste.

3) A atribuição de um tempo médio de relaxação para o espalhamento por fônons ópticos, é um erro de formulação cuja importância é difícil de estimar, porém, novamente a concordância teórico-experimental, permite supor que ele seja pequeno.

4) O esquema de interpolação utilizado para calcular as constantes dielétricas, embora testado para outras grandezas, não tem valor experimental a confirmá-lo.

5) Outras fontes de espalhamento podem ser atuantes.

É extremamente difícil estimar o erro introduzido pelos fatores descritos acima. É razoável, todavia, assumir⁽³⁶⁾ que estes erros afetem a qualidade do ajuste obtido entre resultados teóricos e experimentais. Numa aproximação simples, pode-se comparar a incerteza introduzida em ΔU , com a variação que o seu valor mostra quando se mantém o valor de N_a fixo e se varia a temperatura. Resumidamente, se trata de medir a dispersão dos valores obtidos para

$$\Delta U = f(N_a, T)$$

Se esta relação fosse isenta de imperfeições, mantendo-se fixo o valor de N_a e mudando-se a temperatura, o valor obtido para ΔU não deveria se modificar. A tabela abaixo mostra um exemplo da dispersão obtida num cálculo deste tipo, para uma situação típica (amostra MF162).

T(K)	80	100	120	140	180	200	240	260	300
$\Delta U(\text{ev})$	0,597	0,590	0,589	0,588	0,587	0,581	0,576	0,573	0,570

Desta forma a incerteza na definição do valor de ΔU , a partir dos resultados obtidos é de 5% e supomos que o erro de análise que cometemos é da mesma ordem de grandeza.

O erro total máximo, resultados dos erros experimentais, dos erros de modelos adotados para o transporte na amostra e dos erros de formulação na análise, segundo as estimativas que fizemos nesta e em secções anteriores é próximo a 10%.

Resumindo, assumimos que a imprecisão dos valores da concentração de impurezas aceitadoras e do potencial de espalhamento por desordem é de cerca de 10%.

A figura 5 apresenta a comparação dos resultados experimentais com o cálculo teórico para a mobilidade em função da temperatura. Nota-se a perfeita concordância na maior parte das temperaturas. Os erros maiores apresentam-se na região de temperaturas menores que 100 K, e chega a ser de 10% nas amostras mais dopadas. Tal erro se deve provavelmente à não adequação do modelo adotado para o espalhamento por impurezas ionizadas, devido, à já citada, excessiva densidade de impurezas.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES E PERSPECTIVA

Talvez a importância que este trabalho possa ter se deva mais ao método de cálculo desenvolvido que aos valores obtidos para as grandezas em estudo. Normalmente a obtenção de resultados similares aos obtidos necessita de cálculos bastante complexos que recaem inevitavelmente em métodos numéricos computacionais. Esperamos ter mostrado que, com aproximação razoáveis, é possível obter com cálculos simples resultados com precisão equivalente aos dos mais sofisticados. Convém ressaltar que a análise que fizemos não é simplesmente um ajuste de pontos experimentais através de uma curva teórica com parâmetros livres mas uma resolução de uma expressão teórica com a ajuda resultados experimentais.

Os valores obtidos para ΔU mostram quanto relevante é o espalhamento por desordem no potencial da rede.

A aparente constância da razão entre N_D e N_A nas mais diversas concentrações de portadores, sugere a possibilidade de uma tendência à auto compensação, caso o aumento na concentração de aceitadores quando do aumento de doadores não se deva a alguma falha do crescimento da camada epitaxial.

A continuação lógica para este trabalho seria fazê-lo em função da composição de ligas, uma vez que o parâmetro ΔU deve variar com ela.

Notamos no transcorrer do trabalho experimental, que o coeficiente de Hall apresenta uma certa dependência no módulo do campo magnético, a qual não se pode ter explicação pelos mo-

delos que conhecemos. Um estudo mais detalhado faz-se necessário para que se possa obter a solução desta questão. necessã

REFERÊNCIAS

- 01) J.R. Etcher, G.A. Antipas e J. Edgecombe Appl. Phys. Lett. 29, 153 (1976).
- 02) J.J. Hsich, J.A. Rossi e J.P. Donnelly; Appl. Phys Lett. 28, 709 (1976).
- 03) R.J. Nicholas, J.C. Portal, C. Coulbert, P. Perrier RT.P, Pearseal; Appl. Phys. Lett. 34(8), 492 (1978).
- 04) E.H. Perea, E. Mendez e C.G. Fonstad; J. Electron. Mat. 9,
- 05) R.E. Nahory, M.A. Pollack, W.D. Johnston e R.L. Barns; Appl. Phys. Lett. 33, 659 (1978).
- 06) W.L. Bond; Acta. Crystallogr. 13, 814, (1960).
- 07) A. Pinczuk, J.W. Morlock, RE. Nahory e M.A. Pollack; Appl. Phys. Lett. 33(5), 461, (1978).
- 08) Ver, por exemplo, J.S. Blakemore, Semiconductors Statistics, Pergamon Press, New York, 1962.
- 09) Ver, por exemplo, Kittel.
- 10) Idem.
- 11) P. Kireev; La Physique des Semiconductors, Mir Moscou (1975)
- 12) Ver, por exemplo; G.G. Roberts e outros; Physics Reports 60, 2, pg. 61 (1980).
- 13) L. Landau e E. Lifchitz; Mécanique Quantique, Éditions Mir, Moscou, 1966; pg. 548.
- 14) E. Fermi; Nuclear Physics; Univ. Press, Chicago, 1950, pg.142
- 15) Kirev, ob. cit. pág. 131.

- 16) K. Seeger, Semiconductor Physics; Springer-Verlag, Vienna 1973, pg. 171.
- 17) Idem, pg. 133
- 18) H. Brooks, Advances in Electronics and Eletron Physics (ed. L. Marton) vol.7, pg.85, 1955.
- 19) H. Frölich e N.F. Mott; Proc. Roy. Soc. (London) A171, 496 (1939).
- 20) H. Ehrenreich; J. Phys. Chem. Solids 2, 131 (1954).
- 21) J.W. Harrison e J.R. Hauser; J.Appl.Phys. 47(1), 292 (1976).
- 22) Ver, por exemplo, K. Seeger, Semiconductor Physics; Springer-Verlag Vienna, 1973, pg. 218.
- 23) D.J. Howarth e E.H. Sondheimer; Proc. Roy. Soc. (London) A219, 53 (1953).
- 24) A. Fortini, D.Diguet e J. Lugand; J.Appl. Phys. 41(7),3121 (1970).
- 25) L. Nordheim; Ann. Phys. (Leipzig) 9, 607 (1931).
- (26) P.A. Flinn; Phys. Rev. 104, 350 (1956).
- 27) N.F. Mott; Proc. Cambridge Phylos. Soc. 32, 81(1936).
- 28) Van der Pauw; Philips Res. Rep; 13, 1 (1958).
- 29) Putley;
- 30) C.M. Wolfe, G.E. Stilman e J.A. Rossi; J. Electrochem. Soc. Soc. 119, 250 (1972).
- 31) H. J. van Daal; Phylips Res. Rep., Suppl. 3 (1965).
- 32) P.B. Bhattacharia, J.W.Ku, S.J.T. Owen, G.H. Olsen e S.H. Chiao; IEEE J.Quantum Eletr. QE 17 (2), 150 (1981).

- 33) F.C. Prince, informação pessoal.
- 34) B.R. Nag; Theory of electrical transport in semiconductor Pergamon Press, Oxford (1972).
- 35) T.P. Pearssal; Elletronics Lett. 17(4), 169 (1981).
- 36) A.R. Adams, H.L. Tatham e outros; Elletronics Lett. 16(6), 540 (1980).
- 37) J. H. Marsh, P.A. Houston e P.N. Robson; Proc. 8zh. Int. Symp. on GaAs and related compounds. (1981)
- 38) Y. Takeda, M.A. LittleJohn, J.A. Hutchby e R.J. Trew; Elletronics. Lett. 17(19), 688 (1981).
- 39) P.D. Greene e S.A. Wheeler; Appl. Phys. Lett 35(1), 78 (1979).
- 40) D.L. Rode e S. Knoght; Phys. Rev. B3, 2534 (1971).