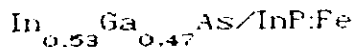


Este exemplar corresponde à redação final
da tese de mestrado defendida pelo aluno
Stênio Rocha e aprovada pela comissão
examinadora.

Campinas, 20/02/91

Assinatura de Prof. Dr. Mauro M. G. de Carvalho

CARACTERIZAÇÃO ELÉTRICA DE CAMADAS EPITAXIAIS DE



ALUNO : STÊNIO ROCHA

ORIENTADOR : Prof.Dr. MAURO M. G. DE CARVALHO

IF/9102506

TESE APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN
PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE EM FÍSICA.

DEZEMBRO DE 1990

A MEUS PAIS

A AMIGA E COMPANHEIRA SANDRA E
AO NOSSO PEQUENO CAIO.

AGRADECIMENTOS

Ao prof. Mauro, pela orientação; ao eng. Clóvis, pela automação do sistema de medidas e muito mais; à profa. Thereza Penna e à Eneida, pelas amostras de InGaAs; ao prof. Lisandro e ao Silvano, pelas análises cristalográficas; a todos os amigos que me incentivaram; aos técnicos, servidores, pessoal administrativo e professores que, direta ou indiretamente, colaboraram com este trabalho; às demais pessoas cujos nomes não são citados mas que sabem o quanto sou grato por sua ajuda e amizade; ao CNPq e à Telebrás, pelo suporte financeiro, meus sinceros agradecimentos.

ABSTRACT

The resistivity and Hall coefficient of n-In_{0.53}Ga_{0.47}As epitaxial films grown on InP:Fe semi-insulating substrates by L.P.E. (liquid-phase epitaxy) have been measured at temperatures in the range 4.2-300 K. The Hall mobility μ_H experimentally determined cannot be measured without the application of magnetic fields, while the calculated mobility is usually the effective or drift mobility (μ). To correlate μ_H with μ , one use the Hall factor $r_H = \mu_H/\mu$ which is function of several scattering mechanisms which limit the value of mobility of the charge carriers in the materials.

In this work, we developed a numeric method to deal which the experimental data and looked for make use of known expressions from literature toward get electrical characteristics of the samples. So, we present results of theoretical calculations of Hall mobility, Hall factor and carrier density of InGaAs. We calculate the mobility determined by combination of polar-optic phonon (PO), ionized-impurities (II) and alloy (AS) scattering mechanisms.

Foram medidos a resistividade e o coeficiente de Hall de camadas epitaxiais de $n\text{-In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ crescidas sobre substratos semi-isolantes de InP:Fe por L.P.E. (epitaxia da fase líquida) na faixa de temperatura de 4.2-300K. A mobilidade, experimentalmente determinada, isto é, a mobilidade de Hall (μ_H), não pode ser medida sem a aplicação de campos magnéticos, ao passo que a mobilidade calculada é a mobilidade efetiva (μ). Para relacionar μ_H com μ , usa-se o fator de Hall $r_H = \mu_H/\mu$ que é uma função dos diversos mecanismos de espalhamento e que limitam o valor da mobilidade dos portadores de carga no material.

Neste trabalho, desenvolvemos um método numérico para processar os dados experimentais e procuramos utilizar expressões conhecidas da literatura a fim de obtermos as características elétricas das amostras. Apresentamos, então, os resultados dos cálculos teóricos da mobilidade de Hall, fator de Hall e densidade de portadores do InGaAs . Calculamos a mobilidade a partir da combinação dos mecanismos de espalhamento, a saber: espalhamento por fônons ópticos polares (PO), por impurezas ionizadas (II) e por desordem no potencial da rede (AS).

Em tempos de ecologia...

"Cada ave, com as asas estendidas, é um livro aberto no céu. Feio crime é roubar ou destruir essa miúda biblioteca de Deus".

Humberto de Campos

I - INTRODUÇÃO

1 - Compostos Semicondutores	1
2 - Aplicações	2
3 - Caracterização de Camadas Epitaxiais	2

II - EQUAÇÃO DE BOLTZMANN

1 - Introdução	4
2 - Equação Cinética de Boltzmann	5
3 - O Tempo de Relaxação	10
4 - Densidade de Corrente	17
5 - Condutividade e Mobilidade eletrônica	18
6 - O Efeito Hall	20

III - ESTATÍSTICA DE SEMICONDUCTORES

1 - Estatística de Elétrons e Buracos	25
2 - Semicondutores Dominados por Níveis de Impurezas	28

IV - MECANISMOS DE ESPALHAMENTO

1 - Introdução	33
2 - Espalhamento por Impurezas	36
3 - Espalhamento por Desordem no Potencial da Rede	43
4 - Espalhamento por Oscilações Térmicas da Rede	48
5 - Espalhamento por Fônons Ópticos Polares	55

V - SISTEMA DE MEDIDAS

1 - Conjunto de Equipamentos	59
2 - Amostras de $n\text{-In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As/InP:Fe}$	63
3 - O Programa HALL.006	64
4 - Análise de Erros Experimentais	68

VI - RESULTADOS EXPERIMENTAIS - AJUSTE DA CURVA DA MOBILIDADE

1 - Introdução	71
2 - Resultados das Medidas de Resistividade e Efeito Hall	71
3 - Método da Análise da Mobilidade - O Programa MOBIL.FIT	71
4 - Resultados dos Ajustes de Curva	77

VII - DISCUSSÃO DE RESULTADOS

1 - A aproximação de Born	86
2 - A regra de Matthiessen (modificada)	88
3 - O fator de Correção $G(z)$	88

VIII - CONCLUSÕES

APÊNDICE I - REFERÊNCIAS	92
--------------------------	----

APÊNDICE II - PROGRAMA HALL.006	95
---------------------------------	----

APÊNDICE III - PROGRAMA MOBIL.FIT	101
-----------------------------------	-----

1 - Compostos Semicondutores:

Desde os primeiros estágios do desenvolvimento das ondas eletromagnéticas como meio de comunicação, têm-se utilizado as propriedades retificadoras dos compostos semicondutores em dispositivos eletrônicos. Os cristais naturais de Galena (sulfeto de chumbo) já eram usados em detetores desde 1904. Com o avanço da tecnologia de preparação e purificação de semicondutores, o interesse se voltou para semicondutores elementares, silício e germânio. Esse interesse aumentou ainda mais com o advento do transistor em 1948 e, dessa forma, o silício e o germânio foram os dois semicondutores mais estudados nos anos seguintes.

As pesquisas em compostos semicondutores continuavam devido ao fato de que alguns desses materiais serviam à fabricação de detetores de infravermelho, geradores termelétricos e fotocondutores. O desenvolvimento do transistor e o aumento de suas aplicações propiciou um interesse cada vez maior nas propriedades dos semicondutores de uma maneira geral. Por volta de 1950, graças a esse esforço, as propriedades de compostos semicondutores sintetizados, chamados compostos III-V, tornaram-se conhecidas.

Uma atenção especial a esses novos materiais foi dada quando algumas de suas propriedades foram discutidas como, por exemplo, o alto valor da mobilidade eletrônica. Os desenvolvimentos em compostos III-V iniciaram, também, uma nova era de pesquisa de materiais. Observou-se que os compostos semicondutores não precisavam ser feitos apenas combinando-se um elemento do grupo III com um do grupo V, mas também combinando-se elementos de outros grupos (II, IV, VI) ou fazendo-se "soluções sólidas" de diferentes compostos. Alguns desses compostos "misturados" têm estrutura de banda definida e comportamento semelhante aos semicondutores elementares ou binários, e com o tempo, semicondutores com muitas estruturas de bandas diferentes foram obtidos. Pode-se preparar um semicondutor com uma estrutura de banda quase que específica, ajustando-se a proporção dos compostos individualmente, embora as características inerentes de cada composto

não possam ser alteradas.

O estudo do potencial de compostos semicondutores foi ampliado com a introdução da idéia das super redes semicondutoras. Neste caso, quando dois ou mais semicondutores forem crescidos em camadas alternadas de espessura da ordem de alguns átomos, a estrutura da banda terá microestruturas que poderão ser controladas pela escolha de semicondutores individuais e as respectivas espessuras de suas camadas.

2 - Aplicações:

A totalidade das possibilidades dos compostos semicondutores não foi ainda explorada, na prática, em dispositivos eletrônicos. Apesar do rápido aumento do uso do Arseneto de Gálio (GaAs), ainda é pequeno o uso de compostos semicondutores pela indústria.

Compostos semicondutores podem ser utilizados em vários dispositivos semicondutores como diodos de tunelamento, lasers, LEDs, etc.. O InGaAs serve, por exemplo, como material para transistor de efeito de campo de alta frequência, lasers e detetores de infravermelho, possuindo alta mobilidade e banda proibida larga (0.75 eV)¹, o suficiente para uso em temperatura ambiente.

3 - Caracterização de Camadas Epitaxiais:

A análise global de camadas epitaxiais incluem determinação da espessura, composição, impurezas químicas, imperfeições e propriedades elétricas.

A espessura das camadas é medida, entre tantos outros meios, com um microscópio calibrado², ou ainda, é possível usar-se um microscópio de interferência³. A composição, isto é, a concentração química de cada um dos constituintes da liga é, geralmente, determinada por difração de raios X⁴, espectrorrefletância⁵ ou microsonda eletrônica. A técnica de

topografia por raios X⁶ e os ataques químicos⁷, por sua vez, permitem a observação de possíveis imperfeições da camada e a espectroscopia de massa⁸ é muito útil para determinar os tipos de impurezas no semicondutor.

As propriedades elétricas são conhecidas a partir do que se denomina caracterização elétrica, sendo que na tomada de medidas, deve-se assegurar que os resultados obtidos não sejam influenciados pelo substrato. Um dos parâmetros de caracterização bastante importante é a resistividade que se determina por diversas técnicas, entre as quais, a das quatro pontas⁹, a das três pontas⁹, a das duas pontas¹⁰ e a da capacitância¹¹.

É necessário saber, além da resistividade, os valores da mobilidade e da densidade de portadores para se completar a caracterização elétrica das amostras. Neste caso, utiliza-se o método de Van der Paw que será descrito com detalhe ao longo deste trabalho. Veremos que, através da caracterização elétrica de camadas epitaxiais, encontramos muitos outros parâmetros físicos do material. Isto faz da caracterização elétrica um instrumento bastante útil e poderoso para a aquisição de informações que orientam os trabalhos desde os mais elementares como a limpeza do material até a aplicabilidade final deste como dispositivo eletrônico.

Neste trabalho, desenvolvemos um método numérico para determinação de parâmetros físicos com aplicação em InGaAs. Procuramos utilizar equações conhecidas da literatura e obter as características elétricas das amostras na faixa de 4,2K a 300K. Nos capítulos II, III e IV descreveremos, ainda que sucintamente, toda a teoria utilizada na análise das medidas. Nos capítulos V e VI descreveremos os equipamentos, o procedimento experimental e o método de análise de resultados. No capítulo VII, discutimos os resultados e, finalmente, no capítulo VIII, apresentamos as conclusões finais.

1 - Introdução:

A teoria de transporte relaciona a corrente num material com a força que faz os portadores se movimentarem. Estaremos apenas interessados no movimento de elétrons e buracos em semicondutores e na sua interação com os centros espalhadores. As vibrações térmicas da rede (fônons), íons de impureza e os próprios átomos são importantes centros de espalhamento. Desse estudo, obtemos informações da probabilidade por unidade de tempo de um portador ser espalhado por cada tipo de centro espalhador e o valor da corrente no material.

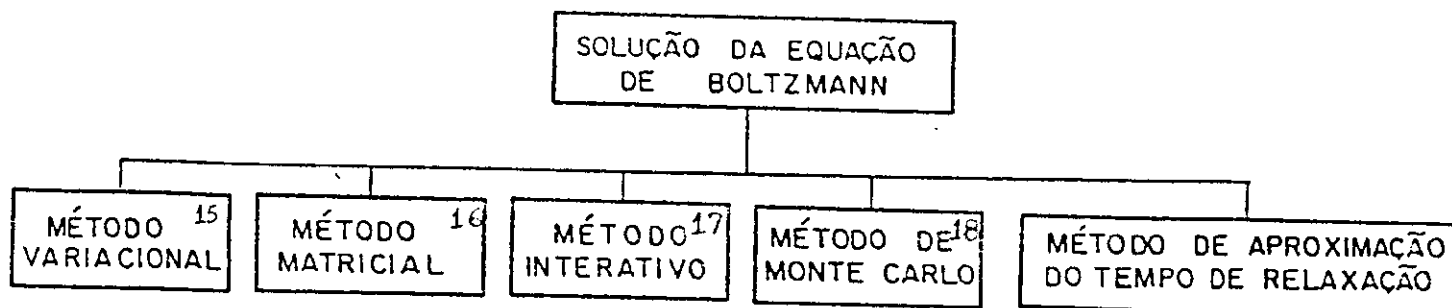
Daremos, aqui, um tratamento clássico às formulações, ou seja, os elétrons e buracos são partículas e estaremos também considerando que:

- As interações entre as partículas devem ser fracas;
- As distâncias percorridas pelas partículas são maiores que seus comprimentos de onda associados;
- Os estados de energia devem ser bem definidos;
- As interações entre os centros espalhadores devem ser fracas;
- O campo elétrico deve ser fraco de modo que a aceleração durante o espalhamento seja desprezível¹²;
- A variação temporal de campos e gradientes de temperatura aplicados devem ser pequenos no intervalo entre as colisões;
- As transições banda a banda estão ausentes¹³.

Se uma ou mais das condições não for válida, faz-se necessário um tratamento quanto-mecânico¹⁴. Contudo, tais condições são normalmente satisfeitas para baixa densidade de portadores e defeitos e bandas largas, típicas de semicondutores.

A formulação clássica da teoria de transporte é baseada na equação de Boltzmann, ou seja, numa equação para a probabilidade de encontrar uma partícula com momento $\hbar\vec{k}$ na posição $\vec{r}$ no instante t , $f(\vec{r},\vec{k},t)$. No caso estacionário, $\partial f/\partial t = 0$, ou seja, a variação de f com o tempo devida aos campos aplicados, gradientes de concentração e temperatura e colisões deve desaparecer. Segue-se, daí,

uma complicada equação integro-diferencial devida aos termos de colisão. Para solução da equação existem diversos métodos como mostrados no esquema (II.1.1).



esquema II.1.1: Métodos de solução da equação de Boltzmann.

A solução da equação de Boltzmann pode ser mais facilmente obtida quando os termos de colisão podem ser simplificados devido à existência de um tempo de relaxação que, como veremos mais adiante, é a constante de tempo de decaimento de um sistema quando cessa a ação de campos externos. Isso ocorre, felizmente, para a maior parte dos processos de espalhamento em semicondutores porque nesses casos as colisões são elásticas.

Contudo, para os casos em que um tempo de relaxação não pode ser definido, como por exemplo, no espalhamento por fônons ópticos polares, deve-se recorrer a outros métodos de solução, sendo o método variacional o mais comum.

2 - Equação Cinética de Boltzmann:

Numa rede perfeita, a simetria translacional faz as funções de onda assumirem a forma das ondas de Bloch $\psi_{\vec{k}} = u_{\vec{k}}(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$ onde $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ é uma função com periodicidade da rede e $\hbar\vec{k}$, o momento cristalino.

Ao aplicar-se um campo de forças exteriores $\vec{F}$ ao

cristal, ocorre uma modificação no estado dos elétrons dentro de uma zona de Brillouin que pode ser descrita pela equação

$$\frac{d}{dt}(\hbar\vec{k}) = \vec{F} \quad (\text{II.2.1})$$

Consequentemente, o sistema de partículas ou conjunto de portadores executará um movimento coordenado dando lugar ao que se denomina "fenômenos de transporte". A função distribuição $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ também se modifica com o passar do tempo como expressa a equação

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} \frac{d\vec{k}}{dt} \quad (\text{II.2.2})$$

mas com o número de estados inalterado (Teorema de Liouville¹⁹). Portanto,

$$\frac{df}{dt} = 0 \quad (\text{II.2.3})$$

e a equação (II.2.2) pode ser rearranjada como

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}_t}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f = \frac{\partial f}{\partial t} \quad (\text{II.2.4})$$

onde $\vec{F}_t$ é a força total sobre um portador de carga, $\vec{v}$ é a velocidade do portador, $2\pi/\hbar$ é a constante de Planck, e $\vec{\nabla}_r$ e $\vec{\nabla}_k$ são os gradientes dos espaços r e k , respectivamente. Considerando-se que $\vec{F}_t$ é a

superposição das forças externas $\vec{F}$ e internas $\vec{F}_{int}$, a expressão (II.2.4) pode ser separada novamente

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f + \frac{\vec{F}_{int}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f = \frac{\partial f}{\partial t} \quad (\text{II.2.5})$$

ou

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{campos}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{colisões}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) \quad (\text{II.2.6})$$

onde

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{campos}} = \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f \quad (\text{II.2.7})$$

e

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{colisões}} = \vec{F}_{int} \cdot \vec{\nabla}_k f \quad (\text{II.2.8})$$

Quando um estado estacionário é alcançado, $\partial f / \partial t = 0$ e a equação (II.2.6) torna-se

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{campos}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{colisões}} = 0 \quad (\text{II.2.9})$$

ou seja, a ação dos campos externos é compensada pelas colisões.

Para um cristal real, as forças externas $\vec{F}$ produzem uma variação lenta na função de onda do portador e sua ação depende fracamente da posição. Contudo, as forças internas $\vec{F}_{int}$ produzem variações bruscas na função de onda por serem bastante localizadas, uma vez que elas têm origem no grande número de imperfeições do material.

Durante uma colisão, a probabilidade por unidade de

tempo $W(\vec{k}, \vec{k}')$ do portador mudar do estado $(\vec{r}, \vec{k})$ para o estado $(\vec{r}', \vec{k}')$ é não nula desde que o estado $\vec{k}'$ esteja desocupado (Princípio de Exclusão de Pauli¹⁹). Se as coordenadas $\vec{r}$ e $\vec{r}'$ não sofrem variação notável, então a probabilidade de transição não depende de $\vec{r}$ e $\vec{r}'$. Desde que $d\Omega_{\vec{k}}$ e $d\Omega_{\vec{k}'}$ são volumes unitários que circundam os pontos $\vec{k}$ e $\vec{k}'$ e, portanto, $d\Omega_{\vec{k}}/4\pi^3$ e $d\Omega_{\vec{k}'}/4\pi^3$ são os números de estados permitidos, respectivamente, então o número de estados permitidos inicialmente ocupados é

$$f(\vec{r}, \vec{k}, t) \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi^3} \quad (\text{II.2.10})$$

e o número de estados finais livres é

$$[1 - f(\vec{r}', \vec{k}', t)] \frac{d\Omega_{\vec{k}'}}{4\pi^3} \quad (\text{II.2.11})$$

então o número de portadores aptos a mudar de estado, no intervalo de tempo dt , com a consequente diminuição da quantidade de portadores no volume de fase é

$$-f(\vec{r}, \vec{k}, t) W(\vec{k}, \vec{k}') [1 - f(\vec{r}', \vec{k}', t)] \frac{d\Omega_{\vec{k}'}}{4\pi^3} \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi^3} dt \quad (\text{II.2.12})$$

Analogamente, para transições inversas, temos

$$f(\vec{r}', \vec{k}', t) W(\vec{k}', \vec{k}) [1 - f(\vec{r}, \vec{k}, t)] \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi^3} \frac{d\Omega_{\vec{k}'}}{4\pi^3} dt \quad (\text{II.2.13})$$

Portanto, a variação do número de portadores no elemento de volume de fase, no intervalo de tempo dt , devido às colisões será

$$\{f(\vec{k}')W(\vec{k},\vec{k}')[1-f(\vec{k})] - f(\vec{k})W(\vec{k},\vec{k}')[1-f(\vec{k}')] \} \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi^3} \frac{d\Omega_{\vec{k}'}}{4\pi^3} dt \quad (\text{II.2.14})$$

onde $W(\vec{k},\vec{k}') = W(\vec{k}',\vec{k})$ pelo princípio da revesibilidade²⁰. Considerando-se todos os $\vec{k}'$ possíveis na Zona de Brillouin, teremos o número total de portadores que mudam de estado, integrando em todo volume do espaço $\vec{k}$, no intervalo de tempo dt , ou seja,

$$\frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi^3} dt \int_{\text{Z.B.}} W(\vec{k},\vec{k}') [f(\vec{k}') - f(\vec{k})] \frac{d\Omega_{\vec{k}'}}{4\pi^3} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{colisões}} \frac{d\Omega_{\vec{k}}}{4\pi^3} dt \quad (\text{II.2.15})$$

onde podemos obter

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{colisões}} = \int W(\vec{k},\vec{k}') [f(\vec{k}') - f(\vec{k})] \frac{d\Omega_{\vec{k}'}}{4\pi^3} \quad (\text{II.2.16})$$

e a expressão (II.2.5) fica

$$-\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f - \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f = \int W(\vec{k},\vec{k}') [f(\vec{k}') - f(\vec{k})] \frac{d\Omega_{\vec{k}'}}{4\pi^3} \quad (\text{II.2.17})$$

que é a equação cinética de Boltzmann.

Suponhamos que num instante $t=0$, deixem de atuar campos externos sobre o sistema e, portanto, a função de equilíbrio $f(\vec{k})$ perturbada por campos externos tende à função de equilíbrio original $f_0(\vec{k})$ por ação de centros espalhadores, ou seja,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{colisões}} = - \frac{f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})}{\tau(\vec{k})} \quad (\text{II.3.1})$$

que, resolvendo-se, fornece

$$f - f_0 = (f - f_0)_{t=0} e^{-t/\tau(\vec{k})} \quad (\text{II.3.2})$$

de onde se deduz que a diferença $f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})$ diminui exponencialmente com a constante de tempo $\tau(\vec{k})$ denominada tempo de relaxação e dada por²¹

$$\frac{1}{\tau} = N v 2\pi \int_0^{2\pi} \sigma_s(\theta) (1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta \quad (\text{II.3.3})$$

onde N é a densidade de centros espalhadores, v é a velocidade da partícula espalhada, $\sigma_s(\theta)$ é a seção de choque diferencial e θ é o ângulo de espalhamento da partícula. Comparando-se as equações (II.3.1) e (II.2.16), temos para o tempo de relaxação

$$\frac{f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})}{\tau(\vec{k})} = \frac{1}{4\pi^3} \int W(\vec{k}-\vec{k}') [f(\vec{k}') - f(\vec{k})] d\Omega_{\vec{k}'} \quad (\text{II.3.4})$$

Se, ainda, $\partial f / \partial t = 0$, das equações (II.2.17) e (II.3.1), podemos obter

$$-\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f - \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f = - \frac{f(\vec{k}) - f_0(\vec{k})}{\tau(\vec{k})} \quad (\text{II.3.5})$$

uma vez que $\tau(\vec{k})$ independe de $\vec{F}$.

Podemos expandir $f(\vec{k})$ numa série de derivadas em relação a $\vec{k}$, ou seja,

$$f(\vec{k}) = f_0(\vec{k}) + f_1(\vec{k}) + f_2(\vec{k}) + \dots \quad (\text{II.3.6})$$

que, em primeira ordem, se resume a

$$f(\vec{k}) = f_0(\vec{k}) + f_1(\vec{k}) \quad (\text{II.3.7})$$

e substituir a equação (II.3.7) em (II.3.5)

$$\vec{v} \cdot (\vec{\nabla}_r f_0 + \vec{\nabla}_r f_1) - \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot (\vec{\nabla}_k f_0 + \vec{\nabla}_k f_1) = - \frac{f_1(\vec{k})}{\tau(\vec{k})} \quad (\text{II.3.8})$$

onde

$$\vec{\nabla}_r f_0 = \vec{\nabla}_r \left[\frac{1}{1 + e^{(\mathbf{E}-\mathbf{F})/k_B T}} \right] = 0 \quad (\text{II.3.9})$$

pois o nível Fermi F e a temperatura T independem da posição; k_B é a constante de Boltzmann, E é a energia do sistema, e

$$\vec{\nabla}_k f_o = \frac{\partial f}{\partial E} \vec{\nabla}_k E = \frac{\partial f}{\partial E} o \hbar \vec{v} \tag{II.3.10}$$

Substituindo (II.3.9) e (II.3.10) em (II.3.8), obtemos

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f_1 + \frac{\vec{F}}{\hbar} \left[\left(\frac{\partial f_o}{\partial E} \right) \hbar \vec{v} + \vec{\nabla}_k f_1 \right] = - \frac{f_1(\vec{k})}{\tau(\vec{k})} \tag{II.3.11}$$

onde $\vec{F} = e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$ é a força de Lorentz, uma vez que nos interessa a ação de campos galvanomagnéticos, "e" é a carga elétrica, $\vec{E}$ é o campo elétrico e $\vec{B}$ é o campo magnético. Como estamos tratando de campos fracos, então

$$\vec{\nabla}_r f \cong \vec{\nabla}_r f_o = 0 \tag{II.3.12}$$

o que implica em

$$\vec{\nabla}_r f_1 \cong 0 \tag{II.3.13}$$

pois $f_1 \ll f$, e se desprezarmos $\vec{\nabla}_k f_1$, então

$$f_1(\vec{k}) = - \tau(\vec{k}) e \vec{E} \cdot \vec{v} \frac{\partial f_o}{\partial E} \tag{II.3.14}$$

o que, em princípio, independe do campo magnético. Mas se considerarmos $\vec{\nabla}_{\vec{k}} f_1 \neq 0$, ou seja, se estamos interessados em considerar o campo magnético também, então reescrevemos (II.3.14)

$$f_1(\vec{k}) = - \vec{X}(\vec{k}) \cdot \vec{v} \frac{\partial f_0}{\partial E} \quad (\text{II.3.15})$$

onde $\vec{X}(\vec{k})$ é uma função vetorial que contém os campos elétrico e magnético a ser determinada. Podemos escrever as componentes de $\vec{v}$ como

$$v_i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_i} = \frac{1}{\hbar k_i} \frac{dE}{dk_i} k_i = \frac{\hbar k_i}{m^*} \quad (\text{II.3.16})$$

onde m^* é a massa efetiva, que no caso, é escalar uma vez que estamos considerando a banda parabólica de simetria esférica na qual E depende apenas de $|\vec{k}|$, então,

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}} f_1 = - \frac{d}{d\vec{k}} \left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{X} \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{d\vec{k}} \right) = - \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{X} \frac{\hbar}{m^*} - \vec{v} \frac{d}{d\vec{k}} \left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{X} \right) \quad (\text{II.3.17})$$

Desde que

$$\frac{e}{\hbar} (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_1 = - \frac{e}{m^*} \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{X} \cdot (\vec{v} \times \vec{B}) \quad (\text{II.3.18})$$

de (II.3.10), (II.3.15), (II.3.16) e (II.3.18) em (II.3.11), teremos

$$e\vec{E} \cdot \vec{v} - \frac{e}{h^2} (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot (\vec{X} \cdot \vec{\nabla}_k) \vec{\nabla}_k E = -\frac{\vec{X} \cdot \vec{v}}{\tau} \quad (\text{II.3.19})$$

e usando

$$(\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \vec{\nabla} E = -(\vec{\nabla} E \times \vec{B}) \cdot \vec{v}$$

(II.3.19) torna-se

$$e \vec{E} \cdot \vec{v} + \frac{e}{h^2} [(\vec{X} \cdot \vec{\nabla}_k) \cdot \vec{\nabla}_k E \times \vec{B}] \cdot \vec{v} = -\frac{\vec{X} \cdot \vec{v}}{\tau} \quad (\text{II.3.20})$$

Portanto,

$$\vec{X} = e\tau \left\{ \frac{1}{h^2} [(\vec{X} \cdot \vec{\nabla}_k) \cdot \vec{\nabla}_k E \times \vec{B}] + \vec{E} \right\} \quad (\text{II.3.21})$$

e que pode ser reescrita, usando-se (II.3.6), como

$$\vec{X} = e\vec{E}\tau + \frac{e\tau}{m^*} (\vec{X} \times \vec{B}) \quad (\text{II.3.22})$$

e a equação (II.3.15) como

$$f_1(\vec{k}) = -e \frac{\partial f_0}{\partial E} \left(\tau \vec{E} + \frac{e\tau}{m^*} \vec{X} \times \vec{B} \right) \cdot \vec{v} \quad (\text{II.3.23})$$

Para encontrarmos $\vec{X}$, vamos fazer o produto vetorial de todos os termos

da equação (II.3.22) por $(e\tau/m^*)\vec{B}$

$$\frac{e\tau}{m^*} (\vec{X} \times \vec{B}) = \frac{e^2 \tau^2}{m^*} (\vec{E} \times \vec{B}) + \frac{e^2 \tau^2}{(m^*)^2} (\vec{X} \times \vec{B}) \times \vec{B}$$

ou

$$\frac{e\tau}{m^*} (\vec{X} \times \vec{B}) = \frac{e^2 \tau^2}{m^*} (\vec{E} \times \vec{B}) + \frac{e^2 \tau^2}{(m^*)^2} [(\vec{X} \times \vec{B}) \cdot \vec{B} - B^2 \vec{X}] \quad (\text{II.3.24})$$

Da equação (II.3.22) temos

$$\frac{e\tau}{m^*} \vec{X} \times \vec{B} = \vec{X} - e\tau \vec{E} \quad (\text{II.3.25})$$

e

$$\vec{X} \cdot \vec{B} = e\tau \vec{E} \cdot \vec{B} + \frac{e\tau}{m^*} (\vec{X} \times \vec{B}) \cdot \vec{B} = e\tau \vec{E} \cdot \vec{B} \quad (\text{II.3.26})$$

Usando (II.3.25) e (II.3.26) em (II.3.24)

$$(\vec{X} - e\tau \vec{E}) = \frac{e^2 \tau^2}{m^*} \vec{E} \times \vec{B} + \frac{e^2 \tau^2}{(m^*)^2} [e\tau (\vec{E} \cdot \vec{B}) \vec{B} - B^2 \vec{X}] \quad (\text{II.3.27})$$

Portanto,

$$\vec{X} = \frac{e\tau \vec{E} + \frac{e^2 \tau^2}{m^*} \vec{E} \times \vec{B} + \frac{e^3 \tau^3}{(m^*)^2} (\vec{E} \cdot \vec{B}) \vec{B}}{1 + \frac{e^2 \tau^2}{(m^*)^2} B^2} \quad (\text{II.3.28})$$

Substituindo $e\tau/m^* = \mu$, onde μ é a mobilidade eletrônica, em (II.3.28)

$$\vec{\chi} = \frac{e\tau[\vec{E} + \mu(\vec{E} \times \vec{B}) + \mu^2(\vec{E} \cdot \vec{B})\vec{B}]}{1 + \mu^2 B^2} \quad (\text{II.3.29})$$

Se os campos elétrico $\vec{E}$ e magnético $\vec{B}$ forem paralelos entre si, ou $\vec{B} = 0$, a equação (II.3.29) se resume a

$$\vec{\chi} = e\tau\vec{E} \quad (\text{II.3.30})$$

e, nesse caso, os parâmetros de transporte independem de $\vec{B}$, desde que $\vec{B}$ não seja forte. Mas, se $\vec{E}$ e $\vec{B}$ forem perpendiculares entre si, temos

$$\vec{\chi} = \frac{e\tau[\vec{E} + \mu(\vec{E} \times \vec{B})]}{1 + \mu^2 B^2} \quad (\text{II.3.31})$$

Substituindo em (II.3.23)

$$f_1(\vec{k}) = -e \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{[\tau\vec{E} \cdot \vec{v} + e\tau\mu(\vec{E} \times \vec{B}) \cdot \vec{v}]}{1 + \mu^2 B^2} \quad (\text{II.3.32})$$

onde se conclui que o campo magnético perpendicular altera os parâmetros de transporte, como veremos ao abordar o efeito Hall.

4 - Densidade de Corrente:

Vejamos, agora, como se comporta a densidade de corrente no material em função do resultado mostrado na equação (II.3.32). A densidade de corrente por unidade de volume do como se comespaço de vetores de onda do cristal é

$$\vec{J} = \frac{1}{4\pi^3} \int e \vec{v} f(\vec{k}) d\Omega_{\vec{k}}$$

$$\vec{J} = \frac{1}{4\pi^3} \int e \vec{v} f_o(\vec{k}) d\Omega_{\vec{k}} + \frac{1}{4\pi^3} \int e \vec{v} f_1(\vec{k}) d\Omega_{\vec{k}}$$

ou

$$\vec{J} = \frac{e}{4\pi^3} \int \vec{v} f_1(\vec{k}) d\Omega_{\vec{k}} \quad (\text{II.4.1})$$

pois

$$\int \vec{v} f_o(\vec{k}) d\Omega_{\vec{k}} = 0 \quad (\text{II.4.2})$$

no equilíbrio termodinâmico. Substituindo-se (II.3.32) em (II.4.1), temos

$$\vec{J} = - \frac{e}{4\pi^3} \int \vec{v} \frac{\partial f_o}{\partial E} \left[\frac{e\tau \vec{E} \cdot \vec{v} + e\tau\mu (\vec{E} \times \vec{B}) \cdot \vec{v}}{1 + \mu^2 B^2} \right] d\Omega_{\vec{k}}$$

$$\mathbf{j} = - \frac{e^2}{4\pi^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\tau v^2 \vec{E}}{1 + \mu^2 B^2} d\Omega_{\vec{k}} - \frac{e^3}{4\pi^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{v^2 \left(\frac{\tau}{m^*} \right)^2 \vec{E} \times \vec{B}}{1 + \mu^2 B^2} d\Omega_{\vec{k}}$$

ou

$$\mathbf{j} = e^2 \vec{E} K_{11} + \frac{e^3}{m^*} \vec{E} \times \vec{B} K_{12} \quad (\text{II.4.3})$$

onde

$$K_{rs}^{ij} = - \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{E^{r-1} \tau^s}{1 + \mu^2 B^2} \frac{\partial f_0}{\partial E} v_i v_j d\Omega_{\vec{k}} \quad (\text{II.4.4})$$

Estes últimos são denominados coeficientes cinéticos. Pode ser mostrado que $K_{rs}^{ij} = 0$ para $i \neq j$ e $K_{rs}^{ij} = K_{rs}$ para $i = j$.

5 - Condutividade e Mobilidade Eletrônica:

Determinemos a condutividade elétrica de um semiconductor que se encontra num campo elétrico $\vec{E}$. É sabido que

$$\mathbf{j} = \sigma \vec{E} \quad (\text{II.5.1})$$

onde σ é a condutividade elétrica, ou seja, é a constante de proporcionalidade entre os valores do campo elétrico aplicado e a densidade de corrente obtida.

Se $\vec{B} = 0$, usando as equações (II.4.3) e (II.5.1), temos

$$\sigma = e^2 K_{11} \quad (\text{II.5.2})$$

onde

$$K_{11} = - \frac{n}{m^*} \langle \tau \rangle \quad (\text{II.5.3})$$

$$K_{12} = -\frac{n}{m^*} \langle \tau^2 \rangle \quad (\text{II.5.4})$$

isto é, os coeficientes cinéticos K_{11} e K_{12} se relacionam à concentração de portadores²² n , e aos valores médios do tempo de relaxação $\langle \tau \rangle$ e $\langle \tau^2 \rangle$, e a equação (II.5.2) pode ser reescrita como

$$\sigma = \frac{e^2}{m^*} n \langle \tau \rangle$$

ou

$$\sigma = e n \mu \quad (\text{II.5.5})$$

onde μ é a mobilidade média dos portadores. Assim

$$\mu = \frac{\sigma}{en} = \frac{1}{\rho en} \quad (\text{II.5.6})$$

onde $\rho = 1/\sigma$ é a resistividade do material. Para o cálculo da condutividade e da mobilidade, necessitamos encontrar o valor de $\langle \tau \rangle$ na ausência do campo magnético. Para o material não degenerado que obedece à estatística de Maxwell-Boltzmann

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int_0^\infty \varepsilon^{3/2} e^{-\varepsilon} \tau(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^\infty \varepsilon^{3/2} e^{-\varepsilon} d\varepsilon} \quad (\text{II.5.7})$$

onde $\varepsilon = E/k_B T$. Para o material degenerado, o tempo de relaxação médio dependerá do nível de Fermi porque somente os elétrons nas vizinhanças (da ordem de $k_B T$) desse nível participarão do transporte de cargas, ou seja, determinarão a concentração de portadores ativos. Portanto,

$$\sigma = en \mu(\eta) = \frac{e^2}{m} n \tau(\eta) \quad (\text{II.5.8})$$

onde $\eta = F/k_B T$ é o nível de Fermi reduzido. Veremos mais detalhes a seguir.

6 - O Efeito Hall:

Quando campos elétricos e magnéticos atuam sobre um cristal, ocorrem efeitos cinéticos aos quais denominamos de efeitos galvanomagnéticos e o efeito Hall é um exemplo. O efeito Hall pode ser mais facilmente compreendido a partir da figura (II.6.1) abaixo.

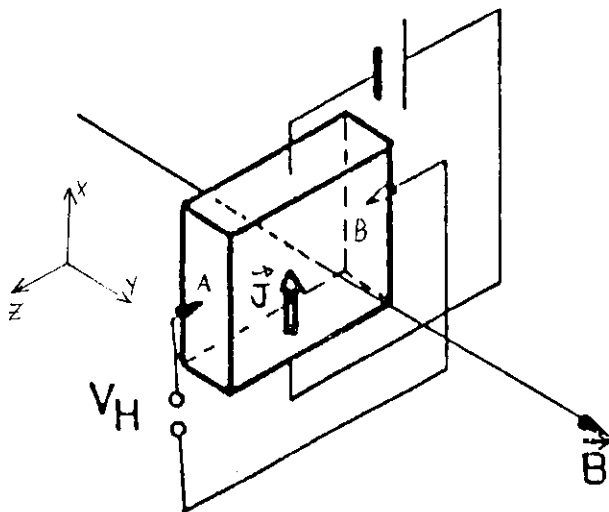


figura II.6.1: Arranjo para medida de efeito Hall.

V_H é a tensão de Hall.

Suponhamos que num semiconductor homogêneo, um campo elétrico $\vec{E} = (E_x, 0, 0)$ origina uma corrente $\vec{J} = (J_x, 0, 0)$. Evidentemente, a diferença de potencial entre os pontos A e B é zero (figura II.6.1).

Aplicando-se agora um campo magnético $\vec{B} = (0, B_y, 0)$ à amostra, veremos surgir sobre os portadores de carga a força $\vec{F}$ dada

por

$$\vec{F} = e\vec{v} \times \vec{B} \quad (\text{II.6.1})$$

onde "e" é a carga do portador e $\vec{v}$, sua velocidade. Essa força provocará uma separação espacial das cargas no semiconductor na direção perpendicular a $\vec{v}$ e $\vec{B}$, isto é, na direção z, surgindo assim um campo elétrico E_z entre os pontos A e B. As cargas desviadas irão se acumulando com o conseqüente aumento da intensidade do campo E_z , até que a força $e\vec{E}_z$ compense a força $\vec{F}$ (eq. II.6.1). Nesse caso, as cargas voltam a transitar pelo cristal na direção inicial. Tal fenômeno é chamado efeito Hall e a tensão V_H entre A e B, tensão de Hall. Da equação (II.4.3), podemos escrever as componentes de $\vec{J}$

$$J_x = e^2 E_x K_{11} - \frac{e^3}{m^*} K_{12} E_z B \quad (\text{II.6.2})$$

$$J_y = 0 = e^2 E_y K_{11} \quad (\text{II.6.3})$$

e, portanto

$$E_y = 0 \quad (\text{II.6.4})$$

e

$$J_z = 0 = e^2 E_z K_{11} + \frac{e^3}{m^*} K_{12} E_x B \quad (\text{II.6.5})$$

portanto,

$$E_z = \left(-\frac{e}{m^*} - \frac{K_{12}}{K_{11}} \right) B E_x \quad (\text{II.6.6})$$

onde E_z é o campo elétrico entre os pontos A e B, isto é, o campo de Hall. Definimos a mobilidade de Hall μ_H como sendo

$$\mu_H = \frac{e}{m^*} \frac{K_{12}}{K_{11}} \quad (\text{II.6.7})$$

que difere da mobilidade média μ por uma constante multiplicativa²². Também podemos definir a condutividade elétrica σ_B na direção do campo E_x devida à aplicação de um campo magnético como sendo

$$\sigma_B = e^2 K_{11} + \frac{e^4}{m^{*2}} \frac{K_{12}^2}{K_{11}^2} B^2 \quad (\text{II.6.8})$$

ou

$$\sigma_B = e^2 K_{11} (1 + \mu_H^2 B^2) \quad (\text{II.6.9})$$

Para campos externos fracos, a relação $E_z / (J_x B)$ não se altera²³ e, portanto, é definida como sendo a constante de Hall R_H , dada por

$$R_H = - \frac{E_z}{J_x B} \quad (\text{II.6.10})$$

Substituindo (II.6.2) e (II.6.6) em (II.6.10), temos

$$R_H = \frac{\frac{e}{m^*} \frac{\kappa_{12}}{\kappa_{11}}}{e^2 \kappa_{11} \left(1 + \frac{e^2}{m^*} \frac{\kappa_{12}^2}{\kappa_{11}^2} B \right)} \quad (\text{II.6.11})$$

Substituindo (II.5.3) e (II.5.4) em (II.6.11), temos

$$R_H = \frac{\frac{e}{m^*} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle}}{\frac{e^2 n}{m^*} \langle \tau \rangle \left(1 + \frac{e^2 \langle \tau^2 \rangle^2}{(m^*)^2 \langle \tau \rangle^2} B \right)}$$

portanto,

$$R_H = \frac{1}{en} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} = \frac{r_H}{en} \quad (\text{II.6.12})$$

desde que $\mu B^2 \ll 1$ e

$$r_H = \langle \tau^2 \rangle / \langle \tau \rangle^2 \quad (\text{II.6.13})$$

é uma constante conhecida por fator de Hall e que depende dos

mecanismos de espalhamento, como veremos adiante.

Assim, a constante de Hall R_H fornece uma medida da densidade de portadores na banda de condução. Das equações (II.5.3), (II.5.4) e (II.6.7), temos

$$\mu_H = -\frac{e}{m^*} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle} \quad (\text{II.6.14})$$

que comparada à equação da mobilidade média

$$\mu = -\frac{e}{m^*} \langle \tau \rangle \quad (\text{II.6.15})$$

fornece

$$\mu_H = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \mu \quad (\text{II.6.16})$$

ou seja

$$\mu_H = r_H \mu \quad (\text{II.6.17})$$

1 - Estatística de Elétrons e Buracos:

Para se determinar o número de partículas que possuem energia num dado intervalo de energia, deve-se conhecer a probabilidade de que o estado dado de energia E seja ocupado por uma partícula, isto é, deve-se conhecer a função distribuição $f(E)$. Em condições de equilíbrio térmico, para as partículas de spin semi-inteiro que obedecem ao Princípio de Exclusão de Pauli, cumpre-se a distribuição de Fermi-Dirac²⁴ dada por

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-F)/k_B T}} \quad \text{(III.1.1)}$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura absoluta e F , a energia de Fermi. A figura (III.1.1) mostra esquematicamente a função distribuição de Fermi-Dirac para temperaturas distintas.

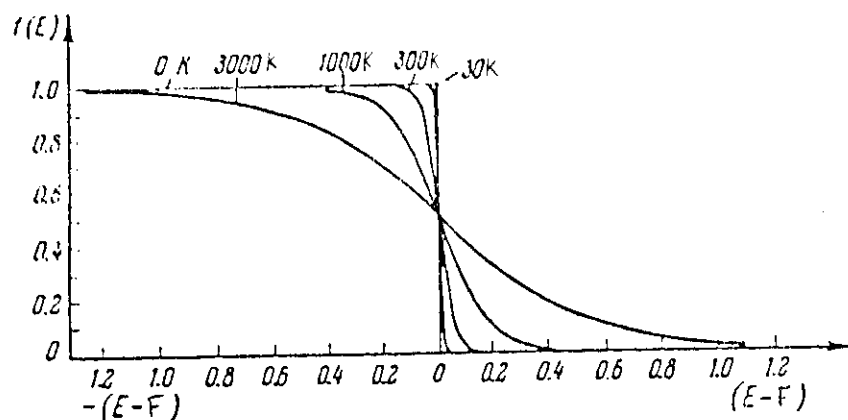


figura III.1.1: Função distribuição de Fermi-Dirac.

Da equação (III.1.1) e da figura (III.1.1) deduz-se que, quando $T = 0$, temos

$$f(E) = \begin{cases} 1 & \text{para } 0 \leq E \leq F \\ 0 & \text{para } E > F \end{cases}$$

Isto significa que todos os estados com $E < F$ estão ocupados por elétrons enquanto que os demais estados com $E > F$ estão vazios. Portanto, a energia de Fermi F é a energia máxima dos elétrons à temperatura de zero absoluto.

Quando $T > 0$, para o valor de energia $E = F$, temos $f = 0,5$ e deste modo, o nível de Fermi é o nível de energia cuja probabilidade de que esteja ocupado, a uma temperatura $T > 0$, é igual a 0,5. O número de elétrons que migram para estados com $E > F$, quando $T > 0$, é igual à quantidade de estados livres que se formam na região $E < F$ e assim, as áreas hachuradas na figura (III.1.1) são iguais entre si. A função de Fermi-Dirac para buracos é análoga à função distribuição para elétrons.

Com os estados distribuídos nos limites permitidos de energia, o número de elétrons na banda de condução com energia num intervalo dE é igual ao produto do número de estados nesse intervalo $g(E)d(E)$ e a probabilidade de ocupação desses estados por elétrons $f(E)$. Assim, o número total de elétrons n na banda de condução é

$$n = \int_{E_c}^{\infty} f(E)g(E)dE \quad (\text{III.1.3})$$

onde E_c é o valor da energia no bordo da banda de condução e $g(E)$ é a densidade de estados permitidos¹⁹ dada por

$$g(E) = 4\pi \left(\frac{2m^*}{h^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \quad (\text{III.1.4})$$

Substituindo (III.1.1) e (III.1.4) em (III.1.3), temos

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi(2m^*/h^2)^{3/2}(E - E_c)^{1/2}dE}{1 + e^{(E-F)/k_B T}} \quad (\text{III.1.5})$$

Medindo-se a energia a partir do bordo da banda de condução ($E_c = 0$) e desde que o nível de Fermi reduzido $\eta = F/k_B T$ e a energia reduzida $\varepsilon = E/k_B T$, então

$$n = 4\pi \left(\frac{2m^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2}}{1 + e^{\varepsilon - \eta}} d\varepsilon \quad (\text{III.1.6})$$

ou,

$$n = N_c \mathcal{F}_{+1/2}(\eta) \quad (\text{III.1.7})$$

onde

$$N_c = 4\pi \left(\frac{2m^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (\text{III.1.8})$$

é a densidade efetiva de estados na banda de condução e $\mathcal{F}_{+1/2}(\eta)$ é da forma

$$\mathcal{F}_j(\eta) = \frac{1}{\Gamma(1+j)} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^j}{1 + e^{\varepsilon - \eta}} d\varepsilon \quad (\text{III.1.9})$$

que é conhecida como integral de Fermi de índice j . No caso de um semiconductor completamente não degenerado ($\eta \ll 0$), teríamos

$$\mathcal{F}_{+1/2}(\eta) = \frac{2}{\pi^{1/2}} e^{\eta} \quad (\text{III.1.10})$$

de modo que o número total de elétrons é, então

$$n = \frac{2}{\pi^{1/2}} N_c e^{\eta} \tag{III.1.11}$$

e consequentemente, o valor n/N_c , a menos da constante $2/\pi^{1/2}$, dá o valor da distribuição de Maxwell-Boltzmann $f = e^{\eta}$, o qual dá o grau de ocupação do nível E_c no limite clássico. Assim, N_c é equivalente à densidade de estados possíveis na banda de condução de um semiconductor completamente não degenerado. Desenvolvimento analogo pode ser feito para estatística de buracos.

2 - Semicondutores Dominados por Níveis de Impureza:

Consideremos um semiconductor que contém impureza doadora monovalente de concentração N_D . Aos elétrons de impureza correspondem o nível de energia E_D abaixo da banda de condução (fig. III.2.1.a). Se a concentração de elétrons no nível doador é n_D , então N_D^+ átomos doadores estão ionizados, de modo que

$$N_D^+ = N_D - n_D \tag{III.2.1}$$

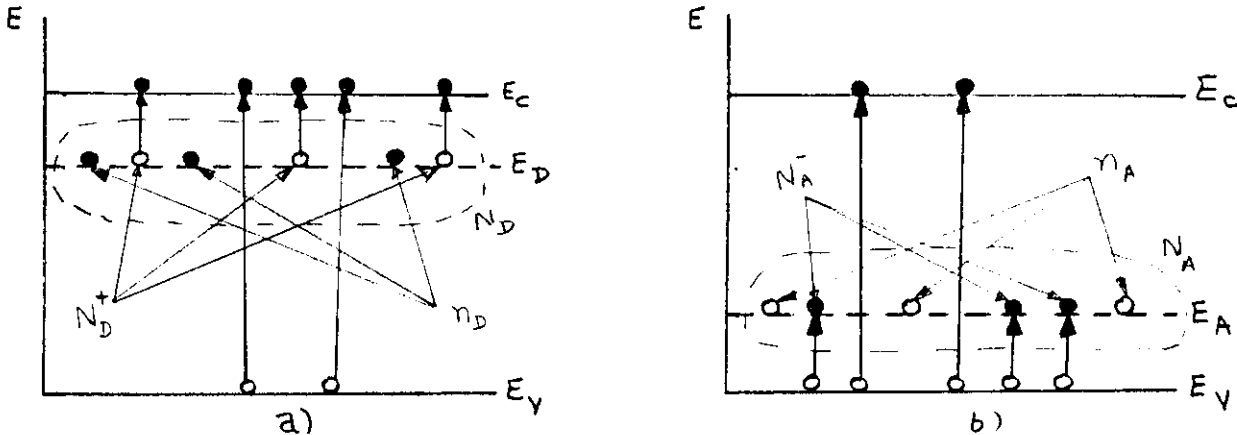


figura III.2.1: Semiconductor a) tipo n e b) tipo p

Da formulação de Fermi-Dirac, é esperado que

$$\frac{N_D^+}{n_D} = \frac{1}{e^{(E_D + F)/k_B T}} \quad (\text{III.2.2})$$

e que

$$n_D = \frac{N_D}{1 + e^{-(E_D + F)/k_B T}} \quad (\text{III.2.3})$$

A função distribuição de Fermi-Dirac para o nível de impurezas

$$f(E_D) = \frac{1}{1 + e^{(E_D - F)/k_B T}} \quad (\text{III.2.4})$$

dá a probabilidade de preenchimento do nível doador, no qual, pelo Princípio de Exclusão de Pauli, poder-se-ia ter dois elétrons com spins opostos. Porém, uma vez que a impureza é monovalente, o estado neutro de impureza tem duas vezes mais peso estatístico²⁰, caracterizado pelos níveis de energia coincidentes, em comparação com o estado ionizado. Assim, as equações (III.2.2) e (III.2.3) devem ser reformuladas.

$$\frac{N_D^+}{n_D} = \frac{1}{2 e^{(E_D + F)/k_B T}} \quad (\text{III.2.5})$$

e

$$n_D = \frac{N_D}{1 + 1/2 e^{-(E_D + F)/k_B T}} \quad (\text{III.2.6})$$

No caso geral, o fator 2 que multiplica a exponencial da equação (III.2.5) pode ser escrito como g e é conhecido como o fator de degenerescência do spin do nível de impureza²⁵.

Raciocínio análogo serve para semicondutores com nível de impureza aceitadora (fig.III.2.1.b).

Ainda no exemplo anterior, consideremos agora mais um nível de impureza monovalente aceitador de concentração N_A , de modo que $N_D \gg N_A$ (material tipo n). Então, a densidade de impureza doadora ionizada é

$$N_D^+ \cong n + N_A \quad (\text{III.2.7})$$

onde n é a concentração líquida de portadores, e a densidade de doadores neutros é

$$n_D = N_D - N_D^+ = N_D - N_A - n \quad (\text{III.2.8})$$

Então, a relação N_D^+/n_D fica

$$\frac{N_D^+}{n_D} = \frac{n + N_A}{N_D - N_A - n} = g^{-1} e^{-(E_D - F)/k_B T}$$

e usando-se a relação (III.1.11), ficamos com

$$\frac{N_D^+}{n_D} = g^{-1} e^{-E_D/k_B T} \frac{N_C}{n} \quad (\text{III.2.9})$$

ou

$$\frac{n(n + N_A)}{N_D - N_A - n} = \frac{N_C}{\xi} e^{-E_D/k_B T} \quad (\text{III.2.10})$$

Para baixas temperaturas²⁶, temos $N_A \gg n$ e $N_D - N_A \gg n$ e a expressão (III.2.10) fica

$$\frac{n + N_A}{N_D - N_A} = \frac{N_C}{\xi} e^{-E_D/k_B T} \quad (\text{III.2.11})$$

Portanto,

$$n \cong \frac{N_D - N_A}{N_A} \frac{N_C}{\xi} e^{-E_D/k_B T} \quad (\text{III.2.12})$$

que é uma relação da forma²⁷

$$n = A T^{3/2} e^{-E_D/k_B T} \quad (\text{III.2.13})$$

onde A é uma constante. Assim, o coeficiente angular da curva $\log(n T^{-3/2})$ por $1/T$ permite calcular a energia de ionização E_D do nível doador. Analogamente, podemos fazer a mesma análise para $N_A \gg N_D$ (material tipo p).

A densidade total de impurezas ionizadas N_I é dada por

$$N_I = N_D^+ + N_A^- \quad (\text{III.2.14})$$

onde N_A^- é a densidade de impurezas aceitadoras ionizadas. Mesmo a temperaturas muito baixas (4,2 K), podemos afirmar que no material tipo n todas as impurezas aceitadoras já se encontram ionizadas e, portanto,

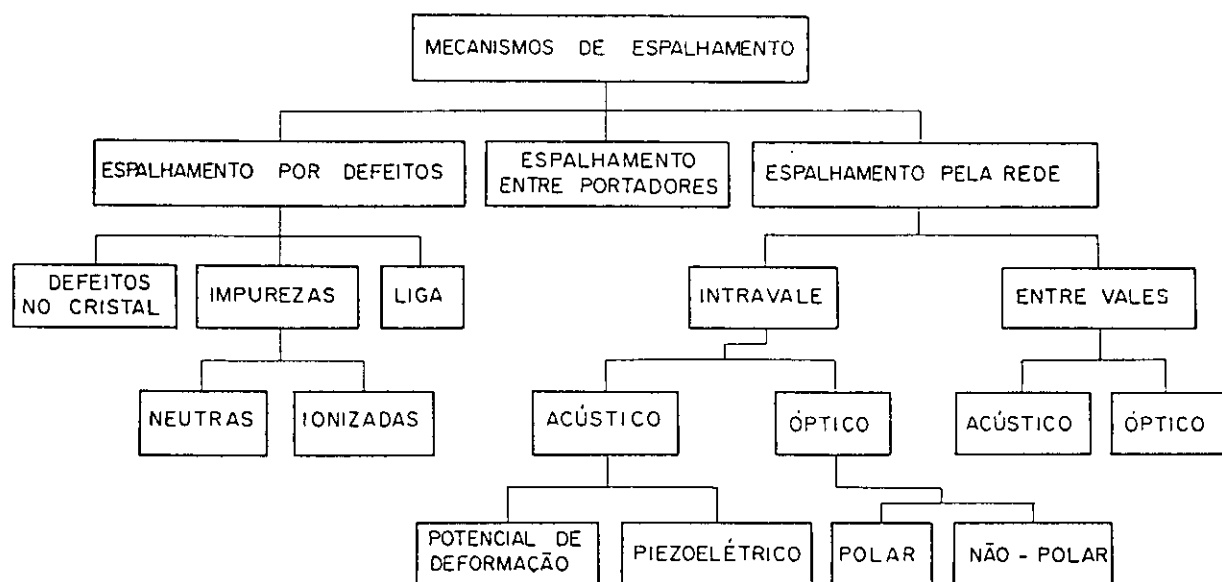
$$N_A = N_A^- \quad (\text{III.2.15})$$

Então, de (III.2.7) e (III.2.14), podemos escrever que

$$N_I = n + 2N_A \quad (\text{III.2.16})$$

1 - Introdução:

Portadores transitando através de um cristal numa temperatura acima do zero absoluto têm sua mobilidade limitada por vários mecanismos de espalhamento. Tais mecanismos advêm das colisões dos portadores com centros espalhadores que podem ser átomos de impurezas (ionizadas e neutras), átomos da rede, vibrações térmicas (acústicas e ópticas), e outros obstáculos. O esquema IV.1.1 dá uma melhor visualização dos mecanismos.



esquema IV.1.1: Mecanismos de Espalhamento

Normalmente, todos esses mecanismos acabam se sobrepondo, embora possam, em primeira aproximação, ser considerados independentes (Regra de Matthiessen²⁸). Assim, cada um deles pode ser analisado separadamente de maneira a se obter a probabilidade $W(\vec{k}, \vec{k}')$ por unidade de tempo de um elétron de energia E e momento $\hbar\vec{k}$ ser espalhado para um novo estado E' e $\hbar\vec{k}'$ dada pela Regra de Ouro da mecânica quântica²⁸. Esta probabilidade é dada por

$$W(\vec{k}, \vec{k}') = -\frac{2\pi}{h} |M(\vec{k}, \vec{k}')|^2 \delta(E - E') \quad (\text{IV.1.1})$$

onde a função delta de Dirac $\delta(E - E')$ satisfaz a conservação de energia e $M(\vec{k}, \vec{k}')$ é o elemento de matriz para transição dada por

$$M(\vec{k}, \vec{k}') = \int \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) U \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) dV \quad (\text{IV.1.2})$$

onde $\psi(\vec{k})$ e $\psi(\vec{k}')$ representam as funções de onda dos estados inicial e final e V é o volume do cristal. Um dos problemas principais é determinar a interação U que causa a transição. Para espalhamento elástico isotrópico no qual E é função de $|\vec{k}| = k$ somente e $|M(\vec{k}, \vec{k}')|^2$ depende somente de $|\vec{k}|$ e do ângulo θ entre $\vec{k}$ e $\vec{k}'$, é conveniente expressar o espalhamento em termos da seção de choque σ_s do centro espalhador e que está relacionada ao tempo de relaxação (eq. II.3.3) por²⁹

$$\frac{1}{\tau} = N v \sigma_s \quad (\text{IV.1.3})$$

onde N é a densidade de centros espalhadores e v é a velocidade da partícula espalhada. A seção de choque σ_s é calculada por integração sobre o ângulo sólido $d\Omega$ e dada por

$$\sigma_s = 2\pi \int_0^\pi \sigma_s(\theta) (1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta \quad (\text{IV.1.4})$$

onde $\sigma_s(\theta)$ é a seção de choque diferencial dada por²⁶

$$\sigma_s(\theta) = \left\{ \frac{m^* v}{2\pi \hbar^2} |M(\vec{k}, \vec{k}')| \right\}^2 \quad (\text{IV.1.5})$$

Para quase todos os mecanismos mencionados acima, a energia E não é muito alterada num simples evento. Para espalhamento por impurezas ionizadas, isso é estritamente verdade, enquanto que para espalhamento pelo potencial de deformação acustica, isso é apenas uma aproximação; contudo, para fônons ópticos, tal afirmação não corresponde à realidade como veremos adiante ao tratarmos com este modo de espalhamento.

De qualquer modo, o método de aproximação do tempo de relaxação, isto é, o método de resolução da equação de Boltzmann através da determinação de um tempo de relaxação, tem sido usado com sucesso na maioria dos semicondutores e as dificuldades mencionadas são contornáveis como veremos a seguir.

A partir de dados experimentais da mobilidade Hall μ_H , calculamos a mobilidade média (ou efetiva) μ , estimando-se um fator de correção, isto é, o fator de Hall r_H (eq. II.6.16). Se a regra de Matthiessen é válida²⁶, então

$$\frac{1}{\mu} = \sum_i \frac{1}{\mu_i} \quad (\text{IV.1.6})$$

onde μ_i é a mobilidade limitada pelo mecanismo de espalhamento i . A seguir postulamos que³⁰

$$\frac{1}{r_H \mu} \equiv \frac{1}{\mu_H} = \sum_i \frac{1}{\mu_{H_i}} \equiv \sum_i \frac{1}{r_{H_i} \mu_i} \quad (IV.1.7)$$

onde μ_{H_i} é a mobilidade de Hall e r_{H_i} é o fator de Hall correspondentes ao mecanismo i . A adequação da expressão (IV.1.7) pode ser vista da seguinte forma:

- Se apenas um único mecanismo de espalhamento i estiver presente, esta equação é perfeitamente correta pois $r_H \mu = r_{H_i} \mu_i$;
- Como teremos sempre um mecanismo predominante dentre os demais e, como tais mecanismos são independentes entre si, então a equação (IV.1.7) é razoável.

Os modos de espalhamento que veremos agora são apenas os mais relevantes entre os que constam no esquema IV.1.1, sendo que os demais podem ser estudados através de farta literatura se se fizerem necessários.

2 - Espalhamento por Impurezas:

- Ionizadas:

Vejamos, então, como se dá a limitação da mobilidade de portadores devida às impurezas ionizadas. Um átomo de impureza ionizado age como um centro coulombiano e o problema do movimento do portador no campo é análogo ao espalhamento de Rutherford. Então, pode-se calcular o tempo de relaxação para esse modo de espalhamento usando a fórmula de Rutherford para a seção de choque efetiva³¹

$$\sigma_s(\theta) = \frac{e^2}{(2\epsilon m^* v^2)^2} \operatorname{cosec}^4(\theta/2) \quad (IV.2.1)$$

onde "e" é a carga da partícula, ϵ é a permissividade do material e θ é o ângulo de espalhamento. Contudo, a integração sobre todo o espaço de $\sigma_s(\theta)$, isto é,

$$\sigma_s = \frac{m^* \Omega}{h^2} \int_0^\pi |M(\vec{k}, \vec{k}')|^2 (1 - \cos\theta) \sin\theta d\theta \quad (\text{IV.2.2})$$

onde Ω é o volume do cristal e $M(\vec{k}, \vec{k}')$, o elemento da matriz do potencial espalhador entre os estados $\vec{k}$ e $\vec{k}'$, diverge para ângulos pequenos.

Uma teoria mais rigorosa foi desenvolvida por Brooks e Herring³², considerando que os portadores livres podem blindar o potencial do centro espalhador. Resta, então, encontrar a distância na qual se pode truncar o potencial do íon de impureza parcialmente blindado. Para tanto, deve-se resolver a equação de Poisson

$$\nabla^2 \phi = \frac{4\pi}{K_s} e(n' - n) \quad (\text{IV.2.3})$$

onde ϕ é o potencial de Yukawa, K_s é a constante dielétrica estática, n' é a concentração de portadores na rede não perturbada e n é a concentração na rede perturbada.

A solução de (IV.2.3) será³³

$$\phi = \frac{e^2}{K_s r} e^{-r/L} \quad (\text{IV.2.4})$$

onde o comprimento de blindagem L para um grau arbitrário de degenerescência do sistema é dado pela equação

$$\frac{1}{L^2} = \frac{16\pi^2 e^2 (2m^*)^{3/2} (k_B T)^{1/2}}{h^3 K_s} \mathcal{F}_{-1/2}(\eta) \quad (\text{IV.2.5})$$

onde $\mathcal{F}_{-1/2}(\eta)$ é a integral de Fermi de índice $-1/2$. Desse modo, a seção de choque total fica

$$\sigma_s = \frac{2\pi e^2}{K_s^2 (m^* v^2)^2} g(\bar{b}) \quad (\text{IV.2.6})$$

onde v é a velocidade média das cargas

$$g(\bar{b}) = \ln(1 + \bar{b}) - \frac{\bar{b}}{1 + \bar{b}} \quad (\text{IV.2.7})$$

onde

$$\bar{b} = \frac{8 m^* k_B T L^2}{h^2} \bar{\varepsilon} \quad (\text{IV.2.8})$$

, Se $\bar{\varepsilon}$ é entendida como a energia reduzida média das partículas

espalhadas, então, podemos defini-la como²⁴

$$\bar{\epsilon} = \frac{\mathcal{F}_{+3/2}(\eta)}{\mathcal{F}_{+1/2}(\eta)} \quad (\text{IV.2.9})$$

onde $\mathcal{F}_{+3/2}(\eta)$ é a integral de Fermi de índice +3/2.

A validade das aproximações discutidas acima estão ligadas à aproximação de Born³⁴, onde considera-se que a impureza ionizada esteja fortemente blindada, de modo que o potencial espalhador possa ser tratado como uma perturbação. Então, o comprimento de blindagem L (eq. IV.2.5) deve ser grande o que implica em que $b \gg 1$ (eq. IV.2.8) e, portanto, $g(\bar{b})$ pode ser considerada constante (eq. IV.2.7).

Pela expressão (IV.1.3), podemos escrever²⁶

$$\frac{1}{\tau_{II}} = N_I \cdot v \cdot 2\pi \left[\frac{e^2}{K_s^2 \epsilon k_B T} \right]^2 g(\bar{b}) \quad (\text{IV.2.10})$$

ou, escrevendo de outra maneira,

$$\tau_{II} = 16 \cdot 2^{1/2} \pi \frac{K_s^2 (m^*)^{1/2}}{N_I e^4} g(\bar{b}) (K_B T)^{3/2} \epsilon^{3/2} \quad (\text{IV.2.11})$$

onde ϵ é a energia reduzida e N_I é a densidade de impurezas ionizadas

dada pela equação (III.2.14).

Para o cálculo do fator de Hall r_{II} , devemos calcular $\langle \tau_{II} \rangle$ e $\langle \tau_{II}^2 \rangle$, onde

$$\langle \tau_{II} \rangle = \frac{\int_0^\infty \frac{\tau_{II}(\varepsilon) \varepsilon^{3/2} e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon}{\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2} e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon} \tag{IV.2.12}$$

$$\langle \tau_{II}^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty \frac{\tau_{II}^2(\varepsilon) \varepsilon^{3/2} e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon}{\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2} e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon} \tag{IV.2.13}$$

Dessa forma, usando a equação (II.6.13), temos

$$r_{II} = \frac{\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2} e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon}{\left[\int_0^\infty \frac{\varepsilon^3 e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon \right]^2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2} e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon \tag{IV.2.14}$$

A curva de r_{II} em função do nível de Fermi reduzido η é mostrada na figura (IV.2.1).

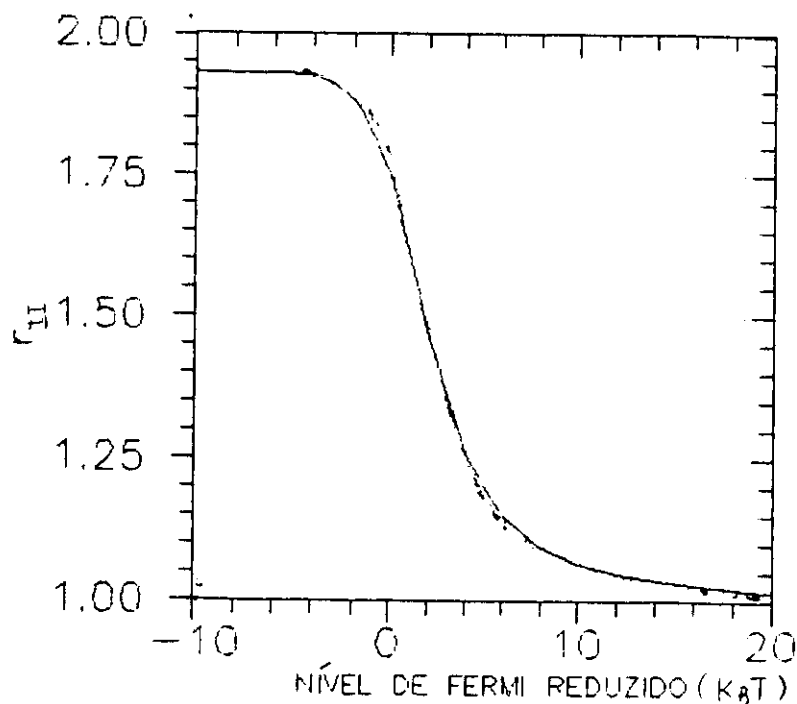


figura IV.2.1: Fator de Hall r_{II} em função do nível de Fermi reduzido η

A mobilidade limitada pelo modo de espalhamento por impurezas ionizadas, a partir da expressão (II.6.15) e usando-se (IV.2.11) e (IV.2.12) é

$$\mu_{II} = \frac{16\pi^{1/2} K_s^2 (k_B T)^{3/2}}{3 (m^*)^{1/2} N_I e^3 \mathcal{F}_{+1/2}(\eta)} \int_0^\infty \frac{e^{\epsilon} e^{\epsilon-\eta}}{(1 + e^{\epsilon-\eta})^2} d\epsilon \quad (IV.2.15)$$

- Neutras:

A dispersão de portadores por átomos de impurezas neutras se manifesta mais fracamente que por átomos de impurezas ionizadas. Contudo, para baixas temperaturas, a densidade de impurezas ionizadas pode ser menor que a densidade de impurezas neutras (amostras relativamente não compensadas), e esse mecanismo pode se tornar importante. Nesse caso, o espalhamento se dará de duas maneiras:

- Mediante choque elástico direto;
- Mediante substituição do elétron incidente pelo elétron da impureza neutra.

A determinação do tempo de relaxação é complexa e dada por³⁵

$$\tau_N = \frac{(m^*)^2 e^2}{20 h^3 K_s N_N} \quad (\text{IV.2.16})$$

onde $N_N = N_D - N_A - n$ é a concentração de impurezas neutras. Deve-se notar que não há uma dependência da energia do elétron, de modo que a mobilidade limitada por esse mecanismo,

$$\mu_N = \frac{e^3 m^*}{20 h^3 K_s N_N} \quad (\text{IV.2.17})$$

independe, por sua vez, da temperatura.

Espalhamento por desordem no potencial da rede refere-se ao espalhamento presente em ligas devido à distribuição aleatória dos átomos no composto. Esse espalhamento acrescenta-se aos mecanismos presentes em materiais que sejam uma liga.

Há, basicamente, dois problemas para se estabelecer um modelo para esse mecanismo:

- Deve-se criar um modelo que considere a quantidade de ordem ou desordem presente na liga. Isso pode ser feito usando os parâmetros de ordem de Warren-Cowley³⁶ que descrevem algum grau de ordenação a partir de uma liga completamente aleatória para uma liga altamente ordenada. Tal procedimento é possível se for considerado que os compostos podem estabelecer um arranjo energético favorável a uma ordenação local.

- Deve-se escolher um potencial de interação ou de espalhamento associado a cada átomo da rede. Vários modelos de potencial têm sido considerados, sendo que o que parece mais apropriado para o espalhamento pela liga é o modelo de Mott³⁷.

Nordheim³⁸ lidou com um cristal perfeitamente aleatório, introduzindo o conceito do cristal virtual. O cristal real foi considerado como sendo constituído de um arranjo de potenciais perfeitamente periódico (cristal virtual) e de uma parte aleatória devida à diferença entre o potencial do cristal real e o potencial do cristal virtual, num dado ponto da rede. Essa parte aleatória foi usada como um potencial de perturbação que permite calcular o elemento da matriz para transições entre os estados eletrônicos.

Hall³⁹ reformulou a aproximação de Nordheim calculando a resistividade real para uma liga binária e usou os parâmetros de ordem de Warren-Cowley. A função de onda de Schrödinger de um elétron na liga binária foi escrita com o potencial $U(\vec{r})$ dividido em duas partes:

- o potencial virtual:

$$U_1(\vec{r}) = \sum_{\vec{r}'} C_A U_A(\vec{r} - \vec{r}') + C_B U_B(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{IV.3.1})$$

onde $\vec{r}'$ é um vetor qualquer da rede. C_i e U_i são, respectivamente, a concentração relativa e o potencial associado do átomo i .

- o potencial aleatório:

$$\begin{aligned} U_2(\vec{r}) &= \Delta U(\vec{r} - \vec{r}') \\ &= \sum_{\vec{r}'} C_{\vec{r}'} [U_A(\vec{r} - \vec{r}') - U_B(\vec{r} - \vec{r}')] \end{aligned} \quad (\text{IV.3.2})$$

onde $C_{\vec{r}'}$ é uma função definida somente no ponto $\vec{r}'$. Esta função foi introduzida por Flinn³⁶ numa discussão sobre ordenamento local em ligas binárias. Foi mostrado por Flinn que

$$\sum_{\vec{r}'} C_{\vec{r}'} = 0 \quad (\text{IV.3.3})$$

e que

$$\sum_{\vec{r}''} C_{\vec{r}''} C_{\vec{r}'' + \vec{r}'} = N C_A (1 - C_A) \alpha_{\vec{r}'} \quad (\text{IV.3.4})$$

Assim,

$$C_{\vec{r}'} = \begin{cases} 1 - C_A & \text{para um átomo A em } \vec{r}' \\ - C_A & \text{para um átomo B em } \vec{r}' \end{cases} \quad (\text{IV.3.5})$$

onde $\alpha_{\vec{r}'}$ é o parâmetro de ordem de Warren-Cowley e N é o número de centros espalhadores por unidade de volume.

A seguir, Asch e Hall⁴⁰ incluíram na proposta inicial de Hall a mudança do parâmetro de rede com a liga e a mudança do número efetivo de elétrons de condução por átomo com a composição. Então, mostraram que o quadrado da matriz de transição entre os estados $\vec{k}$ e $\vec{k}'$ é dado por

$$|M(\vec{k}, \vec{k}')|^2 = \sum_{\vec{r}''}^N \alpha_{\vec{r}''} J(\vec{k}, \vec{k}', \vec{r}'') \quad (\text{IV.3.6})$$

onde

$$\alpha_{\vec{r}''} = \sum_{\vec{r}''} \frac{C_{\vec{r}''} C_{\vec{r}'' + \vec{r}''}}{N C_A C_B} \quad (\text{IV.3.7})$$

e

$$J(\vec{k}, \vec{k}', \vec{r}'') = N C_A C_B \left| \frac{1}{N \Omega} \int \psi_{\vec{k}}^* \Delta U(\vec{r} - \vec{r}'') \psi_{\vec{k}'} d\vec{r} \right| \quad (\text{IV.3.8})$$

onde $\Delta U(\vec{r} - \vec{r}'')$ é o potencial aleatório devido ao efeito da liga e Ω é o volume da célula unitária. Em termos das funções de onda de Bloch, a equação (IV.3.8) fica

$$J(\vec{k}, \vec{k}', \vec{r}'') = N C_A C_B e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}''} \left| \frac{1}{N \Omega} \int u_{\vec{k}'}^* u_{\vec{k}} U(\vec{r} - \vec{r}'') e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} d\vec{r} \right|^2 \quad (\text{IV.3.9})$$

Mott considerou uma rede onde as funções de onda dos elétrons $\psi_{\vec{k}} = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}}$ são soluções da equação de Schrödinger, e os elétrons da banda de condução tem energia

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*} + E_0 \quad (\text{IV.3.10})$$

onde E_0 é a energia no bordo da banda de condução. Quando um átomo com um potencial é substituído, a função de onda na célula de Wigner-Seitz será $\psi_{\vec{k}} = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r})}$ e a energia será

$$E(\vec{k}') = \frac{\hbar^2 k'^2}{2 m^*} + E_0 \quad (\text{IV.3.11})$$

Assim, um elétron viajando de uma região normal para uma região alterada experimentará uma mudança no potencial. Esse problema é análogo ao espalhamento de um feixe de elétrons por um potencial da forma

$$\Delta U = \begin{cases} E_0 - E & \text{para } r \leq r_0 \\ 0 & \text{para } r > r_0 \end{cases} \quad (\text{IV.3.12})$$

onde r_0 é o raio da célula de Wigner-Seitz (assumida esférica). Este poço de potencial é usado⁴¹ para deduzir-se, por meio da primeira aproximação de Born, uma expressão para o tempo de relaxação τ_{AS} para este mecanismo de espalhamento e definida por:

$$\tau_{AS} = \frac{\pi \hbar^4 \varepsilon^{-1/2}}{2^{1/2} N C (1 - C) (\Delta E)^2 (m^*)^{3/2} (k T)^{1/2} a^3} \quad (\text{IV.3.13})$$

onde $C_A(1 - C_A)(\Delta E)^2 = (\Delta U)^2$ e a é o parâmetro de rede.

Na estrutura III-V, que é do nosso interesse, $N=4/\Omega$ é o número de átomos por célula unitária e $\Omega = a^3/4$. Portanto,

$$r_{AS} = \frac{16\pi \hbar^+ \varepsilon^{-1/2}}{2^{1/2} (\Delta U)^2 (m^*)^{3/2} (k_B T)^{1/2} a^3} \quad (IV.3.14)$$

O fator de Hall r_{AS} (fig. IV.3.1) para esse modo de espalhamento é

$$r_{AS} = \frac{\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon}{\left(\int_0^\infty \frac{\varepsilon e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon \right)^2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2} e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon \quad (IV.3.15)$$

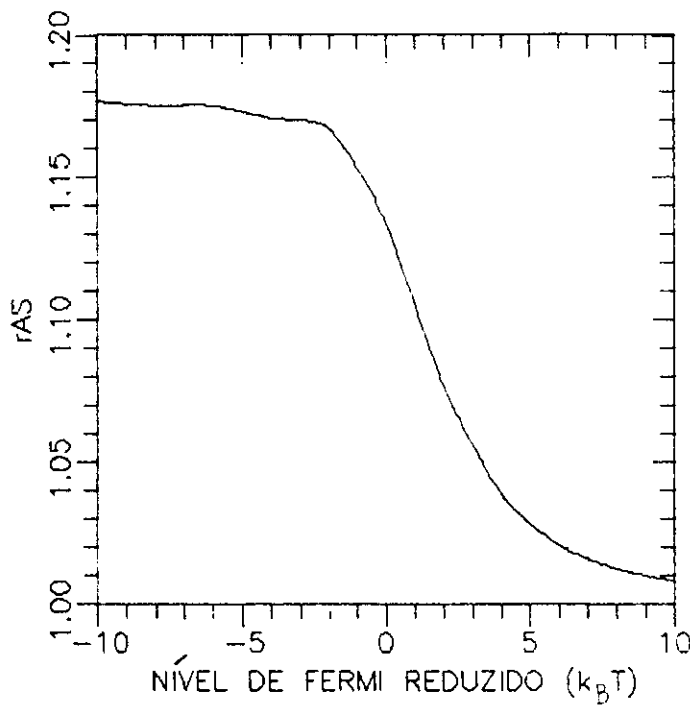


figura IV.3.1: Fator de Hall r_{AS} em função do nível de Fermi reduzido η

e, usando (II.6.15) e (IV.3.14), obtemos a expressão da mobilidade

$$\mu_{AS} = 16 \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{e h^4}{(m^*)^{5/2} (\Delta U)^2 (k_B T)^{1/2} a^3 \mathcal{F}_{+1/2}(\eta)} \int_0^{\omega_c} \frac{e^{\varepsilon - \eta}}{(1 + e^{\varepsilon - \eta})^2} d\varepsilon \quad (IV.3.16)$$

Resta, ainda, a determinação do potencial ΔU da equação (IV.3.21). Cálculos de ΔU têm sido realizados conforme cada uma das três teorias:

- Através da diferença das bandas proibidas (ΔU_{EG}) entre os compostos⁴²;
- Através das diferenças das afinidades eletrônicas (ΔU_{EA}) entre os compostos⁴³;
- Através da diferença das eletronegatividades (ΔU_{EN}) entre os compostos⁴⁴.

A escolha de uma das teorias é feita, habitualmente, obtendo-se ΔU através das medidas das mobilidades. Como, porém, às vezes lida-se com parâmetros não totalmente conhecidos, a confirmação teórica pode ficar comprometida ou muito difícil.

4 - Espalhamento por Oscilações Térmicas da Rede:

A interação do elétron (ou buraco) com as vibrações térmicas da rede se produzem de duas maneiras:

- O elétron "transmite" parte da sua energia para a rede, de modo que uma oscilação determinada ω_q incrementa seu número quântico em uma unidade, ou seja, forma-se um fônon de energia $\hbar\omega_q$ e momento $\hbar\vec{q}$. $\hbar\vec{q}$ é o momento que a rede adquire devido ao choque com os elétrons;
- O elétron "recebe" parte de sua energia da rede; nesse caso, um fônon de energia $\hbar\omega_q$ e momento $\hbar\vec{q}$ desaparece.

Em ambos os casos, é possível que mais de um fônon

surja ou desapareça, mas a probabilidade de tal evento é muito pequena.

Posto que o número de fônons N_q depende da temperatura, as distâncias entre os elétrons nas oscilações térmicas da rede também têm a mesma dependência.

Se, inicialmente, o elétron tem valor de onda $\vec{k}$ e energia $E(\vec{k})$, e após o choque com o fônon com vetor de onda $\vec{q}$ e energia $\hbar\omega_q$, o elétron passa a ter vetor de onda $\vec{k}'$ e energia $E'(\vec{k}')$, pelas leis da conservação da energia e momento, podemos afirmar que

$$E'(\vec{k}') = E(\vec{k}) \pm \hbar\omega_q \quad (\text{IV.4.1})$$

$$\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \quad (\text{IV.4.2})$$

onde $\pm$ indicam a absorção ou emissão do fônon. Portanto, o número de fônons no estado final é

$$N_q' = N_q \pm 1 \quad (\text{IV.4.3})$$

O espalhamento do portador poderá ser elástico ou inelástico conforme seja a variação relativa da energia δ do elétron numa colisão, isto é

$$\delta = \frac{E' - E}{E} = \frac{\Delta E}{E} \quad (\text{IV.4.4})$$

- Espalhamento por Fônons Acústicos:

No caso de espalhamento isotrópico e elástico.

$$\delta \ll 1$$

e este é o caso dos fônons acústicos.

Seja um semiconductor com esquema energetico mostrado na figura (IV.4.1), onde a é o parâmetro de rede sem deformação e $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$.

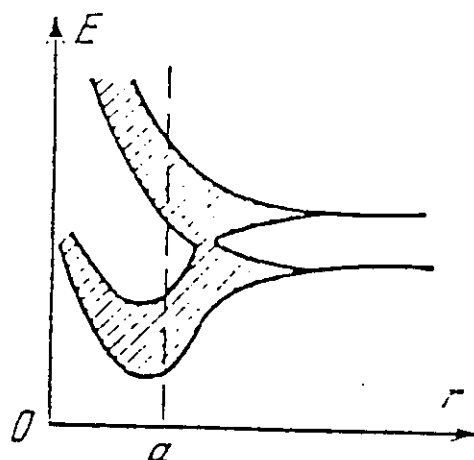


figura IV.4.1: Estrutura das bandas como função do parâmetro de rede a

A passagem de ondas transversais através do cristal não provoca variação no seu volume mas as ondas longitudinais, por sua vez, provocam deformações de compressão e expansão e, portanto, modificam o volume do cristal.

Ao comprimir-se, ocorre uma variação do parâmetro de rede (fig. IV.4.1) e, como consequência, as posições da banda de energia são alteradas (fig. IV.4.2).

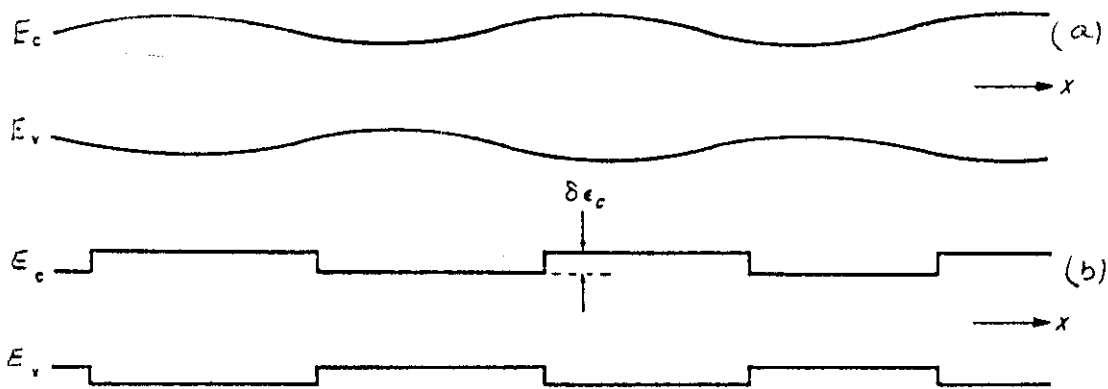


figura IV.4.2: a) Variação senoidal das bandas de energia de condução E_c e valência E_v causadas pelas forças de compressão e expansão associadas com as vibrações térmicas longitudinais.

b) Forma aproximada de a) para facilitar os calculos.

Esse efeito causa uma variação local com as energias associadas aos bordos das bandas de valência E_v e condução E_c (fig. IV.4.2.a), mostradas de maneira mais simplificada na figura (IV.4.2.b).

A quantidade δE_c pode ser relacionada à deformação de compressão ou expansão $\delta V/V_0$, numa primeira aproximação, por uma relação linear da forma

$$\delta E_c = \Xi_c \frac{\delta V}{V_0} \quad (\text{IV.4.5})$$

onde Ξ_c é a constante do potencial de deformação, que representa a mudança do bordo da banda de condução por unidade de dilatação, e V_0 é o elemento de volume do cristal.

O elemento de matriz para esse tipo de espalhamento é dado por⁴⁵

$$|M(\vec{k}, \vec{k}')|^2 = \frac{\Xi_c^2 k_B T}{2 V_0 \rho v_A} \quad (\text{IV.4.6})$$

onde ρ é a densidade de massa e v_A é a velocidade média do som no material, calculada pela expressão

$$\rho v_A^2 = C_l \quad (IV.4.7)$$

onde a constante elástica longitudinal média C_l é dada por

$$C_l = \frac{1}{5} (3C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}) \quad (IV.4.8)$$

e C_{ij} são as constantes elásticas⁴⁶.

Das equações (IV.1.3) e (IV.2.2), temos que o tempo de relaxação para espalhamento pelo potencial de deformação acústico e

$$\tau_{AC} = \frac{\pi \rho \hbar^4 v_A^2}{2^{1/2} \Xi_C^2 (m^*)^{3/2} (k_B T)^{3/2}} e^{-1/2} \quad (IV.4.9)$$

Usando as equações (II.6.13), (IV.3.14) e (IV.4.9), pode ser mostrado que os fatores de Hall para espalhamento por fônons acústicos r_{AC} e por desordem no potencial da rede r_{AS} são iguais, isto é,

$$r_{AC} = r_{AS} \quad (IV.4.10)$$

Através das expressões (II.6.15) e (IV.4.9), a mobilidade é dada por

$$\mu_{AC} = \frac{2^{1/2} \pi^{1/2} e \rho^{1/2} h^2 v_A}{\Xi_c^2 (m^*)^{5/2} (k_B T)^{3/2} \mathcal{F}_{+1/2}(\eta)} \int_0^\infty \frac{e e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon \quad (IV.4.11)$$

- Espalhamento Piezoelétrico:

Além do espalhamento citado acima, ocorre também um outro denominado espalhamento piezoelétrico devido aos campos elétricos longitudinais.

Arlt e Quadflieg⁴⁷ mediram e_{14} , a constante piezoelétrica, para uma variedade de materiais e propuseram que a piezoeletricidade é devida aos mecanismos de:

- polarização iônica;
- mudança na ionicidade ;
- polarização eletrônica.

Um tempo de relaxação para o espalhamento piezoelétrico, já que este também é elástico, foi calculado por Meijer e Polder⁴⁸, sobre a estrutura da blenda de zinco⁴⁹ e é dada por

$$\tau_{PZ} = \frac{2 \cdot 2^{1/2} \pi h^2 \rho v_P^2}{(e e_{14}/K_S)^2 (m^* k_B T)^{1/2}} \varepsilon^{1/2} \quad (IV.4.12)$$

onde "e" é a carga do portador e v_P é a velocidade do som que inclui os modos acústicos transversos e longitudinal, calculado através da expressão

$$\frac{1}{\rho v_p^2} = \frac{1}{35} \left(\frac{12}{C_l} + \frac{16}{C_t} \right) \quad (\text{IV.4.13})$$

onde a constante elástica transversal média C_t é dada por

$$C_t = \frac{1}{5} (C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (\text{IV.4.14})$$

e K_s é a constante dielétrica estática.

Usando as equações (II.6.13) e (II.6.15), temos, para o fator de Hall r_{pz} para esse modo de espalhamento (fig.IV.4.3).

$$r_{pz} = \frac{\int_0^\infty \frac{\varepsilon^{5/2} e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon}{\left(\int_0^\infty \frac{\varepsilon^2 e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon \right)^2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2} e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon \quad (\text{IV.4.15})$$

e para a mobilidade

$$\mu_{pz} = \frac{4 (2\pi)^{1/2} h^2 \rho v_p^2 K_s^2}{(m^*)^{3/2} e e_{14}^2 (k_B T)^{1/2} \mathcal{F}_{1/2}(\eta)} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^2 e^{\varepsilon-\eta}}{(1 + e^{\varepsilon-\eta})^2} d\varepsilon \quad (\text{IV.4.16})$$

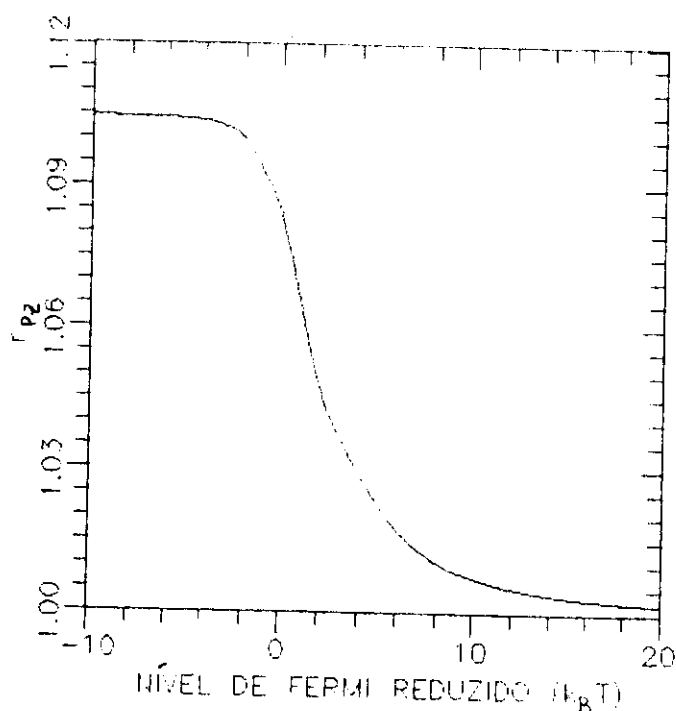


figura IV.4.3: Fator de Hall r_H em função do nível de Fermi reduzido n

5 - Espalhamento por Fônons Ópticos Polares:

Em semicondutores polares, nos quais o enlace entre os átomos tem parcialmente um caráter iônico, os elétrons de condução interagem mais fortemente com as oscilações ópticas do que com as acústicas. Posto que nas oscilações, os deslocamentos dos íons na célula ocorrem em direções opostas, as cargas contrárias originam campos elétricos que se movem pelo cristal na forma de ondas planas. As oscilações ópticas com grandes comprimentos de onda chamam-se ondas de polarização e a interação dos portadores de cargas com as ondas de polarização sofrem dispersão. Nesse caso, as oscilações ópticas longitudinais se dispersam mais rapidamente que as transversais.

Este tipo de espalhamento difere basicamente do espalhamento por fônons acústicos com respeito ao valor absoluto de ΔE (eq. IV.4.4) que representa a mudança da energia do portador durante o espalhamento. Para interações com fônons ópticos,

$$\Delta E = \pm \hbar \omega_0 \quad (\text{IV.5.1})$$

pode ser muito maior ou muito menor que E , dependendo da temperatura (ω_0 é a frequência máxima do ramo óptico longitudinal). Esse fato impede que uma definição rigorosa para um tempo de relaxação para esse modo de espalhamento seja estabelecida.

Contudo, para altas e baixas temperaturas, a dispersão pode ser considerada elástica, como veremos adiante, e para temperaturas intermediárias, o uso de um método variacional⁵⁰ para resolver a equação de Boltzmann se faz necessário.

Para altas temperaturas, quando $T \gg \theta_D$, onde θ_D é a temperatura do fônon óptico longitudinal (temperatura de Debye⁵¹), ou ainda, quando a energia do fônon $\hbar\omega_0$ é muito menor que a energia do elétron $k_B T$, então

$$\delta_{op} = \frac{\Delta E}{E} \ll 1 \quad (IV.5.2)$$

e a dispersão pode ser considerada elástica. Nesse caso, na maioria dos elétrons, a variação da energia pela absorção ou emissão dos fônons será insignificante. Assim, pode-se introduzir o tempo de relaxação.

Para baixas temperaturas, quando $T \ll \theta_D$, a maioria dos elétrons, cuja energia é $E \ll \hbar\omega_0$, pode absorver somente fônons ópticos. Devido a essa absorção, a energia do elétron varia de $\hbar\omega_0$ até $2\hbar\omega_0$ e portanto, ΔE é grande embora o tempo, durante o qual a energia é máxima, seja pequeno. Na verdade, pode-se dizer que o elétron absorve e emite tão rapidamente o fônon que sua energia permanece inalterada. Novamente, aqui a dispersão pode ser considerada elástica e a definição de um tempo de relaxação é justificável.

Como já foi dito, é possível recorrer-se a métodos numéricos a fim de se calcular a mobilidade polar. Os primeiros a fazerem-no foram Howarth e Sondheimer⁵⁰ usando o método variacional baseado no princípio de Kohler⁵². Um cálculo mais apurado da mobilidade em semicondutores polares feito por Fortini, Diguet e Lugand⁵³. Eles usaram o método matricial para resolver a equação de Boltzmann com bons resultados.

Novos cálculos foram feitos posteriormente por Hammar e Magnusson⁵⁴ usando um método iterativo previamente descrito

por Rode⁵⁴. A mobilidade limitada por fônons ópticos polares μ_{PO} é normalmente escrita na forma

$$\mu_{PO} = \frac{4}{3} \left[\frac{2 T}{\pi k_B} \right]^{1/2} \frac{h^2}{(m^*)^{3/2} e \theta_D} \left[\frac{K_s K_d}{K_s - K_d} \right] (e^z - 1) G(z)$$

(IV.5.3)

onde K_s é a constante dielétrica estática, K_d é a constante dieletrica dinâmica.

$$z = \frac{\theta_D}{T}$$

(IV.5.4)

e $G(z)$ é um fator de correção. Os resultados dos cálculos feito por Hammar e Magnusson⁵⁴ para o fator de Hall $r_{PO}(z)$ e $G(z)$ estão apresentados na tabela (IV.5.1) e também nas figuras (IV.5.1) e (IV.5.2).

z	G(z)	r(z)	z	G(z)	r(z)
0.2	0.8957	1.093	2.5	1.041	1.267
0.4	0.8102	1.065	3.0	1.194	1.222
0.6	0.7524	1.044	3.5	1.353	1.172
0.7	0.7340	1.042	4.0	1.495	1.129
0.8	0.7219	1.048	4.5	1.621	1.095
1.0	0.7146	1.083	5.0	1.733	1.069
1.2	0.7263	1.135	6.0	1.919	1.037
1.4	0.7528	1.190	7.0	2.065	1.021
1.6	0.7909	1.234	8.0	2.188	1.013
1.8	0.8378	1.264	9.0	2.296	1.008
2.0	0.8911	1.278	10.0	2.394	1.006
2.2	0.9490	1.280	11.0	2.487	1.005

tabela IV.5.1: Valores de r_{PO} e $G(z)$ em função de z ⁵⁴.

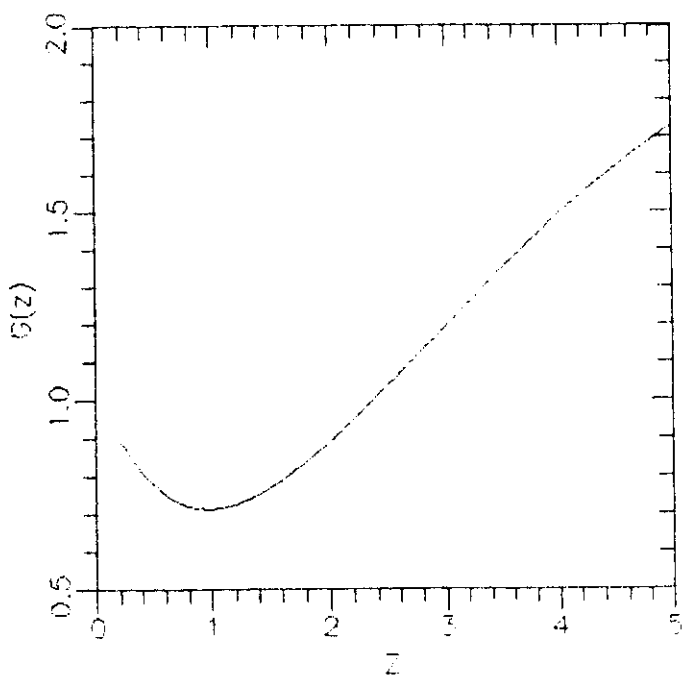


figura IV.5.1: Fator de Hall r_{PO} em função de z .

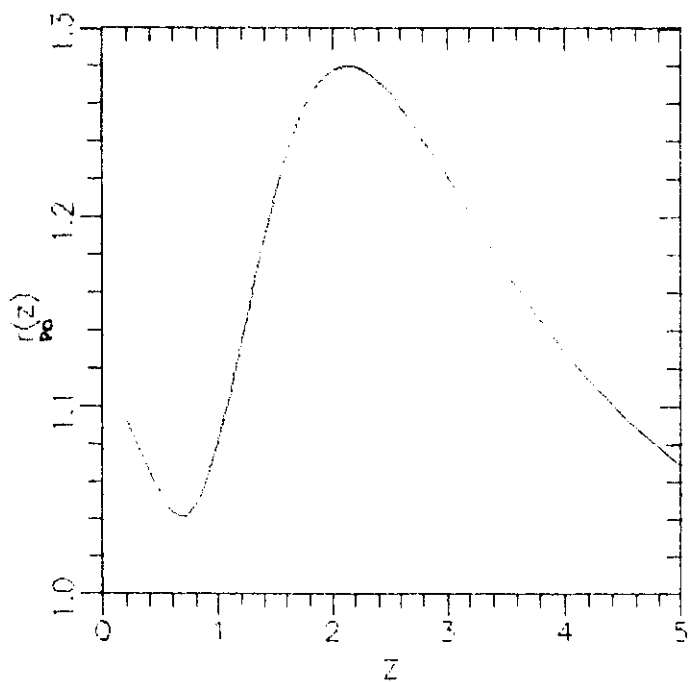


figura IV.5.2: Fator de correção $G(z)$ em função de z .

1 - Conjunto de Equipamentos:

O conjunto de equipamentos para caracterização elétrica a baixas temperaturas está esquematizado na figura V.1.1.

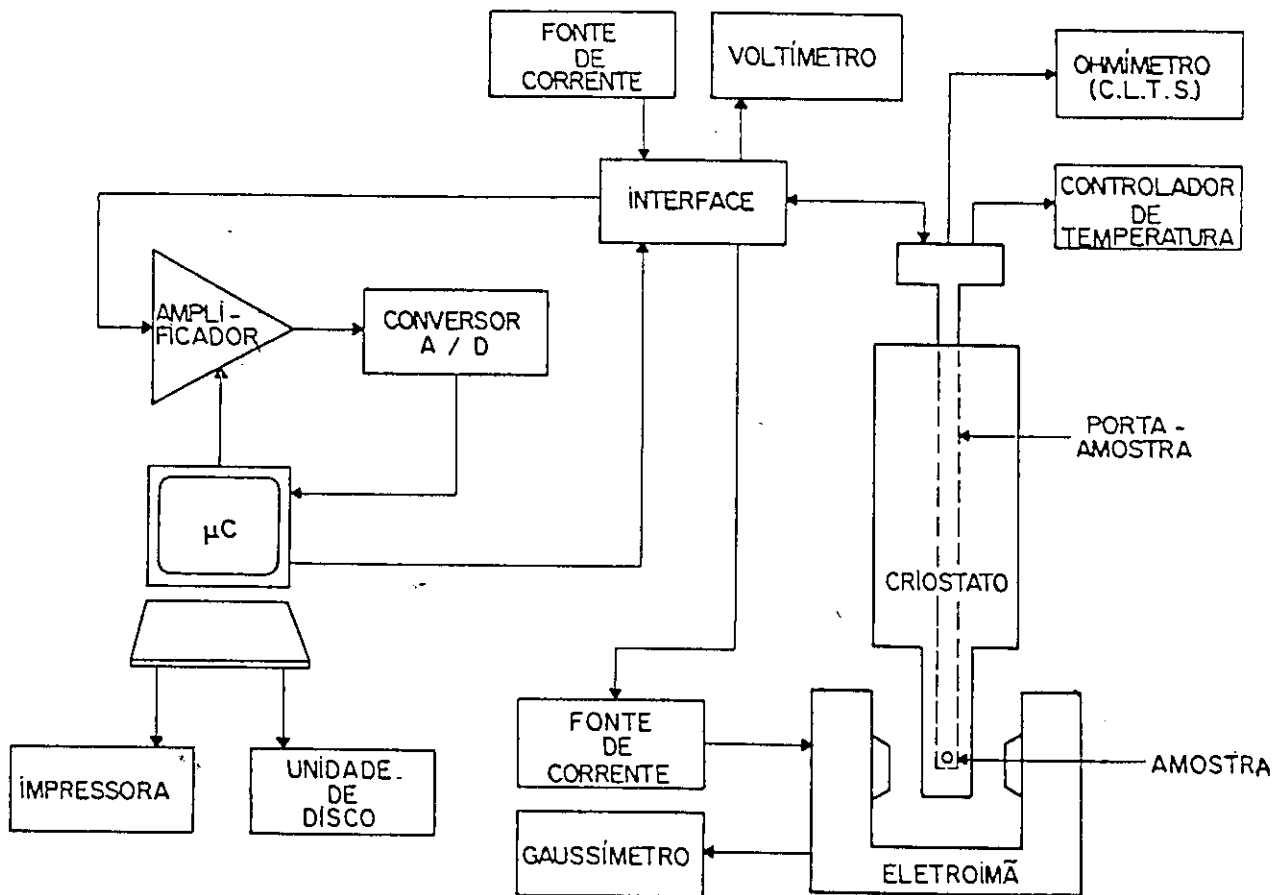


figura V.1.1: Conjunto de equipamentos utilizados no experimento.

Exceto os processos de aquecimento e resfriamento da amostra, todos os demais passos da medição e aquisição de dados são

realizados pelo programa HALL.006 através de um microcomputador. O programa HALL.006 será abordado em detalhes no item 3 deste capítulo. O microcomputador é um MSX - Expert de 8 bits e os resultados são gravados em disquetes e/ou impressora.

O conversor A/D (analógico-digital) informa ao microcomputador o valor da tensão medida na amostra e o voltímetro (Hewlett-Packard, modelo 3490A), neste caso, serve apenas para simples monitoramento.

A interface possui um conjunto de relés que permite ao microcomputador, através da combinação de chaveamentos:

- selecionar os contatos da amostra pelos quais passará corrente elétrica;
- selecionar os contatos entre os quais será medida a tensão;
- ligar, desligar e inverter o sentido da corrente;
- ligar, desligar e inverter o sentido do campo magnético.

Tanto o conversor quanto a interface foram desenvolvidos pelo engenheiro Clóvis E. M. de Oliveira do L.P.D..

A fonte de corrente (Keithley, modelo 225) fornece corrente contínua entre 1 nA e 100 mA e normalmente, está acoplada a um amperímetro, também para simples monitoramento.

O eletroímã (Varian, modelo 191) fornece campo magnético até 10 kG e é calibrado com o auxílio de um gaussímetro (Engro, modelo GME 100).

Para determinação da temperatura da amostra, faz-se uso de um controlador de temperatura (Air Liquide, modelo RD 4300) e de um ohmímetro (Keithley, modelo 191).

O controlador de temperatura está ligado a uma resistência de aquecimento (50 Ω) e a um diodo de GaAs (Lake Shore Cryotronics, Inc., modelo TG-100KL), ambos fixados junto à amostra (fig. V.1.2).

O ohmímetro está ligado a um sensor de temperatura C.L.T.S. (Cryogenic Linear Temperature Sensor, Micro-Measurements, Raleigh, North Carolina, EUA). O sensor é calibrado para três temperaturas : 4.2K (221,83 Ω), 77K (240,85 Ω) e 300K (292,36 Ω). Para uma temperatura intermediária, considera-se que esta varie linearmente de 4.2K a 77K e de 77K a 300K.

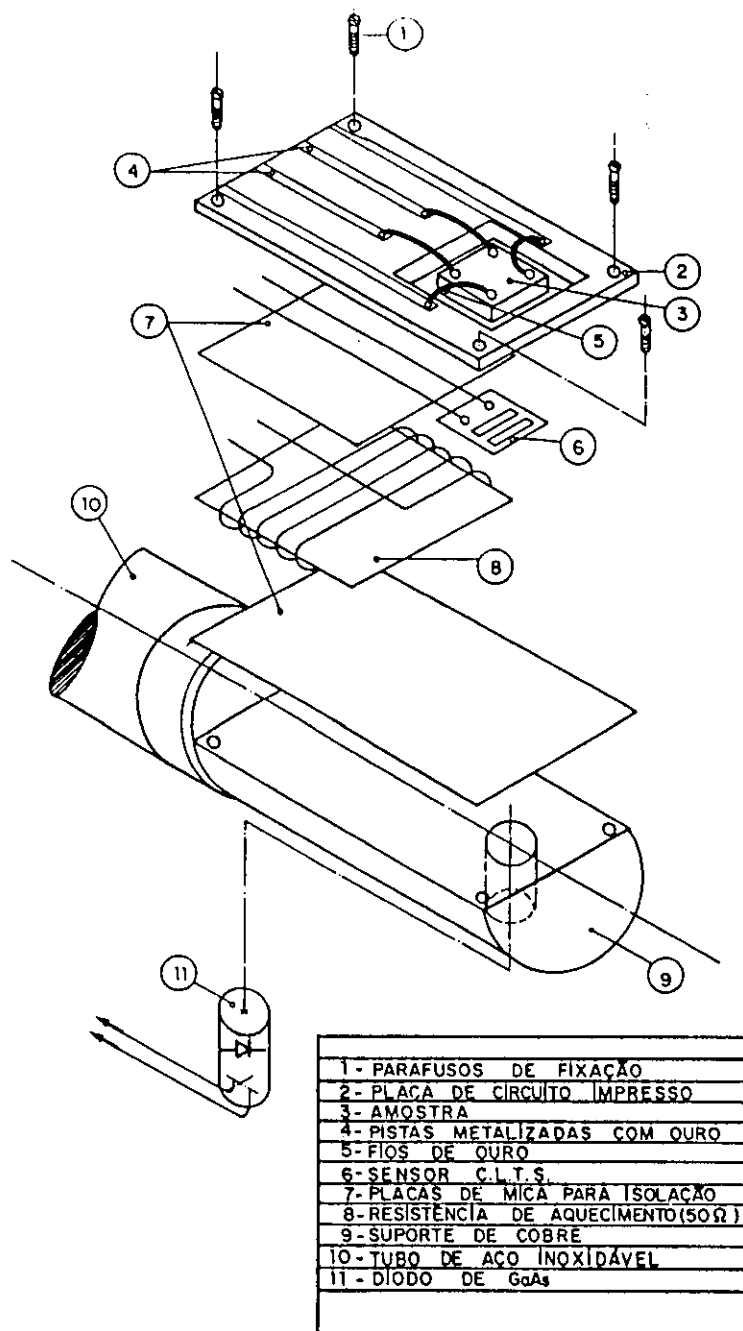


figura V.1.2: Detalhe da extremidade inferior do porta-amostra.

O porta-amostra consiste de um tubo de aço inoxidável de 1200 mm de comprimento e 15 mm de diâmetro, sendo que na extremidade inferior, esse diâmetro se reduz a 13 mm. Na parte superior do tubo encontra-se uma base com conectores tipo BNC e tipo borne (fêmea) para acoplarem-se à interface e ao ohmmetro, respectivamente. Há também um conector lateral para acoplamento do

controlador de temperatura. A fiação passa pelo interior do tubo ate a extremidade inferior do porta-amostra.

O criostato de aço inox (L'Air Liquide, modelo 2406), o sistema de vácuo e a linha para recuperação do gás Hélio (gás-He) são mostrados na figura V.1.3.

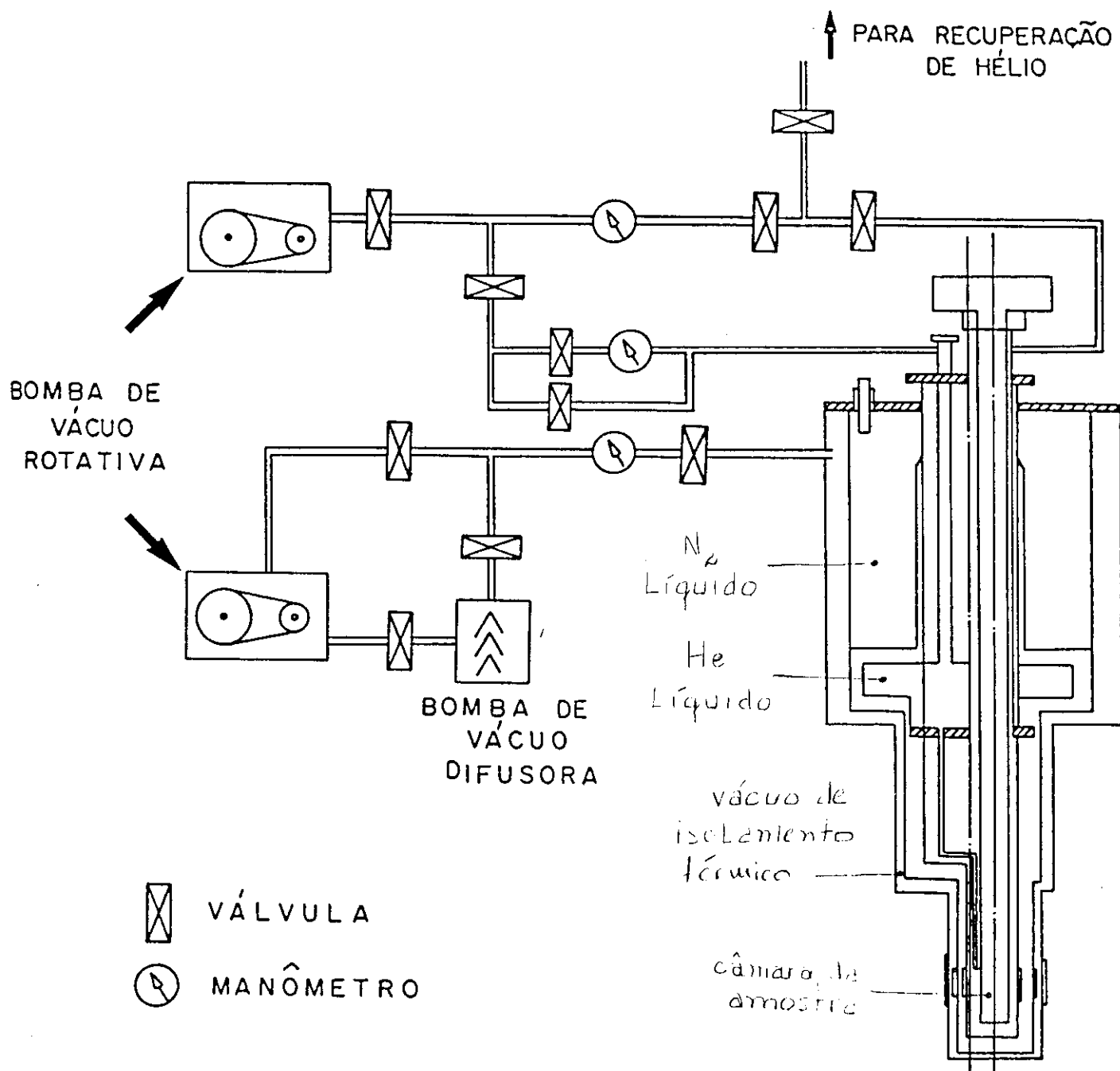


figura V.1.3: O criostato e o sistema de vácuo.

Podemos dividir o criostato em quatro regiões:

- reservatório de Nitrogênio líquido;
- reservatório de Hélio líquido;
- câmaras de isolamento térmico;
- câmara da amostra.

As câmaras de isolamento térmico ligam-se ao sistema de vácuo e estão permanentemente sendo evacuadas ($\approx 10^{-6}$ torr). O reservatório de Nitrogênio líquido (77K) tem função de pré-resfriar o reservatório de Hélio líquido (4.2K) e a câmara da amostra, através de trocadores de calor de alumínio. O reservatório de Hélio líquido está conectado à câmara da amostra através de um tubo capilar pelo qual escorre o Hélio líquido até a amostra.

Tanto o reservatório de Hélio líquido quanto a câmara da amostra estão ligados à linha de recuperação de gás-He que evapora na transferência do Hélio líquido para o criostato e durante as medidas. Na saída do reservatório do Hélio líquido para a linha de recuperação há uma válvula e um manômetro que permite pressurizar o reservatório (até 1 kg/cm^2) sempre que se deseja que o Hélio líquido desça pelo capilar até a câmara da amostra. A linha de recuperação deve ser previamente evacuada ($\approx 10^{-2}$ torr) para evitar contaminação do gás Hélio com ar.

2 - Amostras de $n\text{-In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As/InP:Fe}$:

As amostras utilizadas são camadas de $n\text{-In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ crescidas por L.P.E. (Liquid Phase Epitaxy) na direção [100] sobre substratos semi-isolantes de InP dopados com Fe. As espessuras das camadas⁵⁵ variam de $0.96 \mu\text{m}$ a $7.3 \mu\text{m}$ e as dos substratos são sempre de 1.0 mm. As amostras são de formatos retangular ou quadrado com comprimento variando entre 5 mm e 10 mm. Antes de receber os contatos, as amostras são previamente limpas com tricloroetileno, acetona, etanol, isopropanol, água deionizada e jato de gás- N_2 , nesta ordem. Os contatos são feitos com Índio, previamente limpo com HCl, água deionizada e jato de gás- N_2 . Fixamos pedaços de Índio sobre a camada da amostra sempre numa configuração ortogonal, ou seja, no caso de amostras retangulares, os contatos são feitos no meio de suas arestas e, no caso de amostras quadradas, os contatos são colocados nos cantos (fig. V.2.1). A seguir, o conjunto é recozido a 450°C sob

um fluxo de gás- N_2 por cerca de 5 minutos.

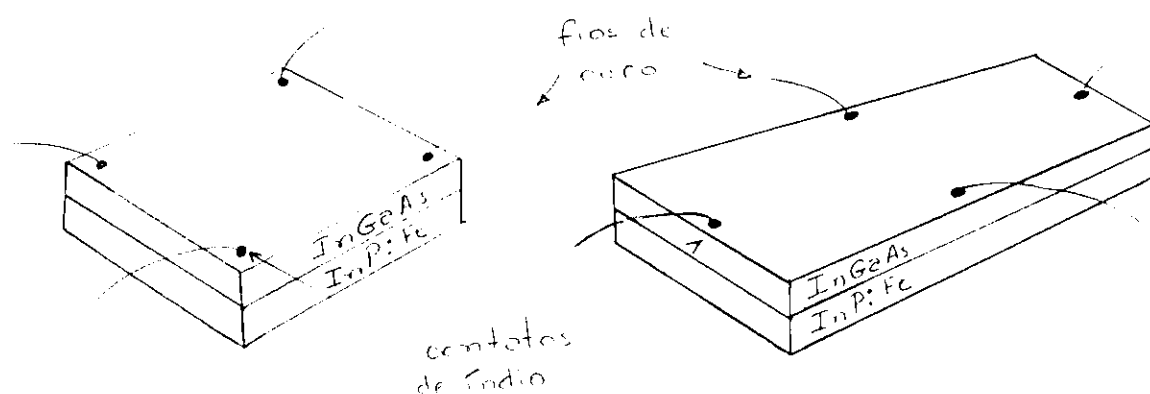


figura V.2.1: Detalhe da amostra de InGaAs/InP.

O Índio difunde-se na camada formando contatos ôhmicos de área não superior a 1% da superfície total da camada. A qualidade dos contatos é verificada variando-se o valor de uma corrente elétrica que passe por dois contatos e observando-se se a tensão entre esses dois contatos comporta-se conforme a Lei de Ohm. A conexão entre os contatos e o porta-amostra é feita por fios de ouro com espessura de 0,1 mm (fig. V.1.2).

O porta-amostra permite a fixação do material para sua posterior introdução no interior do criostato.

3 - O Programa HALL.006:

O programa HALL.006 (Apêndice II) que opera as medições foi elaborado em BASIC e é auto-explicativo. O algoritmo do programa segue o método de Van der Paw⁵⁶ e a cada temperatura escolhida, obtêm-se:

- | | |
|--------------------------------|---------------------------------|
| - medidas sem campo magnético: | resistividade ρ ; |
| - medidas com campo magnético: | coeficiente de Hall R_H ; |
| | densidade de portadores n_H ; |
| | mobilidade de Hall μ_H ; |

tipo da camada: p/n;

resistividade ρ (opcional).

A superfície da camada possui 4 contatos numerados de 1 a 4, sendo que faz-se passar uma determinada corrente I por um par desses contatos e mede-se a tensão V sobre o outro par (figura V.3.1).

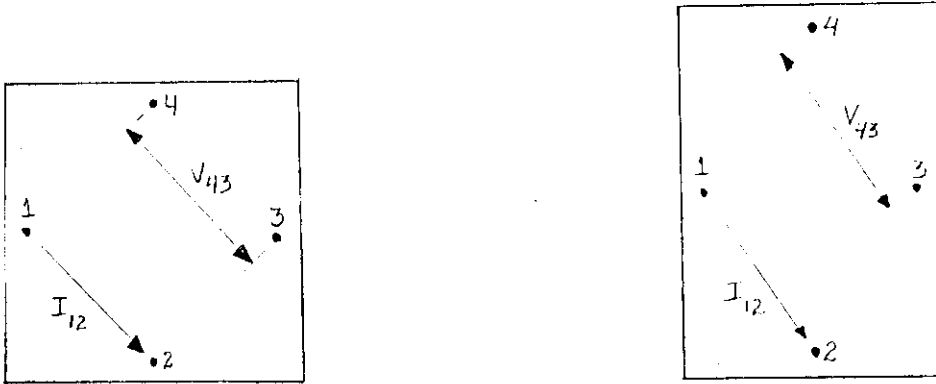


figura V.3.1: Superfície da camada com os contatos e indicação da corrente e da tensão para medida de resistividade.

Para o cálculo da resistividade ρ da amostra, passa-se corrente sempre entre dois contatos consecutivos e mede-se a tensão sobre os outros dois, alterando-se os pares de acordo com as combinações possíveis. Por exemplo:

- Passa-se a corrente I_{12} do contato 1 para o 2 e mede-se a tensão V_{43} entre os contatos 4 e 3. Ídem para o sentido inverso da corrente;
- Passa-se a corrente I_{23} do contato 2 para o 3 e mede-se a tensão V_{14} entre os contatos 1 e 4. Ídem, com a corrente invertida;
- e assim por diante.

Com os valores das correntes e tensões medidas, obtêm-se a resistividade ρ através de

$$\rho = \frac{1}{4} (\rho_i + \rho_{iv} + \rho_{iii} + \rho_{iiv}) \quad (V.3.1)$$

onde

$$\rho_v = \frac{\pi}{4 \ln 2} \left[\frac{|V_{43}|}{I_{12}} + \frac{|V_{43}|}{I_{21}} + \frac{|V_{14}|}{I_{23}} + \frac{|V_{14}|}{I_{32}} \right] . d . f \quad (V.3.2)$$

onde "d" é a espessura da camada e "f" é o fator de correção de Van der Paw dado pela curva na figura V.3.2⁵⁶. Analogamente, encontra-se ρ_{ii} , ρ_{iii} e ρ_{iv} .

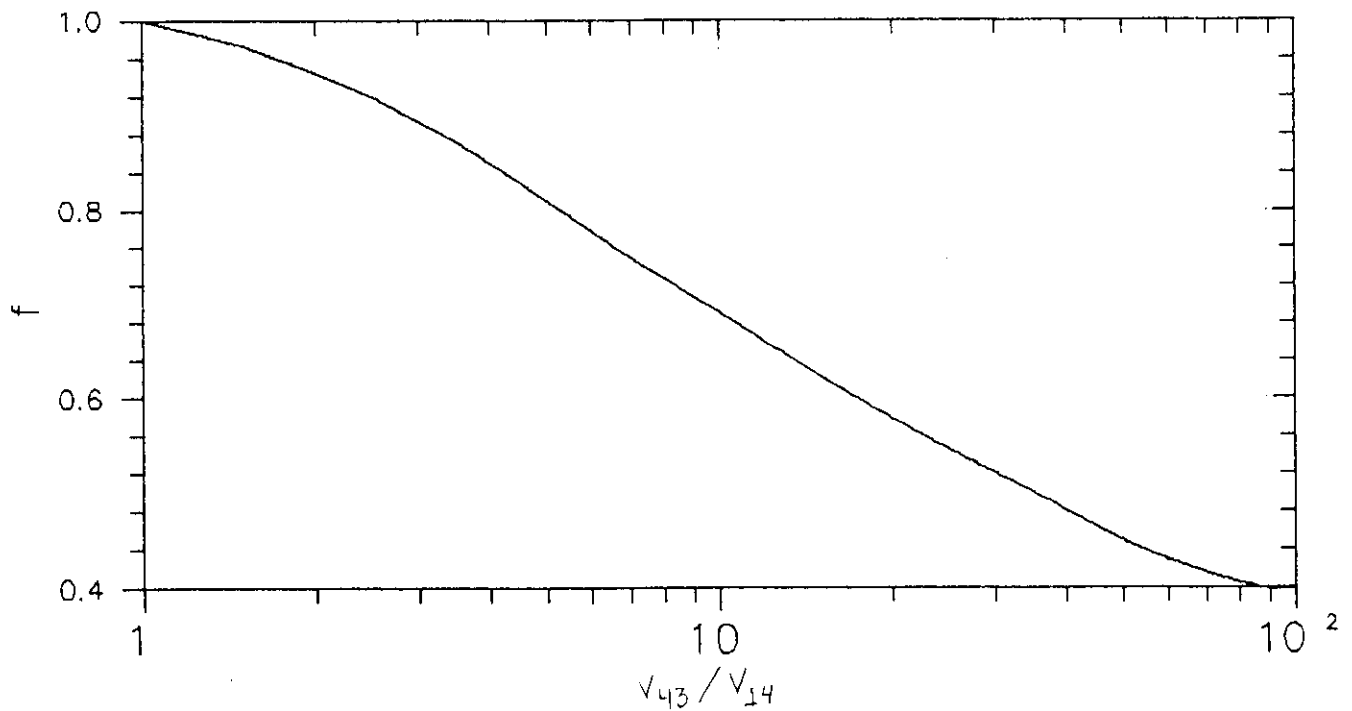


figura V.3.2: Fator de correção de Van de Paw.

Para medida do coeficiente de Hall R_H , agora na presença de um campo magnético B perpendicular à amostra, passa-se corrente I sempre entre dois contatos opostos e mede-se a tensão V entre os outros dois (figura V.3.3). Por exemplo:

- Passa-se a corrente I_{24} entre os contatos 2 e 4 e mede-se a tensão V_{13} entre os contatos 1 e 3;
- Ídem para todas as combinações de contatos, de sentido de corrente e de sentido de campo magnético.

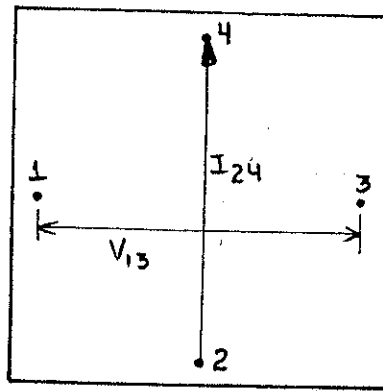


figura V.3.3: Superfície da camada com os contatos e indicação da corrente e da tensão para medida de efeito Hall.

Com os valores das correntes e tensões medidas, calcula-se o coeficiente de Hall R_H (eq. II.6.10) por²⁷:

$$R_H = \frac{1}{2} \left[R_{H_l} + R_{H_{ll}} \right] \quad (V.3.3)$$

onde

$$R_{H_l} = \left[\frac{V_{24}^{B^+} - V_{24}^{B^-}}{2 I_{13}} + \frac{V_{24}^{B^+} - V_{24}^{B^-}}{2 I_{31}} \right] \frac{d}{B} \quad (V.3.4)$$

Analogamente, encontra-se $R_{H_{ll}}$. B é o campo magnético (B^+ e B^- indicam campos em sentidos opostos) e "d" é a espessura da camada.

A densidade de portadores n_H é dada através da expressão (II.6.12)

$$n_H = \frac{1}{e \cdot R_H} \quad (V.3.5)$$

onde "e" é a carga do portador de carga e 1 é o valor assumido para o fator de Hall r_H ; a mobilidade de Hall μ_H (eq. II.5.6) vem de⁵⁷:

$$\mu_H = \frac{R_H}{\rho} \quad (V.3.6)$$

Como mantemos sempre a mesma posição da amostra em relação ao campo magnético, o tipo da camada está associado ao sinal de R_H :

$$\begin{cases} R_H < 0 : \text{tipo n;} \\ R_H > 0 : \text{tipo p.} \end{cases}$$

4 - Análise de Erros Experimentais:

Podemos generalizar a equação (V.3.2) do cálculo da resistividade ρ , a fim de facilitar nossos calculos, da seguinte forma:

$$\rho = \frac{\pi}{\ln 2} \frac{V_\rho}{I} \cdot d \quad (V.4.1)$$

onde "d" é a espessura da camada (medida com microscópio calibrado) e V_ρ e I são a tensão e a corrente médias de todas as combinações de contatos possíveis, conforme o procedimento indicado no item 3 deste capítulo.

Para a espessura "d", temos uma imprecisão $\Delta e/e$ de até 10 % no valor medido enquanto que a imprecisão no valor da tensão $\Delta V_\rho/V_\rho$ e no valor da corrente $\Delta I/I$ situa-se em 1 %.

O erro total relativo⁵⁸ no valor da resistividade é

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = \sqrt{\left(\frac{\Delta V}{V_{\rho}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta I}{I}\right)^2 + \left(\frac{\Delta d}{d}\right)^2} \quad (V.4.2)$$

Portanto, $\Delta \rho / \rho = 10.1 \%$.

Analogamente, a expressão (V.3.4) para cálculo do coeficiente de Hall R_H pode ser reescrita na forma

$$R_H = \frac{V_H}{I} \frac{d}{B} \quad (V.4.3)$$

onde "d" e I são a espessura da camada e a corrente média, respectivamente; V_H é a tensão de Hall média de todas as combinações de contatos e B é a intensidade deste campo. As imprecisões $\Delta V_H / V_H$ e $\Delta B / B$ são de cerca de 1 %, de modo que o erro no valor do coeficiente de Hall $\Delta R_H / R_H$ é

$$\frac{\Delta R_H}{R_H} = \sqrt{\left(\frac{\Delta V_H}{V_H}\right)^2 + \left(\frac{\Delta I}{I}\right)^2 + \left(\frac{\Delta d}{d}\right)^2} \quad (V.4.4)$$

Portanto, $\Delta R_H / R_H = 10.2 \%$.

A imprecisão no valor da densidade de portadores n_H (eq. V.3.5) é igual à imprecisão do coeficiente de Hall, isto é,

$$\frac{\Delta n_H}{n_H} = \frac{\Delta R_H}{R_H} \quad (V.4.5)$$

O valor da mobilidade de Hall μ_H (eq. V.3.6), por sua vez, apresenta erro total relativo

$$\frac{\Delta\mu_H}{\mu_H} = \sqrt{\left(\frac{\Delta R_H}{R_H}\right)^2 + \left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)^2} \quad (V.5.6)$$

Portanto, $\Delta\mu_H/\mu_H = 14.3 \%$.

A incerteza na leitura do valor da temperatura é de no máximo 3 K em torno de 50 K e de no máximo 4 K em torno de 150 K, segundo especificações do fabricante. Nas temperaturas usadas para calibrarmos o sensor C.L.T.S. (4.2 K, 77 K e 300 K), a imprecisão é de no máximo 0.01 %. Os valores, em ohms, correspondentes a 4.2 K e a 77 K, são obtidos mergulhando-se o próprio C.L.T.S. no hélio líquido e no nitrogênio líquido, respectivamente.

1 - Introdução:

Iremos, agora, lidar com os resultados das medidas de resistividade e de efeito Hall realizadas no intervalo de temperaturas de 4.2 K a 300 K feitas com as amostras de $n\text{-In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As/InP}$.

Para tanto, formulamos o programa MOBIL.FIT que fornece parâmetros físicos característicos do material, a partir do ajuste de curvas teóricas da variação da mobilidade de Hall com a temperatura com às obtidas experimentalmente.

Tais parâmetros são de grande valia para o conhecimento das propriedades elétricas do material que está sendo obtido.

2 - Resultados das Medidas de Resistividade e Efeito Hall:

Foram utilizadas quatro amostras de $n\text{-In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As/InP}$, assim denominadas: T.100, T.115, T.118 e T.120. As curvas de resistividade ρ , densidade de portadores de Hall n_H , e mobilidade de Hall μ_H , em função da temperatura, são apresentadas nas figuras VI.2.1, VI.2.2 e VI.2.3.

3 - Método de Análise da Mobilidade - O Programa MOBIL.FIT

Tendo-se obtido a curva da mobilidade de Hall μ_H em função da temperatura, estamos agora interessados em obter a mobilidade efetiva μ em função da temperatura.

No caso do InGaAs, apenas três modos de espalhamento são importantes na limitação da mobilidade entre 4.2K e 300K. São eles:

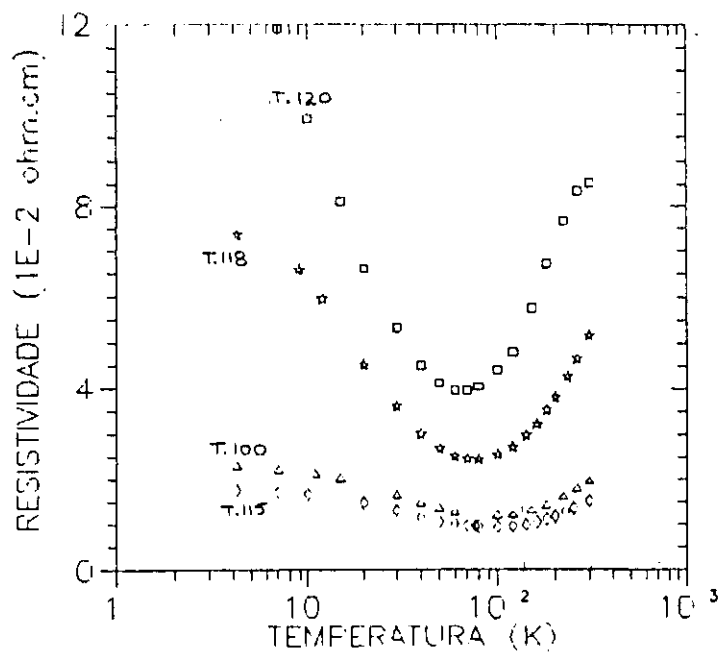


figura VI.2.1: Variação da resistividade ρ em função da temperatura.

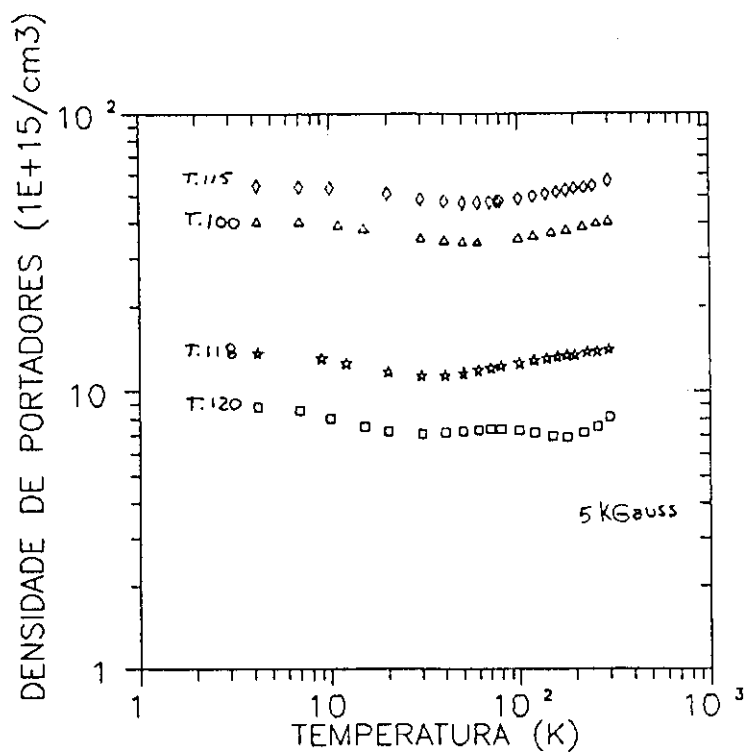


figura VI.2.2: Variação da densidade de portadores n_H com a temperatura.

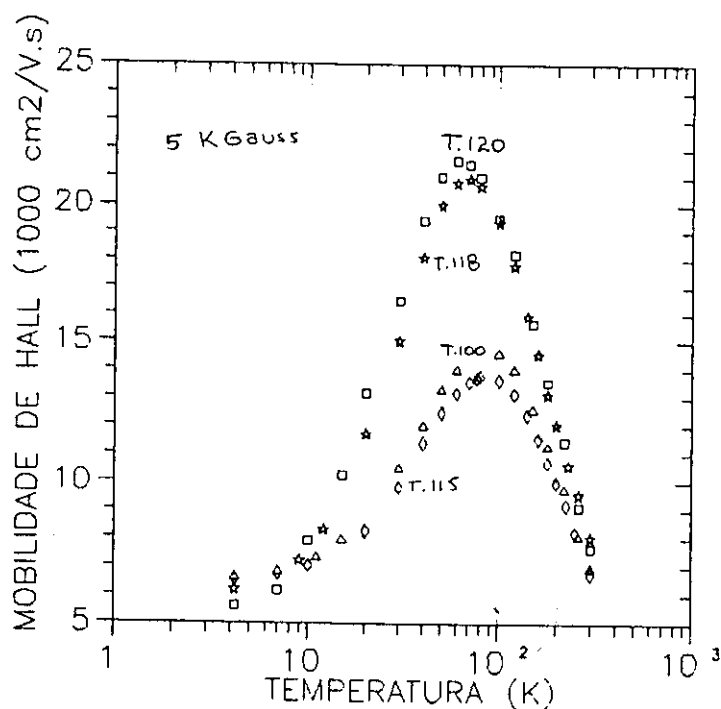


figura VI.2.3: Variação da mobilidade de Hall μ_H com a temperatura.

- espalhamento por impurezas ionizadas (II);
- espalhamento por desordem no potencial da rede (AS);
- espalhamento por fônons ópticos polares (PO).

Da Regra de Matthiessen (eq. IV.1.6):

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_{II}} + \frac{1}{\mu_{AS}} + \frac{1}{\mu_{PO}} \quad (VI.3.1)$$

e postulamos que (eq. IV.1.7):

$$\frac{1}{\mu_H} \equiv \frac{1}{\Gamma_H \mu} = \frac{1}{\Gamma_{II} \mu_{II}} + \frac{1}{\Gamma_{AS} \mu_{AS}} + \frac{1}{\Gamma_{PO} \mu_{PO}} \quad (VI.3.2)$$

onde r_{II} , r_{AS} e r_{PO} são os fatores de Hall e μ_{II} , μ_{AS} e μ_{PO} são as mobilidades específicas de cada modo de espalhamento, dados pelas expressões IV.2.14, IV.2.15, IV.3.20, IV.3.21, IV.5.3 e pela tabela IV.5.1.

O cálculo da mobilidade efetiva dependeria tão somente do nível de Fermi a cada temperatura. Ocorre, no entanto, que necessitamos saber ainda os valores da densidade de impurezas ionizadas N_I , do potencial de desordem na rede ΔU e da temperatura de Debye θ_D . Tais parâmetros serão obtidos, como já dissemos, a partir do ajuste de uma curva teórica da mobilidade de Hall com uma curva obtida experimentalmente utilizando-se o programa MOBIL.FIT (apêndice III).

O programa MOBIL.FIT está esquematizado na figura VI.3.1 e sua execução se dá através das seguintes etapas :

- ETAPAS 1, 2, 3 E 4: Tomando-se como primeiro valor da temperatura da amostra justamente a do Hélio líquido (4.2K), temos o valor da densidade de portadores de Hall n_H calculada a partir do valor experimental da constante de Hall R_H (eq V.3.5)

$$n_H = \frac{1}{e \cdot R_H} \quad (VI.3.3)$$

Através da expressão (eq. III.1.7), podemos obter um primeiro valor do nível de Fermi reduzido η ;

- ETAPA 5: A partir desta primeira estimativa de η , das equações IV.2.14 e IV.3.20 obtêm-se os fatores de Hall r_{II} e r_{AS} ;

- ETAPAS 6 e 7: A partir de um valor inicial da temperatura de Debye θ_D , de (IV.5.3) e da tabela (IV.5.1), obtêm-se os valores de μ_{PO} e r_{PO} , respectivamente;

- ETAPAS 8 E 9: A partir de um valor inicial do potencial de desordem na rede ΔU , através de (IV.3.21) obtêm-se o valor de μ_{AS} ;

- ETAPAS 10 E 11: A partir de um valor inicial da densidade de impurezas aceitadoras ionizadas N_A (eq.III.2.15), de (IV.2.15) obtêm-se μ_{II} . Usando-se a relação (III.2.16):

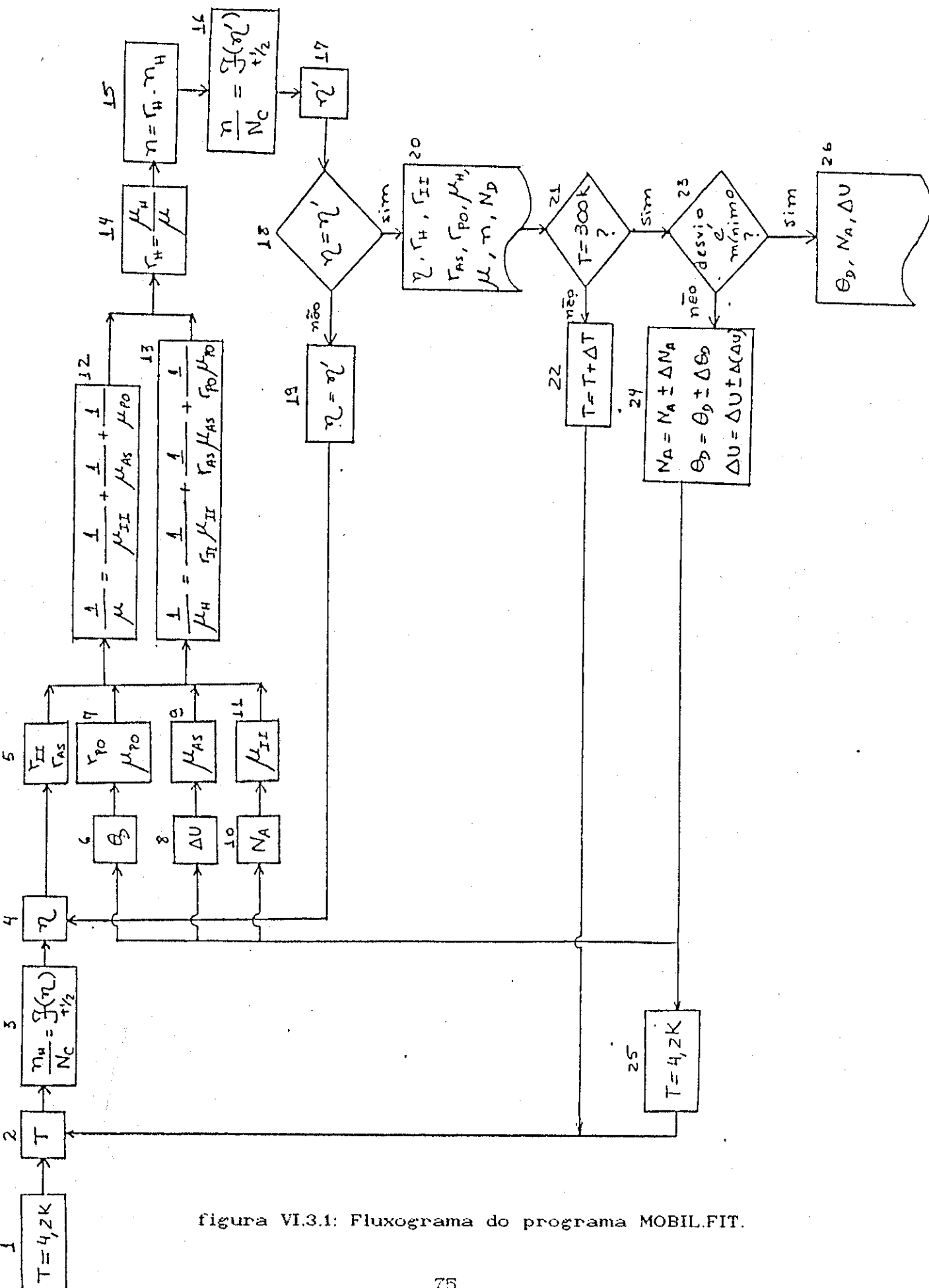


figura VI.3.1: Fluxograma do programa MOBIL.FIT.

$$N_I = n + 2 N_A \quad (VI.3.4)$$

onde n é a densidade líquida de portadores e que inicialmente é considerada como sendo igual à n_H . Se fosse o caso da amostra ser do tipo p ($N_A \gg N_D$), simplesmente partiríamos de um valor inicial de N_D^+ e substituiríamos $N_I = n + 2 N_D^+$ em (IV.2.15), onde N_D^+ é a densidade de impurezas doadoras ionizadas (eq. III.2.14):

- ETAPAS 12, 13 E 14: Tendo-se obtido r_{II} , r_{AS} , r_{PO} , μ_{II} , μ_{AS} e μ_{PO} , de (VI.3.1) e (VI.3.2) obtemos μ e μ_H e consequentemente r_H , o fator de Hall total (eq. II.6.16):

- ETAPAS 15, 16 E 17: De (II.6.12) e (V.3.5), temos

$$n = \frac{r_H}{e \cdot R_H} = r_H n_H \quad (VI.3.5)$$

e chega-se à densidade líquida de portadores n . Usando-se novamente (III.1.7), encontramos um novo valor η' do nível de Fermi reduzido:

- ETAPAS 18, 19 E 20: Comparamos o novo valor η' com o anterior, η . No caso de serem muito diferentes, ficamos com o último valor obtido e refazemos todos os cálculos a partir da ETAPA 5. Quando η e η' , após algumas interações, possuírem valores aproximados (da ordem de 0.1 %), guardamos todos valores encontrados para essa determinada temperatura (r_H , η , μ_H , μ , n e N_D^+).

- ETAPAS 21 E 22: Recomeçamos todos os cálculos a partir da ETAPA 2 para uma nova temperatura da qual tenhamos os dados experimentais, e assim por diante, até a última temperatura (no nosso caso, 300K):

- ETAPAS 23 E 24: Obtemos um desvio total somando todos os desvios relativos entre os valores das mobilidades de Hall fornecidas pelo programa e os valores das mobilidades de Hall, medidos experimentalmente, ou seja,

$$\text{desvio total} = \sum_{i=4.2K}^{300K} \frac{|\mu_H^{\text{teo}}(i) - \mu_H^{\text{exp}}(i)|}{\mu_H^{\text{exp}}(i)} \quad (\text{VI.3.6})$$

onde $\mu_H^{\text{teo}}(i)$ e $\mu_H^{\text{exp}}(i)$ são os valores teórico (fornecido pelo programa) e experimental correspondentes à temperatura i , respectivamente. Agora, os parâmetros N_A , ΔU e θ_D serão incrementados um a um (ETAPAS 6, 8 e 10); retornamos à temperatura inicial e repetimos todo o processo. O programa cessará quando conseguir obter o menor desvio total (eq.VI.3.6). Nesse caso, teremos encontrado os três parâmetros que fornecem o melhor ajuste da curva teórica da mobilidade de Hall com a obtida experimentalmente.

4 - Resultados dos Ajustes de Curvas

Os parâmetros físicos do InGaAs utilizados nos cálculos estão listados na tabela (VI.4.1).

m/m_0	$3,735 \cdot 10^{-29} \text{ g}$	massa efetiva
K_s	13,0	constante diel. estática
K_d	11,6	constante diel. dinâmica
a	$5,868 \text{ \AA}$	parâmetro de rede (InP)

tabela VI.4.1: Parâmetros físicos usados nos cálculos⁵⁹;

m_0 é massa de repouso do elétron.

A figura (VI.4.1), abaixo, mostra a variação da mobilidade de Hall em função da temperatura da amostra T.100. Os pontos foram obtidos experimentalmente e a curva continua, conforme mostrado no item anterior. Podemos observar que, para temperaturas acima de 100K, a mobilidade μ_H^{teo} decai mais acentuadamente que μ_H^{exp} .

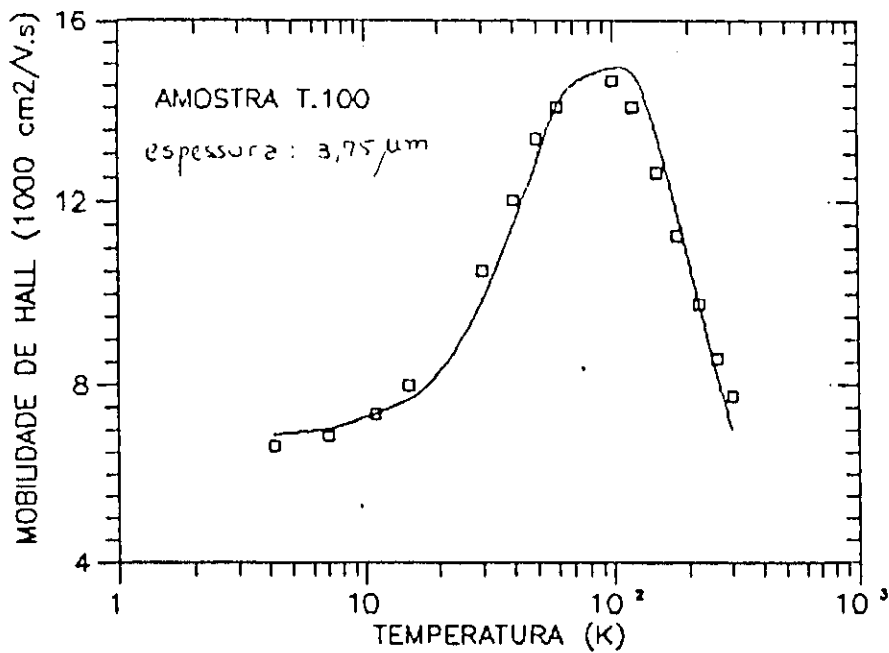


figura VI.4.1: Ajuste das curvas de mobilidade teórica e experimental.

Esse mesmo comportamento também se verifica para as demais amostras. Como nessa região de temperatura a mobilidade limitada pelos fônons ópticos polares (PO) é predominante, vamos nos ater ao cálculo de μ_{PO} (eq. IV.5.3). A partir do fator de correção $G(z)$, apresentado na tabela (IV.5.1), encontramos uma segunda curva de $G(z)$ em função de z (eq.IV.5.4) para melhorar o ajuste das curvas de mobilidade (figura VI.4.2).

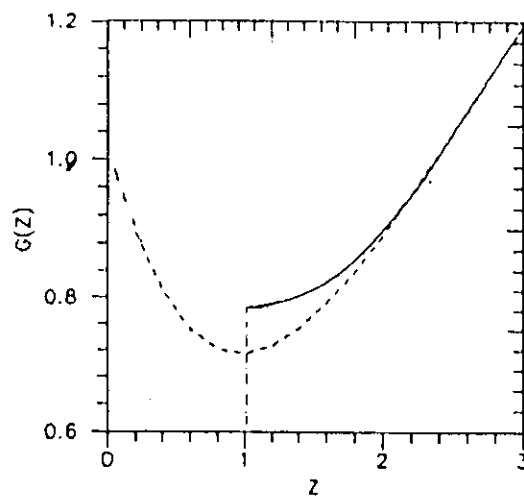


figura VI.4.2: Curvas de $G(z)$ da literatura⁵⁴ (tracejada) e calculada (contínua). A curva calculada inicia-se em $z = 1$ por que a temperatura máxima (300K) é sempre menor ou igual a θ_D , isto é, $z = \theta_D/T \geq 1$.

A curva contínua na figura (VI.4.2) é a que obtivemos e a curva tracejada é a mesma da figura (IV.5.2), fornecida pela literatura⁵⁴. Utilizando-se, então, a nova curva de $G(z)$ no cálculo de μ_{Po} , temos uma nova curva da mobilidade teórica, mostrada na figura (VI.4.3) e também na figura (VI.4.4).

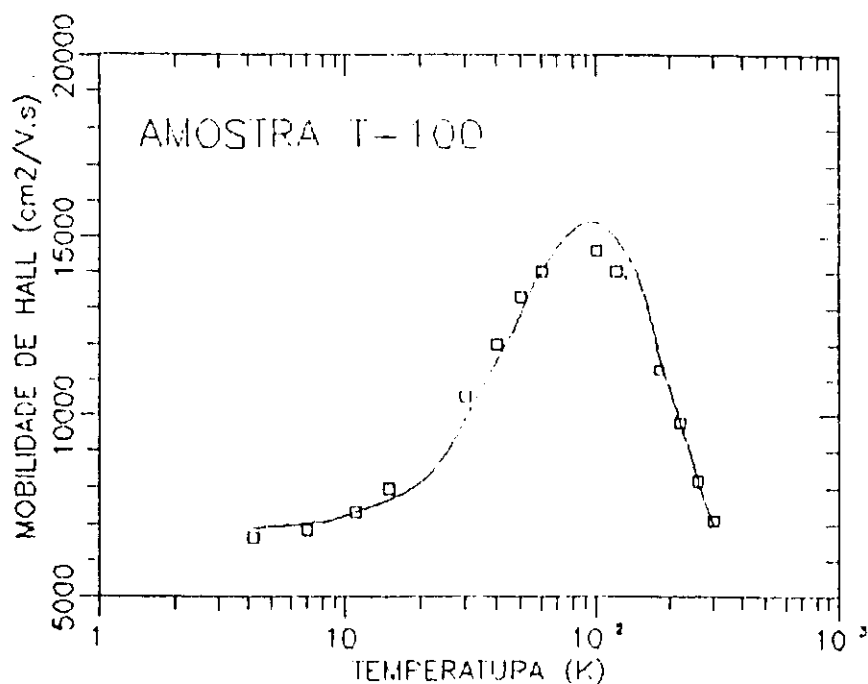


figura VI.4.3: Ajuste das curvas de mobilidade teórica e experimental.

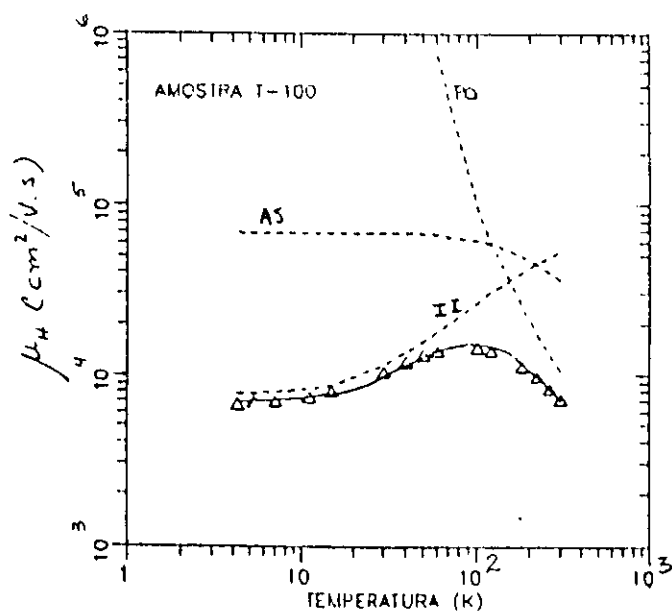


figura VI.4.4: Ajuste das curvas de mobilidade teórica e experimental. As curvas tracejadas indicam as mobilidades limitadas por cada mecanismo de espalhamento.

Pode-se observar facilmente, através da figura (VI.4.4), como os modos de espalhamento determinam o comportamento da mobilidade total (ou combinada), o que vem a substantiar a validade da Regra de Matthiessen (eqs. VI.3.1 e VI.3.2).

Nas figuras (VI.4.5), (VI.4.6) e (VI.4.7) são mostrados os ajustes das curvas de mobilidade para as demais amostras.

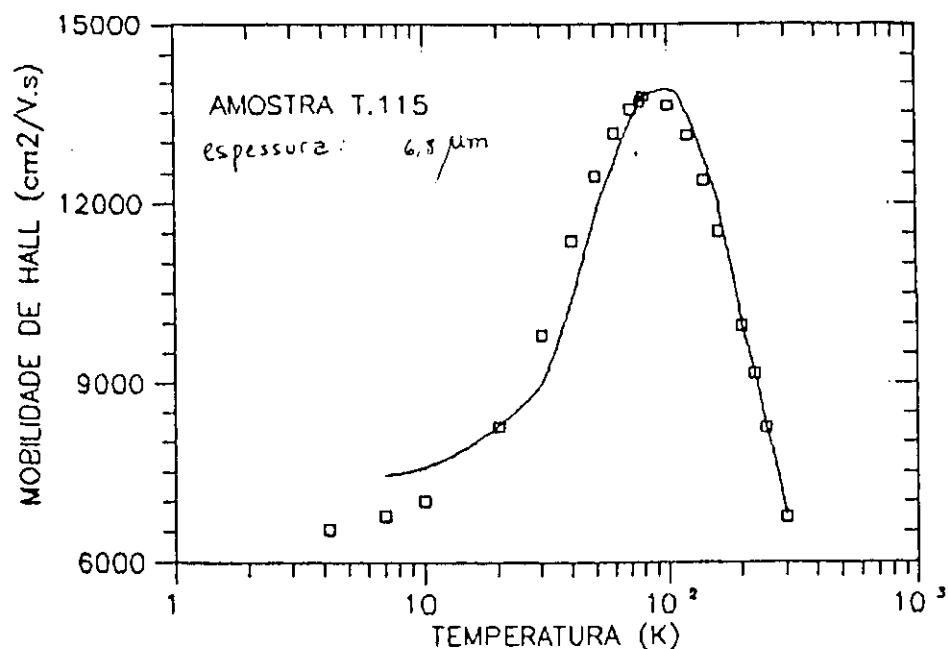


figura VI.4.5: Ajuste das curvas de mobilidade teórica e experimental.

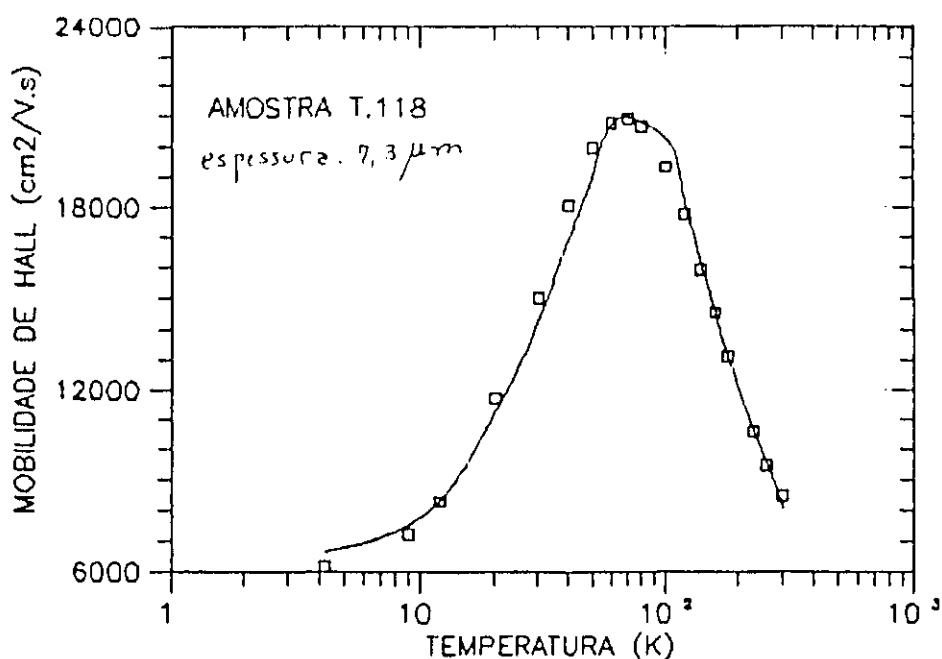


figura VI.4.6: Ajuste das curvas de mobilidade teórica e experimental.

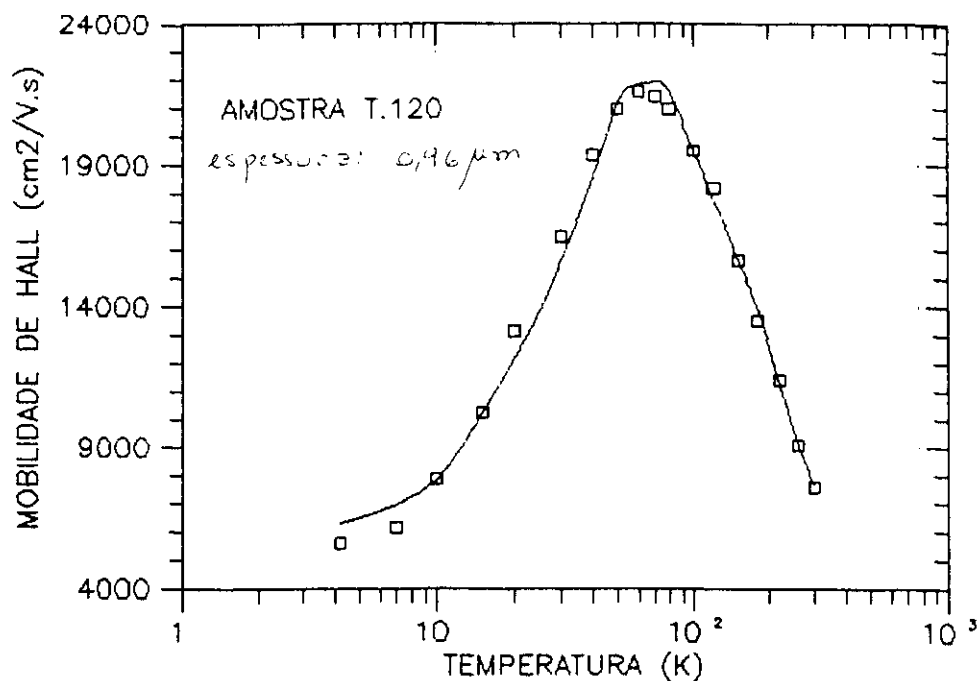


figura VI.4.7: Ajuste das curvas de mobilidade teórica e experimental.

Os parâmetros físicos (θ_D , ΔU e N_A) que, como já foi mencionado, seriam obtidos a partir dos ajustes de curvas e as mobilidades de Hall μ_H , obtidas experimentalmente a 77 K e a 300 K, são mostrados na tabela (VI.4.2) abaixo. Os valores típicos de μ_H a 77 K variam entre 15000 e 70000 $\text{cm}^2/\text{V.s}$ e a 300 K, entre 7000 e 13000 $\text{cm}^2/\text{V.s}$ ⁶⁰

AMOSTRA	θ_D (K)	θ_D (K) (ref. 61)	ΔU (eV)	ΔU (e) (ref. 62)	N_A ($10^{15}/\text{cm}^3$)	μ_H ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	
						77 K	300 K
T.100	360	385-435	0.50	0.53	5.6	14300	7050
T.115	369		0.55		1.5	13700	6800
T.118	327		0.32		6.5	20680	8050
T.120	315		0.32		6.3	21000	7670

tabela VI.4.2: Parâmetros físicos obtidos com os ajustes de curvas.

Nas figuras (VI.4.8), (VI.4.9), (VI.4.10) e (VI.4.11) são mostradas as curvas de densidade de portadores n versus

1000/temperatura, para cada amostra.

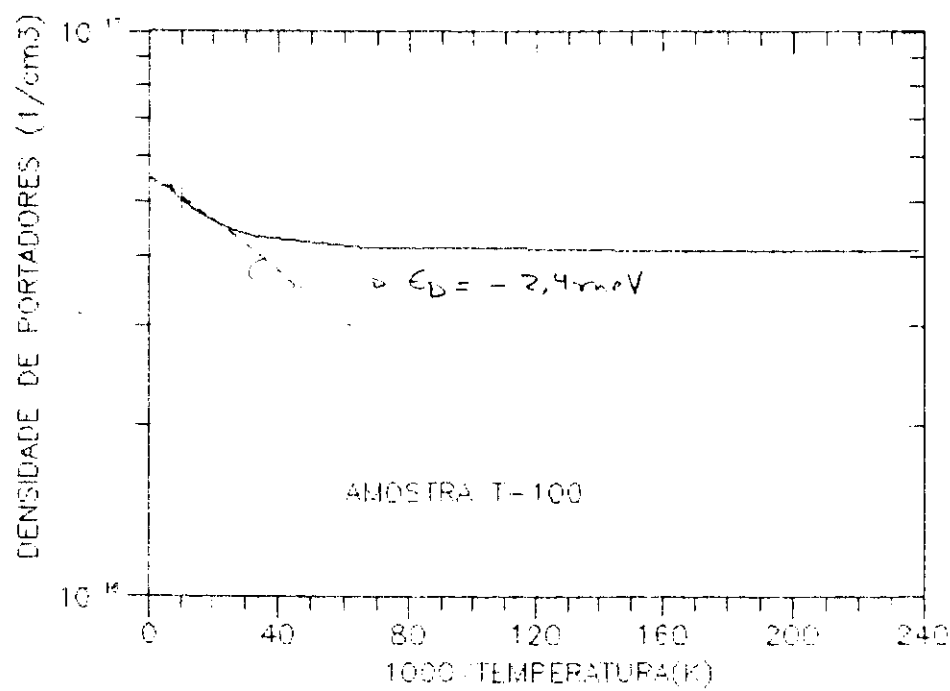


figura VI.4.8: Densidade de portadores n em função de $1000/\text{TEMPERATURA}$

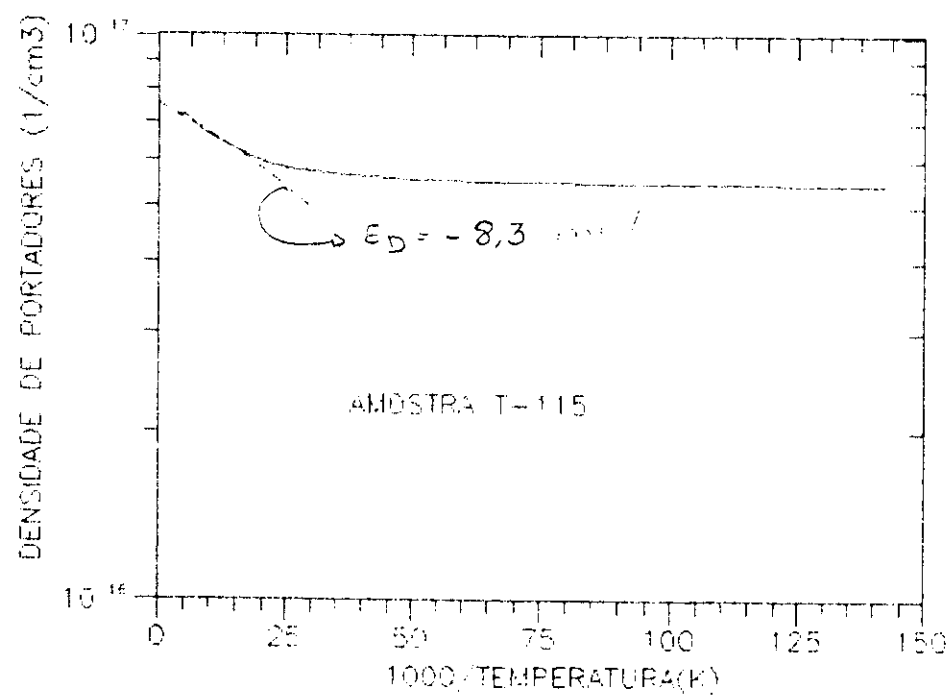


figura VI.4.9: Densidade de portadores n em função de $1000/\text{TEMPERATURA}$

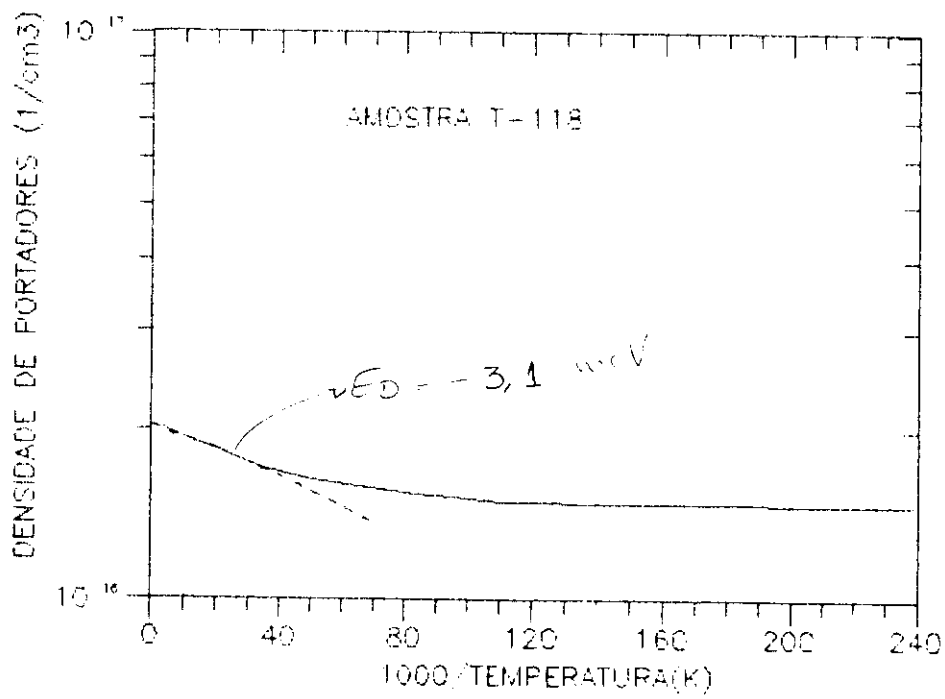


figura VI.4.10:Densidade de portadores n em função de 1000/TEMPERATURA

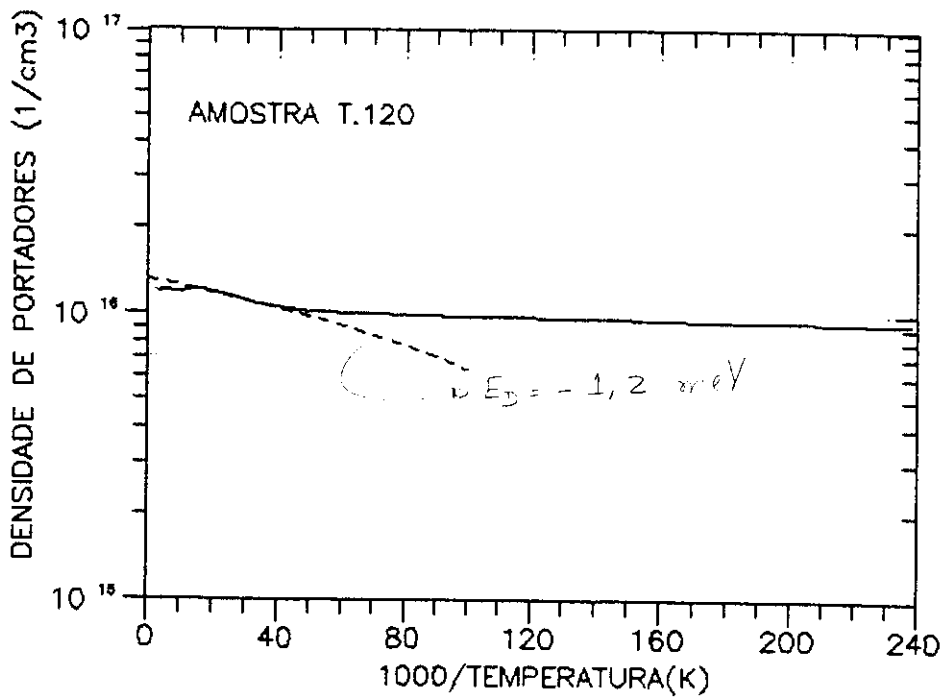


figura VI.4.11:Densidade de portadores n em função de 1000/TEMPERATURA

Como podemos observar, não existe uma energia de ionização dos níveis de impurezas. Aparentemente, existe um contínuo

de níveis "colados" ao bordo da banda de condução, isto é, uma "cauda" na densidade de estados. Assim, os valores de E_D calculados têm meramente um caráter demonstrativo, significando a energia de ionização do nível mais profundo desta "cauda".

Apenas para exemplificar, vamos calcular E_D para a amostra T.100:

- Se $E_c = 0$ (energia no bordo da banda de condução), da equação (III.2.13) temos

$$n = A T^{3/2} e^{-E_D/k_B T} \quad (VI.4.1)$$

Tomemos duas temperaturas T_1 e T_2 (dentro da região em que ocorre a ionização do nível de impureza) e n_1 e n_2 , as respectivas densidades de portadores. Podemos reescrever (VI.4.1) como

$$\ln n_1 = \ln A + \ln T_1^{3/2} + \left(\frac{-E_D}{k_B T_1} \right) \quad (VI.4.2)$$

e

$$\ln n_2 = \ln A + \ln T_2^{3/2} + \left(\frac{-E_D}{k_B T_2} \right) \quad (VI.4.3)$$

Subtraindo-se (VI.4.3) de (VI.4.2) e rearranjando-se os termos, temos

$$E_D = \frac{\ln (n_1/n_2) - \frac{3}{2} \ln (T_1/T_2)}{\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)} k_B \quad (VI.4.4)$$

- Para $T_1 = 200\text{K}$, $n_1 = 5.10^{16}/\text{cm}^3$ e $T_2 = 17\text{K}$, $n_2 = 3.10^{16}/\text{cm}^3$, obtém-se $E_D = -2.38\text{ meV}$.

A tabela (VI.4.3) abaixo relaciona as E_D calculadas e as densidades de portadores n_H , obtidas experimentalmente a 77 K e a 300 K, para cada amostra.

AMOSTRA	E_D (meV)	n_H ($10^{16}/\text{cm}^3$)	
		77 K	300 K
T.100	-2.4	3.5	4.1
T.115	-8.3	4.8	5.6
T.118	-3.1	1.2	1.4
T.120	-1.2	0.7	0.9

tabela VI.4.3: Energia do nível de impureza doadora E_D e densidade de portadores n_H .

Finalmente, são mostradas na figura (VI.4.12) as curvas de fator de Hall em função da temperatura calculadas para cada amostra. Observa-se que a aproximação usual ($r_H \sim 1$) conduz a erros nos valores de n que podem ser maiores que 60% a 77 K e 20% em temperatura ambiente.

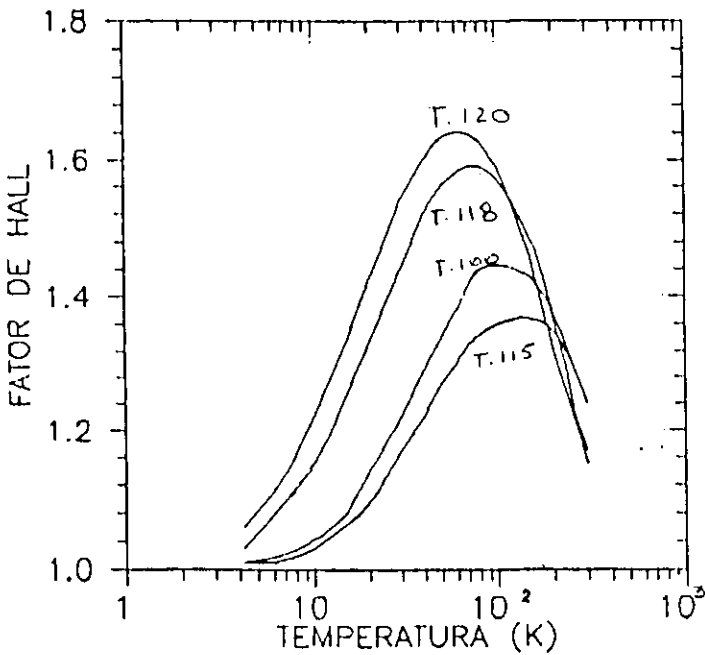


figura VI.4.12: Fator de Hall r_H em função da temperatura.

1 - A Aproximação de Born:

A análise dos resultados obtidos leva-nos a um ponto crucial que é o de determinar até que temperatura é válida a aproximação de Born, a qual foi usada sem restrições no cálculo da mobilidade limitada por impurezas ionizadas μ_{II} . A aproximação de Born é, em síntese, uma técnica para lidar com problemas de perturbação que, neste caso, deve-se ao potencial da impureza ionizada. A teoria de perturbação é então utilizada na determinação do tempo de relaxação τ_{II} devido ao espalhamento por tal potencial. Surge a necessidade de se saber em que condições um potencial do tipo

$$V(r) = \frac{e^2}{K_S r} e^{-r/L} \quad (VII.1.1)$$

pode ser considerado uma perturbação.

Como a densidade de portadores nos semicondutores é relativamente pequena (comparada aos metais), o comprimento de blindagem L é necessariamente maior levando-nos a crer que a aproximação de Born não seja válida neste caso. Além disso, em temperaturas suficientemente baixas, os elétrons de baixa energia (que são maioria) devem estar sujeitos a uma seção de choque de espalhamento superestimada, uma vez que esta aproximação trata o potencial espalhador como uma perturbação.

Entretanto, o potencial efetivo de espalhamento é reduzido pela redução da energia de ionização de impurezas do tipo quase-hidrogênio (dominante nos semicondutores). Se a energia de ionização destas é pequena, os portadores de carga serão espalhados por um potencial de longo alcance mas fraco, validando, a princípio o uso da aproximação de Born.

Blatt⁶³, usando o método das ondas parciais, onde o desvio de fase é o parâmetro que determina a seção de choque, mostrou que no caso do Ge e Si com aproximadamente $10^{16}/\text{cm}^{-3}$ portadores, a aproximação de Born é boa até 50 K (fig. VII.1.1).

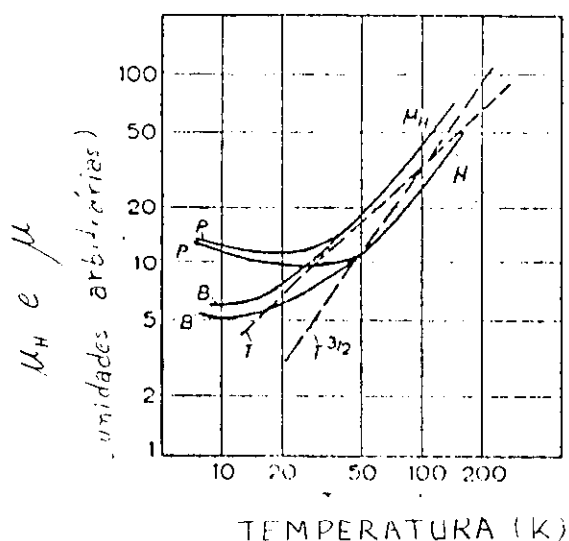


figura VII.1.1: Mobilidade do Ge em função da temperatura calculada assumindo-se que $m^* = 0.33$, $n = 10^{16}/\text{cm}^{-3}$ e sem compensação. As curvas assinaladas por P foram calculadas pelo método das ondas parciais e as assinaladas por B, pela aproximação de Born⁶³.

No caso das nossas amostras, acreditamos que podemos utilizar a aproximação de Born até temperaturas menores ainda. De fato, a variação contínua de n com a temperatura, mostrada nos gráficos VI.4.8 a VI.4.11, não permite, rigorosamente, definir uma energia de ionização do nível de impureza. Assim, a alta concentração de portadores ($2 - 6 \cdot 10^{16}/\text{cm}^{-3}$) a baixas temperaturas, indicam que o material possui uma "cauda" na densidade de estados da banda de condução. Isto faz com que a energia de ionização das impurezas ionizadas a baixas temperaturas seja quase nula, tornando-a também um potencial espalhador extremamente fraco, de modo que é aceitável a ideia de que a aproximação de Born continue válida.

2 - A Regra de Matthiessen (modificada):

Outro ponto que merece discussão é a utilização da equação (VI.3.2). Na verdade, ela nunca foi provada e sua validade é discutível. No entanto, a equação (VI.3.2) é certamente correta se so existir um único modo de espalhamento. Observando-se a figura (VI.4.4), vemos que, em grandes intervalos de temperatura, um mecanismo de espalhamento em particular é muitíssimo mais significativo que os demais. Por outro lado, somente numa pequena faixa de temperatura todos os modos de espalhamento são comparáveis. Portanto, apenas nesta região, o problema se coloca. Temos razões para crer que, mesmo neste caso, não estamos longe de uma boa aproximação. Basta lembrarmos que os erros relativos em medidas desse tipo são consideráveis ($\sim 10 - 15 \%$) e portanto, provavelmente maiores que o erro cometido nesta aproximação.

3 - O Fator de correção $G(z)$:

Um ponto que ainda carece de um estudo mais aprofundado é a variação da mobilidade com a temperatura para temperaturas maiores que a de máxima mobilidade.

Para nossas amostras, os valores experimentais da mobilidade de Hall decresciam sistematicamente mais devagar que os valores teóricos calculados pela equação (IV.5.3), utilizando-se os valores de $G(z)$ da tabela (IV.5.1) (fig. VI.4.1).

Calculamos, então, uma outra função $G(z)$ que fornecesse uma boa interpolação teórica (fig. VI.4.2). Do ponto de vista científico, isto seria justificável se tal curva valesse para qualquer amostra de InGaAs. Todavia, duas amostras de menor compensação (maior mobilidade a 77 K), por nós caracterizadas, mostraram um comportamento diferente: a concordância das curvas de mobilidade teórica e experimental, usando-se novamente a curva de $G(z)$ da tabela (IV.5.1), foi muito boa (fig. VII.3.1).

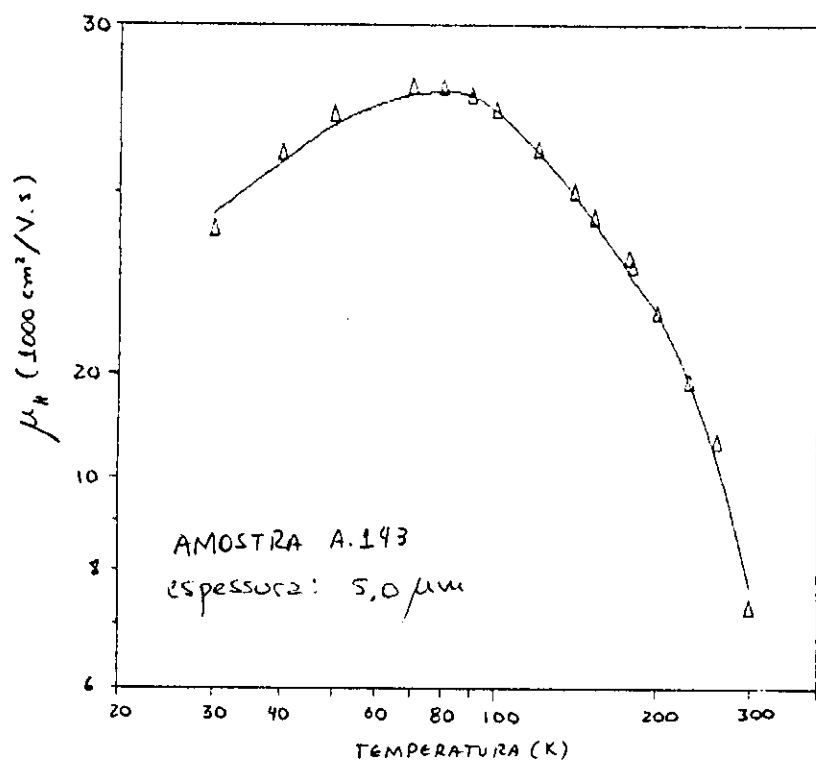


figura VII.3.1: Ajuste das curvas de mobilidade teórica e experimental

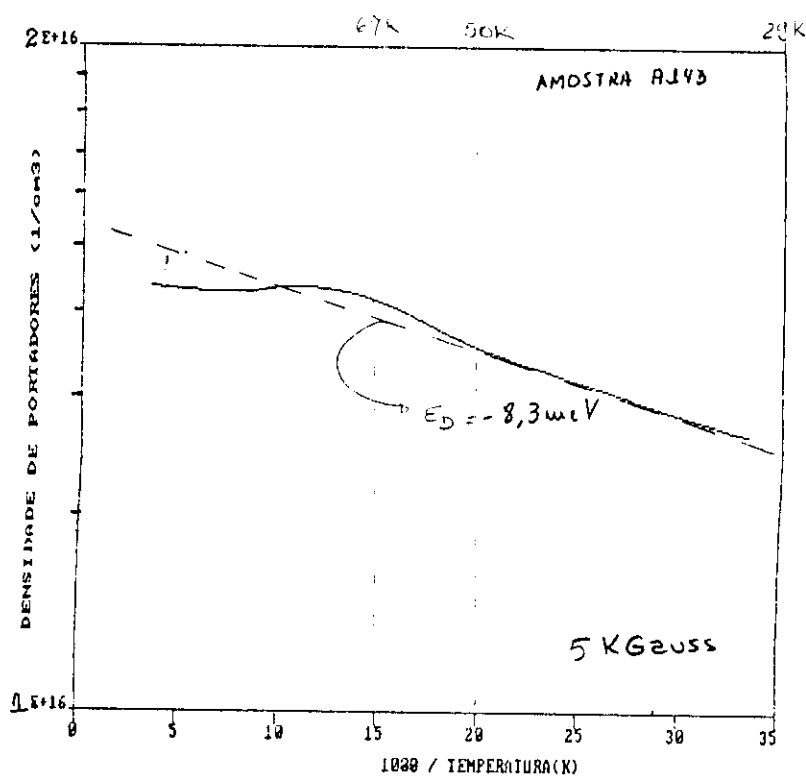


figura VII.2.2: Densidade de portadores n em função de 1000/TEMPERATURA.

A figura (VII.3.2), por sua vez, mostra a variação de n com a temperatura para a amostra A.143, de onde se calcula uma energia de ionização $E_D = - 8,3$ meV. É possível que haja um segundo nível doador que é ionizado a partir de ~ 50 K : a precisão nas medidas, no entanto, não nos permite ser categóricos quanto a isto.

O que distingue a amostra A.143 das quatro primeiras é uma maior temperatura de Debye θ_D e uma energia de ionização do nível doador E_D bem determinada. A tabela (VII.3.1) relaciona os parâmetros físicos obtidos a partir do ajuste das curvas de mobilidade e os valores experimentais de μ_H e n_H para a amostra A.143.

AMOSTRA	θ_D (K)	ΔU (eV)	N_A ($10^{15}/\text{cm}^3$)	μ_H ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)		n_H ($10^{16}/\text{cm}^3$)	
				77 K	1300 K	77 K	1300 K
A. 143	450	0.51	2.1	25600	9370	1.0	1.2

tabela VII.3.1: Parâmetros físicos obtidos

A curva do fator de Hall r_H (VII.3.3) dessa amostra segue o comportamento geral deste fator, mostrado na figura (VI.4.12).

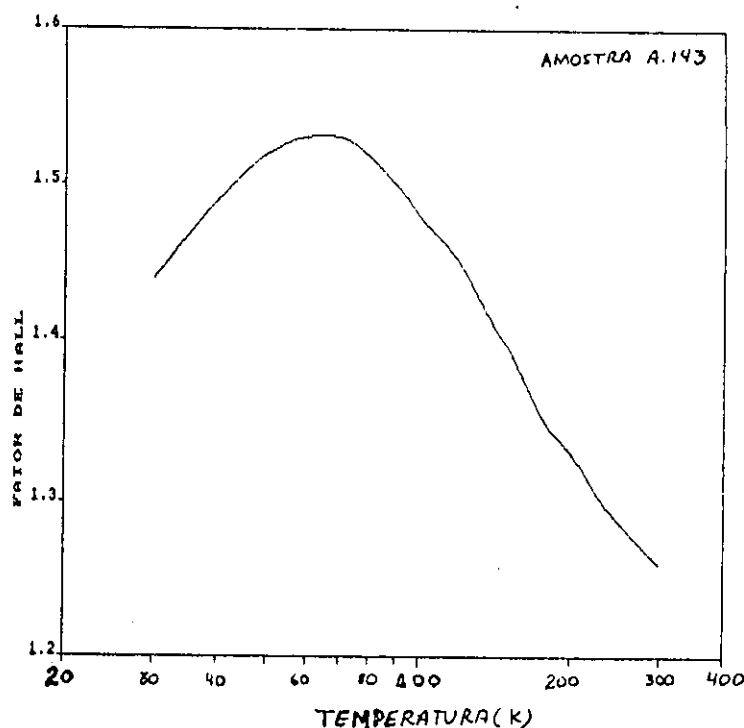


figura VII.2.3: Fator de Hall r_H em função da temperatura.

O objetivo deste trabalho era desenvolver um método de análise de camadas epitaxiais através de medidas galvanomagnéticas. Este objetivo, acreditamos nós, foi atingido com a análise que aqui fizemos, de algumas amostras de InGaAs crescidas epitaxialmente sobre substratos de InP semi-isolante.

Pudemos determinar a densidade total de portadores e de impurezas aceitadoras e doadoras, bem com calcular o fator de Hall numa larga e útil faixa de temperatura e de densidade de portadores.

Mais do que soluções, deixamos em aberto alguns problemas que merecem ser atacados em futuros trabalhos. O principal deles é o comportamento da mobilidade das amostras T.100, T.115, T.118 e T.120 para temperaturas acima de 100 K, que não foi bem compreendido. Outro importante problema é a validade da aproximação de Born a baixas temperaturas. Talvez seja melhor usar o tratamento de ondas parciais como método geral.

O cálculo do potencial de espalhamento por desordem no potencial da rede (ΔU) forneceu dois resultados bastante diferentes em duas amostras (tabela VI.4.2). Este é um outro ponto a ser analisado no futuro. Neste trabalho, isto não foi feito porque o cálculo de ΔU depende indiretamente da mobilidade limitada por fônons ópticos que, como já mencionamos, apresenta um comportamento não bem compreendido.

Gostaríamos ainda de realçar que para obter as medidas aqui apresentadas, implantamos antes a automatização do sistema de medidas de efeito Hall, que foi sumariamente descrita no capítulo V, mas que nos tomou bastante tempo (~ 9 meses).

- ¹ Y. Takeda et al: J. Appl. Phys. 47 5405 (1976).
- ² E. W. Mehal, G.R.Cronin: Electrochem. Tech. 4 540 (1966).
- ³ W. L. Bond, F. M. Smits: Bell System Tech. J. 35 1209 (1956).
- ⁴ E. M. Williams et al: Electrochem. Tech. 4 479 (1966).
- ⁵ E. M. Williams, C. E. Jones: Solid State Comm. 3 195 (1965).
- ⁶ J. K. Howard, R. D. Dobrot; J. Electrochem. Soc. 113 567 (1966).
- ⁷ F. V. Williams: J. Electrochem. Soc. 111 886 (1964).
- ⁸ R. E. Ronig: Anal. Chem. 25 1530 (1953).
- ⁹ P. J. Dobbs, F. S. Kovacs: Semic. Prod. Solid State Tech. 7(8) 28 (1964).
- ¹⁰ E. E. Gardner et al: Solid State Eletron. 6 311 (1963).
- ¹¹ F. S. Kovacs, A. S. Epstein: Semic. Prod. Solid State Tech. 7(8) 32 (1964).
- ¹² J. R. Barker: J.Phys. C6 2663 (1973).
- ¹³ A. C. Smith et al: Electronic Conduction in Solids (McGraw-Hill, NY, 1967), pág. 315.
- ¹⁴ W. Kohn, J. M. Luttinger: Phys. Rev 108 590 (1957).
K. K. Thornber: Solid State Phys. 21 259 (1978).
- ¹⁵ D. J. Howarth, E. H. Sondheimer: Proc. Roy. Soc. A 222 241 (1953).
H. Ehrenreich: J. Phys. Chem. Sol. 2 131 (1957).
- ¹⁶ R. T. Delves: Proc. Phys. Soc. London; 73 572 (1959).
K. Fletcher; P. N. Butcher: J. Phys. C 6 976 (1973).
- ¹⁷ D. L. Rode: Phys. Rev. B 2 1012 (1970).
P. N. Rektorys: Survey of Applicable Mathematics (Illife Books Ltd., London, 1969), pág.1152.
- ¹⁸ J. Spannier, E. M. Gellbard, Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems (Addison-Wesley, London, 1969);
G. Ottaviani et al: Phys. Rev. B 12 3318 (1975).
- ¹⁹ Ver. por exemplo, J. S. Blakemore: Semiconductor Statistics (Pergamon Press, NY, 1962), pág. 117.
- ²⁰ Ver. por exemplo, K. V. Shalimova: Fisica de Los Semicondutores (Mir, Moscou, 1975), pág. 108.

- ²¹ R. B. Dingle; Phil. Mag. 46 831 (1955).
- ²² P. Kireev; La Physique des Semiconductors (Mir, Moscou, 1975), pag. 263.
- ²³ J. R. A. Cooper, S. R. Aimes; Phil. Mag. 4 145 (1959).
- ²⁴ Ver. por exemplo, V. I. Fistul; Heavily Doped Semiconductors (Plenum Press, 1969), pag. 47.
- ²⁵ Guggenheim; Proc. Phys. Soc. London A 66 121 (1953).
- ²⁶ Ver. por exemplo, K. Seeger; Semiconductor Physics (Springer-Verlag, 1973), pag. 46.
- ²⁷ E. H. Putley; Contemp. Phys. 16 101 (1975).
- ²⁸ Ver. por exemplo, B. R. Nag; Electron Transport in Compounds Semiconductors (Springer-Verlag, 1980), vol. 11, pag. 176.
- ²⁹ F. Seitz; The Modern Theory of Solids (McGraw-Hill, 1940), pag. 521.
- ³⁰ Este postulado tem sido utilizado por varios autores (D. L. Rode, S. Knight; Phys. Rev. B 3 2534 (1971), por exemplo) embora sua validade seja discutivel.
- ³¹ E. M. Conwell, M. F. Weisskopf; Phys. Rev. 77 388 (1950).
- ³² H. Brooks; Phys. Rev. 23 879(A) (1951).
- ³³ Ver. por exemplo, D. L. Rode, S. Knight; Phys. Rev. B 3 2534 (1971).
- ³⁴ A. C. Beer; Solid State Physics Supl. 4 (Academic Press, 1963), pag. 128.
- ³⁵ C. Erginsoy; Phys. Rev. 79 1013 (1950).
- ³⁶ P. A. Flinn; Phys. Rev. 114 350 (1956).
- ³⁷ N. F. Mott; Proc. Cambridge Philos. Soc. 32 281 (1936).
- ³⁸ L. Nordheim; Ann. Phys. (Leipz) 9 607 (1931).
- ³⁹ G. L. Hall; Phys. Rev. 116 604 (1959).
- ⁴⁰ A. E. Asch, G. L. Hall; Phys. Rev. 132 1047 (1963).
- ⁴¹ J. W. Harrison, J. R. Hauser; Phys. Rev. B 13 5347 (1976).
- ⁴² Y. Takeda et al; J. Appl. Phys. 47 5405 (1976).
- M. Glicksman et al; Phys. rev. B 9 1621 (1974).
- ⁴³ J. W. Harrison, J. R. Hauser; J. Appl. Phys. 47 292 (1976).
- M. A. Littlejohn et al; Appl. Phys. Lett. 30 242 (1977).
- ⁴⁴ J. C. Phillips; Rev. Mod. Phys. 42 317 (1970).
- M. Altarelli; Solid state Comm. 15 1607 (1974).
- ⁴⁵ E. M. Conwell; High Field Transport in Semiconductors (Academic Press, 1967).

- ⁴⁶ O. Madelung: Physics of III.V Compounds (wiley, NY, 1964).
- ⁴⁷ G. Arlt, P. Quadflieg: Phys. Stat. Solidi, 25 323 (1968).
- ⁴⁸ H. J. G. Meijer, D. Polder: Physica 19 255 (1953).
- ⁴⁹ J. D. Zook: Phys. Rev. 136 A839 (1964).
- ⁵⁰ D. J. Howarth, E. H. Sondheimer: Proc. Roy. Soc. A219 53 (1953).
- ⁵¹ N. W. Ashcroft, N. D. Mermin: Solid State Physics (Holt, Rinehart and Winston, NY, 1976), pag. 458.
- ⁵² M. Kohler: Z. Phys. 124 772 (1948).
- ⁵³ A. Fortini et al: J. Appl. Phys. 41 3121 (1970).
- ⁵⁴ C. Hammar, B. Magnusson: Physica Scripta 6 206 (1972).
- ⁵⁵ As espessuras são sempre dadas em μm devido as pequenas dimensões.
- ⁵⁶ L. J. Van der Paw: Phillips Res. Repts. 13 1 (1958).
- ⁵⁷ Ver. por exemplo, C. M. Wolfe et al: J. Appl. Phys. 41 504 (1970).
- ⁵⁸ C. E. Hennies et al: Problemas Experimentais em Física, vol. 1 (Editora Unicamp, 1986), pag. 157.
- ⁵⁹ T. P. Pearsall et al: Gallium Arsenide and Related Comp. (1980), pag. 639.
- ⁶⁰ J. D. Oliver et al: J. Crystal Growth 54 64 (1981).
- ⁶¹ T. P. Pearsal et al: Appl. Phys. Lett (GB) 35 342 (1979).
- ⁶² M. A. Littlejohn et al: Solid State Electron. (GB) 21 107 (1978).
- ⁶³ F. J. Blatt: J. Phys. Chem. Solids 1 262 (1957).

```

10 G%=80
20 S%=15
30 B%=16
40 A%=7
50 OUT A%,S%
60 AL%=A%+32
70 AH%=A%+16
80 A(1,2)=16:A(1,3)=8:A(1,4)=40:A(2,1)=2:A(2,3)=10:A(2,4)=42:A(3,1)=1:A(3,2)=17:
A(3,4)=41:A(4,1)=5:A(4,2)=21:A(4,3)=13
90 DIM T(100),P$(100), RES(100), HALL(100), MOB(100), V(100), PT(100), CR(100),
CAMPO(100)
100 CLS
110 PRINT"Programa para caracterizacao de cristais semicondutores a baixas tempe
raturas."
120 PRINT
130 PRINT"A numeracao dos contatos deve estar na forma mostrada abaixo:"
140 PRINT
150 PRINT"          *1          "
160 PRINT
170 PRINT"          2*          *4          "
180 PRINT
190 PRINT"          *3          "
200 PRINT
210 PRINT"Ligue a impressora e ajuste a folha."
220 PRINT
230 INPUT"Qual a denominacao do cristal          ";N$
240 INPUT"Qual a espessura da amostra, em micra          ";ESP
250 REM Escreve no arquivo
260 OPEN N$ FOR OUTPUT AS#1
270 PRINT#1,N$
280 PRINT#1,ESP
290 CLS
300 LPRINT" CARACTERIZACAO ELETRICA DO CRISTAL ";N$
310 LPRINT"          *1          "
320 LPRINT"NUMERACAO DOS CONTATOS:          2*          *4          "
330 LPRINT"          *3          "
340 LPRINT"ESPESSURA:";ESP;"micra          "
350 PRINT"AVISO: o bip continuo indica o termino das medidas para aquela temper
atura."
360 PRINT
370 I=0
380 I=I+1
390 INPUT"Qual o valor da temperatura, em Kelvin (assume o valor anterior)
";T(I)
400 IF T(I)=0 THEN T(I)=T(I-1)
410 PRINT
420 INPUT"Qual o valor do campo magnetico,em Tesla(assume o valor anterior)
";CAMPO(I)
430 IF CAMPO(I)=0 THEN CAMPO(I)=CAMPO(I-1)
440 PRINT
450 INPUT"Qual o valor da corrente, em miliamperes(assume o valor anterior)
";CR(I)
460 IF CR(I)=0 THEN CR(I)=CR(I-1)
470 LPRINT"*****
*****"

```

```

480 LPRINT ">>>>>>>TEMPERATURA:";T(I);"K      "; "CORRENTE:";CR(I);"mA      "; "CAMPO
";CAMPO(I);"T"
490 CLS
500 REM J,K,L e M sao os indices dos contatos:
510 J=0: K=1: L=2: M=3
520 Q=0
530 PRINT "MEDIDAS SEM CAMPO"
540 LPRINT "****SEM CAMPO"
550 Q=Q+1
560 PRINT
570 PRINT"*****"
580 PRINT
590 J=J+1: K=K+1: L=L+1: M=M+1
600 REM Acessar os contatos; ligar a corrente:
610 OUT 44,A(M,L)
620 PRINT"TENSAO: "; ;M;L
630 LPRINT" I:";J;K;
640 OUT 28, A(J,K)
650 PRINT"CORRENTE:"; J;K
660 LPRINT" V:";M;L;
670 LPRINT" V(I+)= ";
680 PRINT"I+: "
690 OUT 76,128
700 GOSUB 2190
710 VP=ABS(V(Q))
720 PRINT
730 REM Inversao no sentido da corrente:
740 PRINT"I-: "
750 LPRINT" V(I-)= ";
760 OUT 76,136
770 GOSUB 2190
780 VN=ABS(V(Q))
790 REM Desligar a corrente:
800 PRINT
810 OUT 76, 0
820 V(Q)=ABS(VP+VN)/10
830 PRINT"TENSAO MEDIA: V= " ;
840 PRINT USING"####.###";V(Q);
850 PRINT"mV "
860 BEEP
870 IF M=4 THEN M=0
880 IF L=4 THEN L=0
890 IF K=4 THEN K=0
900 IF Q<4 THEN GOTO 550
910 REM Calculo do fator de correcao da resistividade:
920 TR=0
930 E=0: F=1
940 E=E+1: F=F+1
950 R=(V(E)-V(F))/(V(E)+V(F))
960 F(E)=1-((.3466*(R^2))-(.0924*(R^4))
970 REM Calculo da resistividade:
980 TL(E)=(V(E)+V(F))*F(E)/2
990 TR=TR+TL(E)
1000 IF F=4 THEN F=0
1010 IF E=4 THEN BEEP ELSE 940

```

```

1020 RES(I)=4.53236E-04*ESP*TR/(4*CR(I))
1030 LPRINT"RESISTIVIDADE: ";
1040 LPRINT"p=";
1050 LPRINTUSING" ##.##^";RES(I);
1060 LPRINT " ohm.cm"
1070 CLS
1080 PRINT"MEDIDAS COM CAMPO"
1090 PRINT
1100 REM Medidas de Efeito Hall:
1110 J=1: L=2: K=3: M=4
1120 Q=0: Y=0
1130 IF Q<4 THEN CAMP=0 ELSE CAMP=16
1140 IF CAMP=0 THEN LPRINT"***CAMPO NORMAL:" ELSE LPRINT"***CAMPO INVERTIDO:"
1150 IF CAMP=0 THEN PRINT"CAMPO NORMAL" ELSE PRINT"CAMPO INVERSO"
1160 REM Acessar os contatos,ligar o campo e a corrente:
1170 OUT 44,A(L,M)
1180 PRINT
1190 PRINT"*****"
1200 PRINT
1210 PRINT"TENSAO: ";L;M
1220 LPRINT" I:";J;K;
1230 OUT 28, A(J,K)
1240 PRINT"CORRENTE:";J;K
1250 LPRINT" V:";L;M;
1260 PRINT
1270 LGCAMP=32
1280 CURR=0
1290 PRINT"I+:"
1300 LPRINT" V(I+)= ";
1310 LCURR=0
1320 OFCAMP=0
1330 GOSUB 2110
1340 LGCAMP=0
1350 CURR=0
1360 LCURR=128
1370 IF Q<4 THEN CAMP=0 ELSE CAMP=16
1380 OFCAMP=0
1390 GOSUB 2110
1400 Q=Q+1: Y=Y+1
1410 IF Q<4 THEN CAMP=0 ELSE CAMP=16
1420 V(Q)=0
1430 GOSUB 2190
1440 BEEP
1450 V(Q)=V(Q)/5
1460 PRINT"TENSAO MEDIA: V= " ;
1470 PRINT USING"####.###";V(Q);
1480 PRINT"mV "
1490 IF Y=2 THEN GOTO 1600
1500 REM INVERTER A CORRENTE:
1510 PRINT
1520 PRINT"I-:"
1530 LPRINT" V(I-)= ";
1540 CURR=8:LCURR=128
1550 IF Q<4 THEN CAMP=0 ELSE CAMP=16
1560 OFCAMP=0

```

```

1570 LGCAMP=0
1580 GOSUB 2110
1590 GOTO 1400
1600 IF Q=2 THEN Y=0 ELSE 1710
1610 REM Acessar contatos:
1620 OUT 44,A(J,K)
1630 PRINT
1640 PRINT"-----"
1650 PRINT"TENSAO: ";J;K
1660 LPRINT"      I: ";L;M;
1670 OUT 28, A(L,M)
1680 PRINT"CORRENTE";L;M
1690 LPRINT"      V: ";J;K;
1700 GOTO 1280
1710 IF Q=4 THEN Y=0 ELSE 1750
1720 REM Inverter o campo:
1730 CLS
1740 GOTO 1130
1750 IF Q=6 THEN Y=0 ELSE 1770
1760 GOTO 1620
1770 IF Q=8 THEN GOTO 1790 ELSE 1400
1780 REM Desligar campo e corrente:
1790 OUT 76,64:OUT76,0:OUT 44,0: OUT28,0
1800 VHALL=0
1810 G=0: H=4
1820 G=G+1: H=H+1
1830 VHALL=VHALL + ABS(V(G)-V(H))
1840 IF G<4 THEN 1820
1850 VHALL=VHALL/8
1860 REM Calculo do Coeficiente Hall:
1870 LPRINT"COEFICIENTE DE HALL: ";
1880 HALL(I)=VHALL*ESP/(CR(I)*CAMPO(I))
1890 LPRINT "Rh=";
1900 LPRINT USING " #####.##";HALL(I);
1910 LPRINT " cm3/C"
1920 REM Calculo da mobilidade:
1930 LPRINT"MOBILIDADE: ";
1940 MOB(I)=ABS(HALL(I))/RESIST(I)
1950 LPRINT "u=";
1960 LPRINT USING "#####";MOB(I);
1970 LPRINT " cm2/ohm.C"
1980 REM CALCULO DA DENSIDADE DE PORTADORES
1990 LPRINT "DENSIDADE DE PORTADORES: ";
2000 PT(I)=1/(ABS(HALL(I))*1.6E-19)
2010 LPRINT "n=";
2020 LPRINT USING "##.##^";PT(I);
2030 LPRINT "/cm3"
2040 IF V(1)-V(5)<0 THEN PS(I)="P" ELSE PS(I)="N"
2050 LPRINT"TIPO:";PS(I)
2060 PRINT#1,I,T(I),CR(I),CAMPO(I),RES(I),HALL(I),MOB(I),PT(I),PS(I)
2070 FOR Y=1 TO 20
2080 BEEP: NEXT Y
2090 OUT76,64:FOR X=1 TO 50 : NEXT:OUT76,0
2100 GOTO 2340
2110 CV=0

```

```

2120 CV=CURR OR CAMP OR LGCAMP OR OFCAMP OR LCURR
2130 OUT 76, CV
2140 IF Q=0 THEN 2150 ELSE 2160
2150 FOR A=1 TO 4000 : NEXT A
2160 IF Q=4 THEN 2170 ELSE 2180
2170 FOR A=1 TO 5000 : NEXT A
2180 RETURN
2190 REM Intervalador de tempo para estabilizar a tensao e/ou o campo:
2200 FOR A=1 TO 500 :NEXT A
2210 REM Medida da tensao - cinco medidas para cada par de contatos:
2220 V(Q)=0
2230 FOR B=1 TO 5
2240 GOSUB 2730
2250 PRINT"V=";
2260 PRINT USING"####.###";MED!;
2270 PRINT"mV "
2280 V(Q)=V(Q)+MED!
2290 FOR C =1 TO 300: NEXT C
2300 NEXT B
2310 LPRINT USING"#####.## "; V(Q)/5;
2320 LPRINT " mV " ;
2330 RETURN
2340 PRINT"
2350 CLS
2360 PRINT"Foram realizadas";I;"medidas."
2370 PRINT"
2380 INPUT"Deseja realizar novas medidas(maximo de 100);s/n ";S$
2390 IF S$="s" OR S$="S" THEN GOTO 380
2400 X=I
2410 I=0
2420 LPRINT"
2430 LPRINT"
2440 LPRINT"
2450 LPRINT" Temp. Corr. Campo Resist. Coef.Hall Mobilidade
Dens. Port."
2460 LPRINT" (K) (mA) (T) (ohm.cm) (cm3/C) (cm2/ohm.C)
(1/cm3)"
2470 LPRINT"
2480 I=I+1
2490 LPRINT USING"###.## #.## ##.## ##.#### #####
##.##^#### ";T(I);CR(I);CAMPO(I);RES(I);HALL(I);MOB(I);PT(I)
2500 IF I<X THEN 2480
2510 LPRINT"
2520 CLS
2530 INPUT "Deseja prosseguir com as medidas (s/n)";A$
2540 IF A$="s" OR A$="S" THEN I=X
2550 IF A$="s" OR A$="S" THEN GOTO 380
2560 INPUT "Deseja nova listagem (s/n)";A$
2570 IF A$="s" OR A$="S" THEN GOTO 2410 ELSE CLS
2580 LPRINT"
2590 LPRINT"
2600 LPRINT"
2610 LPRINT"
2620 LPRINT" Campinas, de de 19 .
2630 LPRINT"

```

```

2640 LPRINT"
2650 LPRINT"
2660 LPRINT"
2670 LPRINT"      Prof. Resp.
2680 LPRINT"
2690 LPRINT"
2700 LPRINT"
2710 LPRINT"
2720 END
2730 HI%=INP(AH%)
2740 ST%=HI% AND 64
2750 IF ST%=64 GOTO 2730
2760 LO%=INP(AL%)
2770 POL%=HI% AND 32
2780 OV%=HI% AND 16
2790 IF OV%=0 GOTO 2880
2800 IF S%=0 GOTO 2880
2810 B%=B%/2
2820 S%=S%-B%
2830 G%=G%/2
2840 OUT A%,S%
2850 FOR KI=0 TO 500
2860 NEXT KI
2870 GOTO 2730
2880 HIL%=HI% AND 15
2890 CS!=(HIL%*256+LO%)/2
2900 IF CS!>1000 GOTO 2960
2910 IF S%=15 GOTO 2960
2920 S%=S%+B%
2930 B%=B%*2
2940 G%=G%*2
2950 GOTO 2840
2960 IF POL%=0 GOTO 2990
2970 MULT%=1
2980 GOTO 3000
2990 MULT%=-1
3000 MED!=CS!*MULT%/G%
3010 RETURN

```

```

"
"
-----"
"      Aluno Resp."
"
"
"

```

APÊNDICE III - PROGRAMA MOBIL.FIT

```

10 REM  PROGRAMA MOBIL.FIT
20 DIM T(30),NC(30),NH(30),MH(30),NETA(30),RT(30),XRI(30),RAS(30),MOB(30),XMI(30
),MFA(30)
30 DIM MAS(30),N(30),NI(30),NA(30),ND(30),RII(30),MII(30),NT(30),RPO(30),MPO(30)
,MT(30),MZ(30),RZ(30)
40 REM PROGRAMA PARA AJUSTE DE CURVAS DAS MOBILIDADES DE HALL EXPERIMENTAL E TEO
RICA
45 OPEN "FIT.DAT" FOR OUTPUT AS #1
50 REM Valor da massa efetiva, em gramas:
60 ME=3.735E-29
70 REM Valor da massa reduzida, em gramas:
80 MR=3.338E-23
90 REM Valor da densidade do material, em g/cm3
100 DM=8
110 REM Valor da fracao de um dos componentes da liga:
120 RM = .53
130 REM Valor da constante dieltrica esttica:
140 CD=13
150 REM Valor da constante dieltrica dinmica:
160 CINF=11.6
170 REM Valor do parmetro de rede, em ngstrons:
180 PR=5.868
190 REM Valor da velocidade do som no material, em cm/s:
200 VS=350000!
210 REM Valor da velocidade do som que inclui os modos acusticos, em cm/s:
220 VP=360000!
230 REM Valor da constante piezoeletrica, em Coulomb/m2:
240 CP=.1025
250 REM Valor do potencial de perturbao, em eV:
260 E1=5.95
270 REM Valor da carga efetiva, em Coulomb:
280 CE=3.765E-20
281 GOTO 2000
290 REM T:120
300 N=18
305 M=0
310 T(1)=4.2
320 T(2)=7
330 T(3)=10
340 T(4)=15
350 T(5)=20
360 T(6)=30
370 T(7)=40
380 T(8)=50
390 T(9)=60
400 T(10)=70
410 T(11)=80
420 T(12)=100
430 T(13)=120
440 T(14)=150
450 T(15)=180
460 T(16)=220
470 T(17)=260
480 T(18)=300
490 NH(1)=8.79E+15

```

500 NH(2)=8.55E+15
510 NH(3)=7.99E+15
520 NH(4)=7.52E+15
530 NH(5)=7.19E+15
540 NH(6)=7.09E+15
550 NH(7)=7.12E+15
560 NH(8)=7.21E+15
570 NH(9)=7.29E+15
580 NH(10)=7.35E+15
590 NH(11)=7.33E+15
600 NH(12)=7.39E+15
610 NH(13)=7.49E+15
620 NH(14)=7.67E+15
630 NH(15)=8.3E+15
640 NH(16)=9.45E+15
650 NH(17)=9.99E+15
660 NH(18)=1.04E+16
670 MH(1)=5596
680 MH(2)=6147
690 MH(3)=7894
700 MH(4)=10240
710 MH(5)=13159
720 MH(6)=16493
730 MH(7)=19406
740 MH(8)=20997
750 MH(9)=21585
760 MH(10)=21445
770 MH(11)=20993
780 MH(12)=19517
790 MH(13)=18217
800 MH(14)=15667
810 MH(15)=13553
820 MH(16)=11445
830 MH(17)=10002
840 MH(18)=9055
850
860 REM T.100
870 N=15
875 M=0
880 T(1)=4.2
890 T(2)=7
900 T(3)=11
910 T(4)=15
920 T(5)=30
930 T(6)=40
940 T(7)=50
950 T(8)=60
960 T(9)=100
970 T(10)=120
980 T(11)=150
990 T(12)=180
1000 T(13)=220
1010 T(14)=260
1020 T(15)=300
1030 NH(1)=4.06E+16

GOSUB 2640

1040 NH(2)=4.05E+16
1050 NH(3)=3.96E+16
1060 NH(4)=3.84E+16
1070 NH(5)=3.56E+16
1080 NH(6)=3.48E+16
1090 NH(7)=3.44E+16
1100 NH(8)=3.43E+16
1110 NH(9)=3.54E+16
1120 NH(10)=3.61E+16
1130 NH(11)=3.71E+16
1140 NH(12)=3.81E+16
1150 NH(13)=3.94E+16
1160 NH(14)=4.11E+16
1170 NH(15)=4.3E+16
1180 MH(1)=6651
1190 MH(2)=6872
1200 MH(3)=7369
1210 MH(4)=7989
1220 MH(5)=10523
1230 MH(6)=12046
1240 MH(7)=13320
1250 MH(8)=14031
1260 MH(9)=14623
1270 MH(10)=14025
1280 MH(11)=12620
1290 MH(12)=11307
1300 MH(13)=9782
1310 MH(14)=8596
1320 MH(15)=7745
1330
1340 REM T.125
1350 N=22
1355 M=0
1360 T(1)=4.2
1370 T(2)=8
1380 T(3)=15
1390 T(4)=20
1400 T(5)=30
1410 T(6)=40
1420 T(7)=50
1430 T(8)=60
1440 T(9)=70
1450 T(10)=77
1460 T(11)=90
1470 T(12)=100
1480 T(13)=120
1490 T(14)=140
1500 T(15)=160
1510 T(16)=180
1520 T(17)=200
1530 T(18)=220
1540 T(19)=240
1550 T(20)=260
1560 T(21)=280
1565 T(22)=300

GOSUB 2640

1570 NH(1)=3.02E+16
1580 NH(2)=3.01E+16
1590 NH(3)=2.87E+16
1600 NH(4)=2.8E+16
1610 NH(5)=2.7E+16
1620 NH(6)=2.67E+16
1630 NH(7)=2.68E+16
1640 NH(8)=2.71E+16
1650 NH(9)=2.75E+16
1660 NH(10)=2.77E+16
1670 NH(11)=2.82E+16
1680 NH(12)=2.85E+16
1690 NH(13)=2.9E+16
1700 NH(14)=2.95E+16
1710 NH(15)=2.98E+16
1720 NH(16)=3E+16
1730 NH(17)=3.03E+16
1740 NH(18)=3.05E+16
1750 NH(19)=3.07E+16
1760 NH(20)=3.09E+16
1770 NH(21)=3.11E+16
1775 NH(22)=3.12E+16
1780 MH(1)=7239
1790 MH(2)=7608
1800 MH(3)=9041
1810 MH(4)=10186
1820 MH(5)=12640
1830 MH(6)=14519
1840 MH(7)=15695
1850 MH(8)=16433
1860 MH(9)=16667
1870 MH(10)=16634
1880 MH(11)=16364
1890 MH(12)=15987
1900 MH(13)=15114
1910 MH(14)=14043
1920 MH(15)=13044
1930 MH(16)=12119
1940 MH(17)=11250
1950 MH(18)=10486
1960 MH(19)=9816
1970 MH(20)=9189
1980 MH(21)=8724
1985 MH(22)=8309

GOSUB 2640

1990
2000 REM AMOSTRA 3278
2010 N=21
2015 M=0
2020 T(1)=4.2
2030 T(2)=5
2040 T(3)=6
2050 T(4)=7
2060 T(5)=8
2070 T(6)=9
2080 T(7)=10

2090 T(8)=12
 2100 T(9)=15
 2110 T(10)=20
 2120 REM T(11)=30
 2130 REM T(12)=35
 2140 REM T(13)=40
 2150 REM T(14)=45
 2160 REM T(15)=50
 2170 REM T(16)=60
 2180 REM T(17)=70
 2190 REM T(18)=80
 2200 T(11)=90
 2201 T(12)=100
 2202 T(13)=120
 2203 T(14)=140
 2204 T(15)=160
 2205 T(16)=180
 2206 T(17)=200
 2207 T(18)=225
 2208 T(19)=250
 2209 T(20)=275
 2210 T(21)=300
 2215 NH(1)=2.12E+15
 2220 NH(2)=2.12E+15
 2230 NH(3)=2.15E+15
 2240 NH(4)=2.09E+15
 2250 NH(5)=2.07E+15
 2260 NH(6)=2.02E+15
 2270 NH(7)=2E+15
 2280 NH(8)=1.95E+15
 2290 NH(9)=1.93E+15
 2300 NH(10)=1.96E+15
 2310 REM NH(11)=2.10E+15
 2320 REM NH(12)=2.16E+15
 2330 REM NH(13)=2.21E+15
 2340 REM NH(14)=2.26E+15
 2350 REM NH(15)=2.30E+15
 2360 REM NH(16)=2.36E+15
 2370 REM NH(17)=2.41E+15
 2380 REM NH(18)=2.44E+15
 2390 NH(11)=2.45E+15
 2391 NH(12)=2.45E+15
 2392 NH(13)=2.44E+15
 2393 NH(14)=2.44E+15
 2394 NH(15)=2.42E+15
 2395 NH(16)=2.41E+15
 2396 NH(17)=2.4E+15
 2397 NH(18)=2.41E+15
 2398 NH(19)=2.45E+15
 2399 NH(20)=2.5E+15
 2400 NH(21)=2.52E+15
 2405 MH(1)=6816
 2410 MH(2)=7038
 2420 MH(3)=7157
 2430 MH(4)=7551

```

2440 MH(5)=8033
2450 MH(6)=8949
2460 MH(7)=9364
2470 MH(8)=11323
2480 MH(9)=14184
2490 MH(10)=18141
2500 REM
2510 REM
2520 REM
2530 REM
2540 REM
2550 REM
2560 REM
2570 REM
2580 MH(11)=34242!
2581 MH(12)=32692
2582 MH(13)=29660
2583 MH(14)=25900
2584 MH(15)=22505
2585 MH(16)=19779
2586 MH(17)=17556
2587 MH(18)=15195
2588 MH(19)=13416
2589 MH(20)=12076
2590 MH(21)=11466
2595
2600 GOTO 5030
2610 N=22
2620 T(1)=0
2630 IF T(1)=0 THEN 5030 ELSE GOSUB 2640
2640 TD=400
2650 TX=10
2660 D1=.5
2670 DX=.1
2680 REM
2690 WZ=15
2700 GOSUB 2770
2710 CB=0
2720 Y0=DP
2730 TD=TD+TX
2740 GOSUB 2770
2750 IF Y0>DP THEN 2710 ELSE CB=CB+1
2760 IF CB=3 THEN 3250 ELSE 2720
2770 DU=D1
2780 GOSUB 2870
2790 TC=0
2800 X0=DP
2810 DU=DU+DX
2820 GOSUB 2870
2830 IF X0>DP THEN 2790 ELSE TC=TC+1
2840 IF TC<3 THEN 2800 ELSE DU=DU-3*DX
2850 GOSUB 2870
2860 RETURN
2870 NA=1E+20
2880 GOSUB 3370

```

GOSUB 2640

```

2890 D=DP
2900 NA=NA/10
2910 GOSUB 3370
2920 IF DP=>D THEN NA=10*NA ELSE 2890
2930 GOSUB 3370
2940 PT=0
2950 KL=0
2960 NX=NA
2970      PT=0
2980 DN=DP
2990 NA=NA+NX
3000 GOSUB 3370
3010 IF DP<DN THEN 2980 ELSE PT=PT+1
3020 IF PT=2 THEN NA=NA-2*NX ELSE 2980
3030 GOSUB 3370
3040 PT=0
3050 NX=NX/10
3060 DN=DP
3070 NA=NA-NX
3080 GOSUB 3370
3090 IF DP<DN THEN 3060 ELSE PT=PT+1
3100 IF PT=2 THEN NA=NA+2*NX ELSE 3060
3110 GOSUB 3370
3120 NX=NX/10
3130 KL=KL+1
3140 IF KL>2 THEN NA=NA+NX*10 ELSE 2970
3150 GOSUB 3370
3160 IF DP<WZ THEN WZ=DP ELSE 3200
3170 WN=NA
3180 YY=DU
3190 WT=TD
3200      PRINT"dp=";DP;
3210      PRINT"      Na=";NA;
3220      PRINT"      du=";DU;
3230      PRINT"      TD=";TD
3240 RETURN
3250 IF TX=1 THEN 3310
3260 TD=WT-10
3270 TX=1
3280 D1=YY-.1
3290 DX=.01
3300 GOTO 2690
3310 NA=WN
3320 DU=YY
3330 TD=WT
3340 BB=0
3350 GOSUB 3380
3360 GOTO 4830
3370 BB=0
3380 DP=0
3390 I=M
3400 IF I<N THEN I=I+1 ELSE RETURN
3410 Y=1
3420 REM  Calculo da densidade efetiva de estados na banda de conducao
3430 NC(I)=1.75638E+26*(ME*1E+20*T(I))1.5

```

```

3440 REM Calculo do Nivel de Fermi
3450 FIN=NH(I)/NC(I)
3460 Z=TD/T(I)
3480 IF Z>10 THEN 3610
3490 IF Z>5 THEN 3510 ELSE GZ=1.008-.646*Z+.458*Z^2-.09016*Z^3+6.1936E-03*Z^4
3500 GOTO 3540
3510 REM IF Z<5 THEN GZ=1.002-.331*Z+.1858*Z^2-1.808*Z^3 ELSE GZ=1.734+.2
022*(Z-5)-2.074E-2*(Z-5)^2+1.332E-3*(Z-5)^3
3520 GZ=.9814-.566*Z+.381*Z^2-.07289*Z^3+6.032E-03*Z^4-1.839E-04*Z^5
3525 REM GZ=.9891-.446*Z+.2817*Z^2-4.311E-02*Z^3+2.112E-03*Z^4
3530 REM Calculo da mobilidade limitada por fonons opticos polares MOP(I)
3540 MPO(I)=1.7482E-10*(1E+20*ME)^-1.5*TD^-1*T(I)^.5*CD*CINF/(CD-CINF)*(EXP(Z)
-1)*GZ
3550 REM Subrotina para calcular fator de Hall RPO(I) para fonons opticos polare
s
3560 IF Z>2 THEN 3580 ELSE RPO(I)=1.093-.10883*(Z-.2)-.37562*(Z-.2)^2+1.1111*(Z-
.2)^3-.73664*(Z-.2)^4+.150828*(Z-.2)^5
3570 GOTO 3610
3580 IF Z>5 THEN 3600 ELSE RPO(I)=1.278+.029843*(Z-2)-.13178*(Z-2)^2+.054926*(Z-
2)^3-6.8012E-03*(Z-2)^4
3590 GOTO 3610
3600 RPO(I)=1.069-.03918*(Z-5)+9.02E-03*(Z-5)^2-7.4064E-04*(Z-5)^3
3610 GOSUB 3630
3620 GOTO 3800
3630 REM Subrotina para calcular Nivel de Fermi Reduzido (NETA)
3640 IF FIN>3.3543E-04 THEN 3660 ELSE NETA(I)=-10.74+17534*FIN-27934700!*FIN^2
3650 RETURN
3660 IF FIN>2.4767E-03 THEN 3680 ELSE NETA(I)=-8.739+2374*FIN-512200!*FIN^2
3670 RETURN
3680 IF FIN>.018199 THEN 3700 ELSE NETA(I)=-6.134+284.6*(FIN-2E-03)-9438*(FIN-2E
-03)^2
3690 RETURN
3700 IF FIN>.1293 THEN 3720 ELSE NETA(I)=-4.325+41.06*(FIN-.01)-180.8*(FIN-.01)^
2
3710 RETURN
3720 IF FIN>.76515 THEN 3740 ELSE NETA(I)=-2.176+6.15*(FIN-.1)-4.327*(FIN-.1)^2
3730 RETURN
3740 IF FIN>8.8442 THEN 3760 ELSE NETA(I)=.09766+1.551*(FIN-.7)-.4165*(FIN-.7)^2
+.09138*(FIN-.7)^3-.01044*(FIN-.7)^4+4.58E-04*(FIN-.7)^5
3750 RETURN
3760 IF FIN>67.492 THEN 3780 ELSE NETA(I)=4.689+.3928*(FIN-8)-4.803E-03*(FIN-8)^
2+6.514E-05*(FIN-8)^3-3.819E-07*(FIN-8)^4
3770 RETURN
3780 NETA(I)=18.51+.2029*(FIN-60)-4.316E-04*(FIN-60)^2+1.321E-06*(FIN-60)^3-1.97
7E-09*(FIN-60)^4
3790 RETURN
3800 REM Subrotina para calcular fator de Hall RII(I) para impurezas ionizadas
3810 IF NETA(I)>-2 THEN 3830 ELSE RII(I)=1.933+2.805E-03*(NETA(I)+10)-2.589E-03*
(NETA(I)+10)^2+7.113E-04*(NETA(I)+10)^3-6.257E-05*(NETA(I)+10)^4
3820 GOTO 3870
3830 IF NETA(I)>2 THEN 3835 ELSE RII(I)=1.897-.0402*(NETA(I)+2)-.01678*(NETA(I)+
2)^2
3832 GOTO 3870
3835 IF NETA(I)>10 THEN 3850 ELSE RII(I)=1.467-.1343*(NETA(I)-2)+.01689*(NETA(I)
-2)^2-7.992E-04*(NETA(I)-2)^3

```

```

3840 GOTO 3870
3850 RII(I)=1.065-.01003*(NETA(I)-10)+8.119E-04*(NETA(I)-10)^2-3.536E-05*(NETA(I)-10)^3+7.668E-07*(NETA(I)-10)^4-6.445E-09*(NETA(I)-10)^5
3870 IF NETA(I)>-10 THEN 3880 ELSE RAS(I)=1.177
3875 GOTO 3930
3880 IF NETA(I)>-2 THEN 3892 ELSE RAS(I)=1.177-7.265E-04*(NETA(I)+10)+4.603E-06*(NETA(I)+10)^2-8.365E-06*(NETA(I)+10)^3
3890 GOTO 3930
3892 IF NETA(I)>2 THEN 3900 ELSE RAS(I)=1.167-.01068*(NETA(I)+2)-2.988E-03*(NETA(I)+2)^2
3895 GOTO 3930
3900 IF NETA(I)>12 THEN 3920 ELSE RAS(I)=1.077-.0273*(NETA(I)-2)+5.288E-03*(NETA(I)-2)^2-6.745E-04*(NETA(I)-2)^3+5.459E-05*(NETA(I)-2)^4-2.038E-06*(NETA(I)-2)^5
3910 GOTO 3930
3920 RAS(I)=1
3930 REM Subrotina para calcular fator de Hall RZ(I) para espalhamento piezoelet
rico
3940 IF NETA(I)>-10 THEN 3960 ELSE RZ(I)=1.105
3950 GOTO 3980
3960 IF NETA(I)>0 THEN 3970 ELSE RZ(I)=1.105+6.587E-04*(NETA(I)+10)-6.703E-04*(NETA(I)+10)^2+1.656E-04*(NETA(I)+10)^3-1.266E-05*(NETA(I)+10)^4
3970 IF NETA(I)>20 THEN RZ(I)=1 ELSE RZ(I)=1.083-.020975*NETA(I)+2.2418E-03*(NETA(I))^2-1.0958E-04*(NETA(I))^3+1.9944E-06*(NETA(I))^4
3980 REM Calculo da integral de  $E/kT \cdot \exp((E-F)/kT) / (1 + \exp((E-F)/kT))^2$ 
3990 IF NETA(I)>-7 THEN 4010 ELSE X1=4.54E-05+8.77E-05*(NETA(I)+10)-4.8033E-05*(NETA(I)+10)^2+3.8333E-05*(NETA(I)+10)^3
4000 GOTO 4060
4010 IF NETA(I)>-4 THEN 4030 ELSE X1=9.115E-04+1.733E-03*(NETA(I)+7)-9.22E-04*(NETA(I)+7)^2+7.5333E-04*(NETA(I)+7)^3
4020 GOTO 4060
4030 IF NETA(I)>0 THEN 4050 ELSE X1=.01815+.0201925*(NETA(I)+4)+5.51563E-03*(NETA(I)+4)^2+3.675E-03*(NETA(I)+4)^3+1.0578E-03*(NETA(I)+4)^4
4040 GOTO 4060
4050 IF NETA(I)>10 THEN X1=NETA(I) ELSE X1=.6881+.531*NETA(I)+.1176*(NETA(I))^2-.01262*(NETA(I))^3+4.865E-04*(NETA(I))^4
4060 REM Calculo da integral de  $(E/kT)^2 \cdot \exp((E-F)/kT) / (1 + \exp((E-F)/kT))^2$ 
4070 IF NETA(I)>-7 THEN 4090 ELSE X2=9.08E-05+1.75467E-04*(NETA(I)+10)-9.61667E-05*(NETA(I)+10)^2+7.67407E-05*(NETA(I)+10)^3
4080 GOTO 4180
4090 IF NETA(I)>-4 THEN 4110 ELSE X2=1.823E-03+3.49667E-03*(NETA(I)+7)-1.88889E-03*(NETA(I)+7)^2+1.52407E-03*(NETA(I)+7)^3
4100 GOTO 4180
4110 IF NETA(I)>0 THEN 4130 ELSE X2=.03431+.113075*(NETA(I)+4)-.0779375*(NETA(I)+4)^2+.0375469*(NETA(I)+4)^3
4120 GOTO 4180
4130 IF NETA(I)>10 THEN 4150 ELSE X2=2.005+.4389*NETA(I)+.9673*(NETA(I))^2
4140 GOTO 4180
4150 IF NETA(I)>30 THEN 4170 ELSE X2=103.3+20!*NETA(I)-10+(NETA(I)-10)^2
4160 GOTO 4180
4170 X2=903.2+59.95*(NETA(I)-30)+1.0013*(NETA(I)-30)^2
4180 REM Calculo da mobilidade limitada por alloy scattering MAS(I)
4190 MAS(I)=226630000000!*X1/(FIN*RM*(1-RM)*DU^2*T(I)^.5*PR^3*(ME*1E+30)^2.5)
4200 REM Calculo da mobilidade limitada por potencial de deformacao acustico MFA(I)

```

```

4210 REM      MFA(I)=704.78*DM*VS^2*X1/(FIN*T(I)^1.5*(ME*1E+30)^2.5*E1^2)
4220 REM Calculo da mobilidade limitada por espalhamento piezoeletrico MZ(I)
4230 REM      MZ(I)=2.744E-07*DM*(VP*CD)^2*X2/((ME*1E+30)^1.5*CP^2*T(I)^.5*FIN)
4240 REM Calculo da mobilidade limitada por impurezas ionizadas MII(I)
4250 IF Y=1 THEN N(I)=NH(I)
4260 GOSUB 4440
4270 IF B1<BB THEN 3400
4280 MII(I)=8.26772*CD^2*T(I)^1.5*ITG/((N(I)+2*NA)*FIN*G1*ME^.5)
4290 REM Calculo da mobilidade de Hall total MT(I)
4300 IF Z<10 THEN MT(I)=(1/(MII(I)*RII(I))+1/(RAS(I)*MAS(I))+1/(RPO(I)*MPO(I)))^
-1 ELSE MT(I)=(1/(RII(I)*MII(I))+1/(RAS(I)*MAS(I)))^-1
4310 REM Calculo da mobilidade efetiva total MOB(I)
4320 IF Z<10 THEN MOB(I)=(1/MAS(I)+1/MPO(I)+1/MII(I))^-1 ELSE MOB(I)=(1/MAS(I)+1
/MII(I))^-1
4330 REM Calculo do fator de Hall total RT(I)
4340 RT(I)=MT(I)/MOB(I)
4350 REM Calculo do novo valor da densidade de portadores
4360 N(I)=RT(I)*NH(I)
4370 NT(I)=NETA(I)
4380 REM Calculo do novo valor do nivel de Fermi
4390 FIN=N(I)/NC(I)
4400 GOSUB 3630
4410 Y=Y+1
4420 IF Y>5 THEN 4790
4430 IF ABS(NETA(I)-NT(I))>=1E-03 THEN 3610 ELSE 4790
4440 REM Calculo de E/kT medio
4450 IF NETA(I)>-7 THEN 4470 ELSE MX=3!+4.61E-05*(NETA(I)+10)-2.4322E-05*(NETA(I
)+10)^2+1.3033E-05*(NETA(I)+10)^3
4460 GOTO 4540
4470 IF NETA(I)>-4 THEN 4490 ELSE MX=3!+5.2933E-04*(NETA(I)+7)-2.8678E-04*(NETA(
I)+7)^2+2.2848E-04*(NETA(I)+7)^3
4480 GOTO 4540
4490 IF NETA(I)>0 THEN 4510 ELSE MX=3.005+3.27E-03*(NETA(I)+4)+6.825E-03*(NETA(I
)+4)^2-1.8391E-03*(NETA(I)+4)^3+9.125E-04*(NETA(I)+4)^4
4500 GOTO 4540
4510 IF NETA(I)>10 THEN 4530 ELSE MX=3.231+.2165*NETA(I)+.08825*(NETA(I))^2-3.64
8E-03*(NETA(I))^3
4520 GOTO 4540
4530 MX=10.53+.976*(NETA(I)-10)+3.6113E-04*(NETA(I)-10)^2
4540 REM Calculo da integral de Fermi para -1/2
4550 IF NETA(I)>-5 THEN 4570 ELSE FM=4.568E-05+1.074E-04*(NETA(I)+10)-1.193E-04*
(NETA(I)+10)^2+1.194E-04*(NETA(I)+10)^3-3.57E-05*(NETA(I)+10)^4+5.274E-06*(NETA(
I)+10)^5
4560 GOTO 4620
4570 IF NETA(I)>0 THEN 4590 ELSE FM=6.696E-03+1.159E-03*(NETA(I)+5)+.01536*(NETA
(I)+5)^2-7.778E-03*(NETA(I)+5)^3+2.888E-03*(NETA(I)+5)^4-1.996E-04*(NETA(I)+5)^5
4580 GOTO 4620
4590 IF NETA(I)>10 THEN 4610 ELSE FM=.6073+.3511*NETA(I)+.0998*NETA(I)^2-.04242*
NETA(I)^3+6.93E-03*NETA(I)^4-5.321E-04*NETA(I)^5+1.578E-05*NETA(I)^6
4600 GOTO 4620
4610 FM=3.547+.1927*(NETA(I)-10)-7.988E-03*(NETA(I)-10)^2+5.391E-04*(NETA(I)-10)
^3-2.302E-05*(NETA(I)-10)^4+4.968E-07*(NETA(I)-10)^5-4.148E-09*(NETA(I)-10)^6
4620 REM Calculo do com primento de blindagem do potencial de Yukawa L1
4630 L1=2.92812E-22*SQR(CD*1E+20^1.5)*SQR(1/(FM*T(I)^.5*(ME*1E+20*1E-03)^1.5))*1
E-10

```

```

335 L2=6.9323E-30*ME^(-3/4)*T(I)^(-1/4)*FM^(-1/2)/CD^(-.5)
340 B1=9.9311E+30*ME*T(I)*L1^2*MX*1000000000000!
342 B2=1.4161E+24*CD*T(I)^2*ME/N(I)*1E+20
344 B3=3.4254E+23*ME*CD*T(I)*MX*1E+30/N(I)*100000000000!
346 B4=3.4724E+18*T(I)*ME/N(I)^(2/3)*1E+20
350 G1=LOG(1+B1)-B1/(1+B1)
360 REM Calculo da integral de (E/kT)^3*EXP((E-F)/kT)/(1+EXP((E-F)/kT)^2
370 IF NETA(I)>-7 THEN 4690 ELSE ITG=2.724E-04+5.26333E-04*(NETA(I)+10)^-2.88667
380 * (NETA(I)+10)^2+2.30259E-04*(NETA(I)+10)^3
390 GOTO 4780
400 IF NETA(I)>-4 THEN 4710 ELSE ITG=5.471E-03+.0105367*(NETA(I)+7)^-5.73889E-03
410 * (NETA(I)+7)^2+4.6E-03*(NETA(I)+7)^3
420 GOTO 4780
430 IF NETA(I)>0 THEN 4730 ELSE ITG=.1097+.030825*(NETA(I)+4)+.2111*(NETA(I)+4)
440 -.082375*(NETA(I)+4)^3+.0276172*(NETA(I)+4)^4
450 GOTO 4780
460 IF NETA(I)>10 THEN 4750 ELSE ITG=5.324+5.911*(NETA(I) )+1.062*(NETA(I) )^
470 .8803*(NETA(I) )^3+4.776E-03*(NETA(I) )^4
480 GOTO 4780
490 IF NETA(I)>30 THEN 4770 ELSE ITG=1099+309.9*(NETA(I)-10)+30*(NETA(I)-10)^2+
500 * (NETA(I)-10)^3
510 GOTO 4780
520 ITG=27300!+2708.5*(NETA(I)-30)+99.15*(NETA(I)-30)^2+.99825*(NETA(I)-30)^3
530 RETURN
540 REM Calculo do desvio relativo entre as mobilidades teorica e experimental
550 DP=DP+ABS(MH(I)-MT(I))/MH(I)
560 REM DP=DP+(MH(I)-MT(I))^2
570 GOTO 3400
580 REM OPEN "FIT.DAT" FOR OUTPUT AS #1
590 I=M
600 I=I+1
610 PRINT#1 USING"###.##";T(I);
620 PRINT#1 USING" ###.##";NETA(I);
630 PRINT#1 USING" ###.##";N(I);
640 PRINT#1 USING" ###.##";RT(I);
650 PRINT#1 USING" #####";MH(I);
660 PRINT#1 USING" #####";MT(I);
670 PRINT#1 USING" ###.##";(MH(I)-MT(I))*100/MH(I);
680 PRINT#1 USING" #####";MII(I)*RII(I);
690 PRINT#1 USING" #####";MAS(I)*RAS(I);
700 IF Z<10 THEN PRINT#1 USING" #####";MPO(I)*RPO(I)
710 IF I<=N-1 THEN 4850
720 PRINT#1,WN
730 PRINT#1 USING"###.##";SQY(Y^2*RM*(1-RM))
740 PRINT#1 USING"###.##";YY
750 PRINT#1,WT
760 PRINT#1,WZ
770 RETURN
780 END

```