

Este exemplar
responsável a redação
da tese defendida pela
Suhaila Maluf Shibli e aprovada
pela comissão pela
aluna
Juliana e aprovada
Mauro M. G. de Carvalho

"CARACTERIZAÇÃO ELÉTRICA DE CAMADAS EPITAXIAIS

DE $\text{In}_{0,71}\text{Ga}_{0,29}\text{As}_{0,63}\text{P}_{0,37}$ "

SUHAILA MALUF SHIBLI

Orientador: Mauro Monteiro Garcia de Carvalho

Tese apresentada ao Instituto
de Física "Gleb Wataghin" pa-
ra obtenção do título de Mes-
tre em Física.

Aos meus pais Talab e Anna

Às minhas irmãs Si e Sá

Ao meu amigo e companheiro

Antonio Carlos

A G R A D E C I M E N T O S

- Ao Prof. Mauro M. G. de Carvalho, pela orientação.e apoio.
- Ao Antonio Carlos, por toda ajuda prestada tanto no laboratório durante as transferências de He quanto na parte computacional desta tese.
- Aos Profs. do Instituto de Física, que colaboraram na execução deste trabalho.
- Ao Lino, Márcia, Beny, Pedrinho e Laerte, pela ajuda presta-da.
- À Maria José, Ayrton e Fernando, pelas medidas de fotoluminescência.
- Aos técnicos da Criogenia, pelo excelente trabalho que realizam.
- Aos meus amigos, que acompanharam-me nesta travessia.
- Ao CNPq e Telebrás, pelo suporte financeiro.

R E S U M O

A liga quaternária semicondutora InGaAsP vem sendo utilizada na fabricação de dispositivos optoeletrônicos, os quais requerem um alto grau de controle quanto às suas características. Para isto, é necessário determinar certos parâmetros deste material. Informações sobre o número e mobilidade dos portadores, energia do nível de impurezas e mecanismos de condução, entre outras, são obtidas medindo-se a resistividade e o efeito Hall em função da temperatura.

O presente trabalho consta de dois objetivos principais:

- a) Montagem e operação de equipamento para medidas de efeito Hall e resistividade em função da temperatura usando líquidos criogênicos.
- b) Análise dos resultados através de cálculos computacionais.

A B S T R A C T

The quaternary alloy InGaAsP has been used in the fabrication of optoelectronic devices which require high degrees of control as far as their properties are concerned.

Thus, it becomes necessary to determine some of its characteristic parameters. Information about the number and mobility of carriers, impurity energy level and conduction mechanisms, among others, are yielded by resistivity and Hall Effect measurements as a function of temperature.

The present work has two main goals:

- a) Setting up and dealing with the proper experimental arrangements for such measurements using criogenic liquids.
- b) Analysing experimental results using computational calculations.

Introdução	1
 CAPÍTULO I - Caracterização Elétrica de Semicondutores	 3
I.1 - Método de Caracterização Utilizado	3
I.2 - Fenômenos de Transporte de Cargas	4
I.2.1 - Equação de Boltzmann e Tempo de Relaxação	5
I.2.2 - Densidade de Corrente Elétrica	11
I.2.3 - Condutividade Elétrica e Mobilidade Eletrônica .	13
I.3 - Efeito Hall	15
I.4 - Concentração de Portadores em Função da Temperatura	19
I.4.1 - Semicondutores Dominados por Níveis de Impureza	21
 CAPÍTULO II - Mecanismos de Espalhamento	 23
II.1 - Introdução	23
II.2 - Teoria de Espalhamento	24
II.3 - Espalhamento por Impurezas Ionizadas	26
II.4 - Espalhamento por Fonons Acústicos	32
II.5 - Espalhamento por Fonons Ópticos Polares	34
II.6 - Espalhamento por Desordem no Potencial da Rede ..	37
II.6.1 - O Potencial Virtual	38
II.6.2 - Mobilidade Limitada por Desordem no Potencial da Rede	39
II.6.3 - Potencial de Desordem para Ligas Quaternárias .	42
II.6.4 - Intensidade do Potencial ΔU	44

CAPÍTULO III - Experimento	46
III.1 - Criostato e Sistema de Vácuo	46
III.2 - Suporte de Amostras	48
III.2.1 - As Amostras e Seus Contatos	51
III.3 - Conjunto de Equipamentos de Medida Utilizados .	52
III.4 - Procedimento Experimental	54
III.5 - Fontes de Erros Experimentais	56
CAPÍTULO IV - Apresentação e Análise dos Resultados Experi- mentais	58
IV.1 - Estudo dos Parâmetros a serem utilizados	58
IV.2 - Resultados Experimentais	59
IV.3 - Método de Análise da Mobilidade	67
IV.4 - Resultados da Análise e Discussão	70
CAPÍTULO V - Conclusões	77
Apêndice I - INTEGRAL : Programa que calcula o nível de Fer- mi	78
Apêndice II - HALL : Programa que calcula R_H , ρ e μ_H com os dados obtidos experimentalmente	79
Apêndice III - FINAL : Programa que calcula as mobilidades teóricas	82
Apêndice IV - TEORIA : Programa que calcula ΔU	85
Referências	89

Quando um semicondutor é submetido a um campo elétrico, os portadores livres (elétrons ou buracos) sofrem ação de uma força. A presença de imperfeições no cristal e o próprio movimento térmico dos íons que formam a rede limitam o movimento destes portadores. O resultado do movimento conjunto de todos os elétrons da banda de condução é o equivalente ao que teríamos se considerássemos que todos os elétrons tivessem um só movimento médio constante na direção do campo. Este será proporcional à intensidade do campo elétrico. Assim:

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

A constante de proporcionalidade μ , chamada mobilidade eletrônica, depende da temperatura e das propriedades intrínsecas do material, sendo invariante para pequenos campos elétricos.

No sentido esboçado acima, a mobilidade é uma medida dos efeitos das imperfeições do potencial cristalino sobre os portadores de carga. É, portanto, um bom indicador de qualidade do material analisado e o principal tema a ser desenvolvido neste trabalho. Além disso, calcularemos as densidades de impurezas ionizadas e o potencial de espalhamento por desordem na rede da liga $\text{In}_{0,71}\text{Ga}_{0,29}\text{As}_{0,63}\text{P}_{0,37}$, que é usada na região ativa do laser. Tais resultados são obtidos através de análises computacionais de dados experimentais coletados para temperatura entre 4,2 K e a temperatura ambiente.

No primeiro capítulo introduzimos a teoria de transporte de carga.

No segundo capítulo encontra-se a teoria dos mecanismos de espalhamento necessários para o estudo do InGaAsP.

No terceiro capítulo descrevemos detalhadamente o equipamento experimental e o método de medidas utilizado.

No quarto capítulo apresentamos os resultados experimentais e a análise feita em cima deles.

No quinto capítulo relatamos as conclusões finais do trabalho.

CAPÍTULO I - CARACTERIZAÇÃO ELÉTRICA DE SEMICONDUTORES

Através da caracterização elétrica dos semicondutores obtemos informações valiosas para a fabricação de bons dispositivos, inclusive, sobre a possibilidade de certo material ser usado para tal fim.

A caracterização dos materiais têm estabelecido uma importante ligação entre o crescimento dos cristais e a produção de dispositivos. E, é esta a finalidade deste trabalho, fornecer dados a respeito do material analisado, para que haja um maior conhecimento do que está sendo feito e as prováveis mudanças para um aprimoramento dos resultados obtidos.

I.1 - Método de Caracterização Utilizado

A escolha do método de caracterização¹ está, frequentemente, relacionada com a informação requerida e a natureza do material a ser analisado. Um outro fator importante, que influencia o método de caracterização, é o nível tecnológico do referido material. Entre os métodos de caracterização existentes, o de nosso maior interesse são as medidas de transporte. As distintas propriedades dos semicondutores são mais aparentes nas suas simples propriedades de transporte, portanto, mesmo com o alto nível alcançado pela física de semicondutores e a maturidade tecnológica desta classe de materiais, este continua a ser o método mais básico para se caracterizar semicondutores, isto porque, apresenta uma medida dos efeitos das imperfeições do potencial cristalino sobre os portadores de carga.

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

I.2 - Fenômenos de Transporte de Cargas

Da larga variedade de fenômenos de transporte de cargas, os efeitos galvanomagnéticos têm provado ser os mais valiosos para a caracterização de semicondutores, entre eles os de maior interesse são os efeitos Hall² e de magnetoresistência e obviamente, a condutividade elétrica para o campo magnético nulo.

Através do coeficiente de Hall³ (R_H) podemos na maioria das vezes obter a densidade de portadores livres, que justamente nos dá uma indicação imediata do número de portadores de carga (elétrons ou buracos) no material estudado e do nível de dopagem desta amostra. Através destas duas grandezas podemos obter a mobilidade dos portadores (μ).

O estudo desses parâmetros em função da temperatura fornece outros dados importantes, tais como, a energia de ionização dos átomos de impureza da amostra e a caracterização dos mecanismos de espalhamento dos portadores com os distintos defeitos da rede cristalina. Se estes mecanismos de espalhamento de portadores podem ser descritos por um tempo de relaxação (τ), então a equação de transporte de Boltzmann pode ser solucionada dando expressões para os parâmetros de transporte em ter-

mos de massa efetiva (m^*), tempo de relaxação, e densidade de portadores do material. É o que veremos a seguir.

1.2.1 - Equação de Boltzmann e Tempo de Relaxação

No equilíbrio, a função de distribuição dos elétrons e dos buracos, em um sólido, é a função de Fermi-Dirac. Se aplicarmos um campo externo, esta função se modificará, mas o número de estados permitidos se conservará (Teorema de Liouville).

$$df/dt = 0 \quad (I-1)$$

sendo f a função de distribuição perturbada e t o tempo.

A alteração provocada pela introdução de um campo de forças externa, introduzirá modificações na função distribuição, de modo que esta se desenvolverá no tempo segundo:

$$\frac{df}{dt}(\vec{r}, \vec{k}, t) = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} \cdot \frac{d\vec{k}}{dt} \quad (I-2)$$

onde \vec{r} e \vec{k} são os vetores posição e de onda, respectivamente.

Se \vec{F}_t é a força total que age sobre um portador de cargas, por conta das eqs. (I-1) e (I-2) podemos escrever:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{\vec{F}_t \cdot \nabla_{\vec{k}} f}{\hbar} = 0 \quad (I-3)$$

onde \vec{v} é a velocidade do portador de carga, $\nabla_{\vec{r}}$ e $\nabla_{\vec{k}}$ são, res

pectivamente, os gradientes dos espaços \vec{r} e \vec{k} .

No nosso estudo consideraremos somente as forças externas independentes do tempo, ou seja, num regime estacionário, $\partial f / \partial t = 0$.

Agora, separaremos as contribuições das forças externas \vec{F} e internas \vec{F}_{int} , devido às colisões, e escreveremos (I-3) como:

$$\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{\vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f}{\hbar} + \frac{\vec{F}_{int}}{\hbar} \cdot \nabla_{\vec{k}} f = 0 \quad (\text{I-4})$$

Escrevendo $\frac{\partial f}{\partial t}$ de outra forma e usando (I-4), temos:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{campo externo}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{colisão}} = 0 \quad (\text{I-5})$$

$$\text{com} \quad - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{campo externo}} = \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\vec{k}} f$$

$$\text{e} \quad - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{colisão}} = \frac{\vec{F}_{int}}{\hbar} \cdot \nabla_{\vec{k}} f$$

A eq. (I-5) mostra que a ação dos campos externos é compensada pelas colisões. Esta é a equação de Boltzmann para o caso estacionário.

A consequência imediata da aplicação de um campo elétrico sobre um cristal, é que aparece uma densidade de corrente elétrica, dada por:

$$\vec{j} = \frac{e}{4\pi^3} \int \vec{v} \cdot f \, d^3 k \quad (\text{I-6})$$

Para determinar \vec{J} , temos que conhecer f e por consequência, resolver a eq. (I-5). A solução para um campo qualquer é impossível analiticamente mas, para campo não muito forte, podemos escrever:

$$f(\vec{r}, \vec{k}) = f_0(\vec{r}, \vec{k}) + f_1(\vec{r}, \vec{k}) \quad (\text{I-7})$$

onde f_0 é a função de distribuição no equilíbrio e f_1 é a perturbação de primeira ordem.

Por outro lado, supomos que, uma vez que o campo externo seja cessado, a função f tenderá a f_0 de forma exponencial, ou seja

$$f(\vec{r}, \vec{k}, t) - f_0(\vec{r}, \vec{k}) = \{f(\vec{r}, \vec{k}, 0) - f_0(\vec{r}, \vec{k})\} \exp(-t/\tau)$$

ou então:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{colisão}} = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (\text{I-8})$$

onde τ , conhecido como tempo de relaxação, é a grandeza que indica a que velocidade o estado de equilíbrio, perturbado por campos externos, se reestabelece quando cessa a causa da perturbação. A expressão (I-8) é dada como a aproximação do tempo de relaxação.

Se considerarmos que o tempo de relaxação não varia com o campo externo, de (I-4), (I-5), (I-7) e (I-8) obtemos:

$$\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f_0 + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f_1 + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot (\nabla_{\vec{k}} f_0 + \nabla_{\vec{k}} f_1) = -\frac{f_1}{\tau} \quad (\text{I-9})$$

mas⁵

$$\nabla_{\vec{r}} f_0 = - \frac{\partial f_0}{\partial E} \left\{ \nabla_{\vec{r}} F' + (E - F') \frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right\}$$

e

$$\nabla_{\vec{k}} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \nabla_{\vec{k}} E = \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \hbar \vec{v}$$

onde E é a energia e F' é a energia do nível de Fermi.

Estudaremos agora o caso de um material homogêneo num campo externo uniforme ($\nabla_{\vec{r}} F' = 0$) e que se encontra em uma mesma temperatura ($\nabla T = 0$). Neste caso, a eq. (I-9) será escrita:

$$\vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}} f_1 + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \hbar \vec{v} + \nabla_{\vec{k}} f_1 \right) = - \frac{f_1}{\tau} \quad (\text{I-10})$$

Consideraremos, agora, que o campo externo é da forma da força de Lorentz, ou seja, $\vec{F} = e(\vec{\xi} + \vec{v} \times \vec{B})$ onde $\vec{\xi}$ é o campo elétrico e \vec{B} o campo magnético aplicado, \vec{v} é a velocidade do portador de carga. Faremos, primeiramente, duas hipóteses para encontrar f_1 :

1º) Os campos não são muito fortes de maneira que:

$$\nabla_{\vec{r}} f \approx \nabla_{\vec{r}} f_0, \quad \text{isto implica em}$$

$$\nabla_{\vec{r}} f_1 \approx 0$$

2º) O campo elétrico tem que ser fraco para manter válido a lei de Ohm ($\vec{J} = \vec{\xi}$). Consequentemente, os termos de ordem superior a $\vec{\xi}$ serão desprezados.

Se desprezarmos o termo $\nabla_{\vec{k}} f_1$ em (I-10) teremos uma solução para f_1 da forma:

$$f_1 \approx \vec{\xi} \cdot \vec{v} \frac{\partial f_0}{\partial E}$$

que é independente de \vec{B} , em uma aproximação bastante grosseira.

Entretanto, tentaremos usar uma solução da mesma forma mas que não despreze o termo $\nabla_{\vec{k}} f_1$, ou seja,

$$f_1 = - \vec{\chi}(\vec{k}, \vec{r}) \cdot \vec{v} \frac{\partial f_0}{\partial E} \quad (\text{I-11})$$

onde $\vec{\chi}(\vec{k}, \vec{r})$ é uma função vetorial a ser determinada.

Se substituirmos a eq. (I-11) em (I-10) por conta das hipóteses feitas, teremos:

$$e \vec{\xi} \cdot \vec{v} - \frac{e}{\hbar^2} (\vec{v} \times \vec{B}) (\vec{\chi} \cdot \nabla_{\vec{k}}) \cdot \nabla_{\vec{k}} E = \frac{\vec{\chi} \cdot \vec{v}}{\tau}$$

$$e \vec{\xi} \cdot \vec{v} + \frac{e}{\hbar^2} \{ (\vec{\chi} \cdot \nabla_{\vec{k}}) \nabla_{\vec{k}} E \times \vec{B} \} \cdot \vec{v} = \frac{\vec{\chi} \cdot \vec{v}}{\tau}$$

$$\vec{\chi} = e \tau \left[\frac{1}{\hbar^2} \{ (\vec{\chi} \cdot \nabla_{\vec{k}}) \cdot \nabla_{\vec{k}} E \times \vec{B} \} + \vec{\xi} \right] \quad (\text{I-12})$$

No caso de uma banda parabólica de simetria esférica, podemos escrever⁶:

$$v_i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_i} = \frac{1}{\hbar k_i} \frac{dE}{dk_i} k_i = \frac{\hbar k_i}{m^*}$$

onde m^* é a massa efetiva.

De (I-12) tiramos que;

$$\vec{\chi} = \frac{\tau e}{m^*} (\vec{\chi} \times \vec{B}) + \tau e \vec{\xi} \quad (\text{I-13})$$

Para calcular $\vec{\chi}$, faremos:

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

$$\mu (\vec{\chi} \times \vec{B}) = \mu^2 \{ (\vec{\chi} \times \vec{B}) \vec{B} - B^2 \vec{\chi} \} + \tau e \mu \vec{\xi} \times \vec{B} \quad (\text{I-14})$$

onde $\mu = \frac{|\vec{v}|}{|\vec{\xi}|} = \frac{|\vec{a}| \tau}{|\vec{\xi}|} = \frac{e \vec{\xi} \tau}{m^* |\vec{\xi}|} = \frac{e \tau}{m^*}$ é a mobilidade eletrônica e a aceleração.

De (I-13), temos as expressões:

$$\mu (\vec{\chi} \times \vec{B}) = \vec{\chi} - \tau e \vec{\xi} \quad e$$

$$\vec{\chi} \cdot \vec{B} = \mu (\vec{\chi} \times \vec{B}) \cdot \vec{B} + \tau e \vec{\xi} \cdot \vec{B} = \tau e \vec{\xi} \cdot \vec{B}$$

A eq. (I-14) será escrita:

$$\vec{\chi} - \tau e \vec{\xi} = \mu^2 \{ \tau e (\vec{\xi} \cdot \vec{B}) \vec{B} - B^2 \vec{\chi} \} + \tau e \mu \vec{\xi} \times \vec{B}$$

$$\vec{\chi} (1 + \mu^2 B^2) = \tau e \{ \mu^2 (\vec{\xi} \cdot \vec{B}) \vec{B} + \mu \vec{\xi} \times \vec{B} + \vec{\xi} \}$$

$$\vec{\chi} = \frac{\tau e \{ \mu^2 (\vec{\xi} \cdot \vec{B}) \vec{B} + \mu (\vec{\xi} \times \vec{B}) + \vec{\xi} \}}{1 + \mu^2 B^2} \quad (\text{I-15})$$

Quando $\vec{\xi}$ é paralelo a \vec{B} , caso longitudinal, a eq. (I-15) fica $\vec{\chi} = \tau e \vec{\xi}$, que é independente de \vec{B} . Isto é o mesmo que dizer que o campo magnético longitudinal não altera em

nada os parâmetros de transporte para o caso de uma massa efetiva parabólica esférica.

Para $\vec{\xi}$ perpendicular a \vec{B} , caso transversal, teremos:

$$\vec{\chi} = \frac{e \tau \{ \mu (\vec{\xi} \times \vec{B}) + \vec{\xi} \}}{1 + \mu^2 B^2} \quad (\text{I-16})$$

que depende de \vec{B} . Isto significa que um campo transversal altera os parâmetros de transporte.

Substituindo as eqs. (I-11) e (I-16) em (I-7), teremos que:

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

$$\text{onde } f_1(\vec{r}, \vec{k}) = - \frac{\partial f_0}{\partial E} \cdot \frac{e \tau \vec{\xi} \cdot \vec{v} + \frac{e^2 \tau^2}{m^{*2}} (\vec{\xi} \times \vec{B}) \cdot \vec{v}}{1 + \frac{e^2 \tau^2}{m^{*2}} B^2} \quad (\text{I-17})$$

I.2.2 - Densidade de Corrente Elétrica

Faremos, agora, considerações à respeito da densidade de corrente elétrica, dada por:

$$\vec{J} = \frac{e}{4\pi^3} \int_{\text{col.}} \vec{v} f d^3k = \frac{e}{4\pi^3} \{ \int \vec{v} f_0 d^3k + \int \vec{v} f_1 d^3k \}$$

Teremos que $\int \vec{v} f_0 d^3k = 0$, porque em equilibri

o termodinâmico não existe corrente elétrica,

Assim,

$$\vec{J} = \frac{e}{4\pi^3} \int \vec{v} \cdot f_1 d^3k \quad (\text{I-18})$$

tendo em conta as eqs. (I-11) e (I-17), a eq. (I-18), torna-se:

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

Que pode ser escrito na forma:

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

ou

$$\vec{J} = - \frac{e^2}{4\pi^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\tau v^2 \vec{\xi}}{1 + \mu^2 B^2} d^3k - \frac{e^3}{4\pi^3} \int \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{v^2 \left(\frac{\tau}{m^*}\right) \vec{\xi} \times \vec{B}}{1 + \mu^2 B^2} d^3k \quad (\text{I-19})$$

Para simplificar a notação introduziremos, os coeficientes cinéticos:

$$\kappa_{rs}^{ij} = - \frac{1}{4\pi^3} \int \frac{\xi^{r-1} \tau^s}{1 + \mu^2 B^2} \frac{\partial f_0}{\partial E} v_i v_j d^3k \quad (\text{I-20})$$

Pode ser mostrado que $\kappa_{rs}^{ij} = 0$ se $i \neq j$. Portanto, denotaremos κ_{rs}^{ij} por κ_{rs} sendo intrínscico que $i = j$. Assim, de acordo com (I-19) a densidade de corrente pode ser expressa por:

$$\vec{J} = e^2 \vec{\xi} \kappa_{11} + \frac{e^3}{m^*} \vec{\xi} \times \vec{B} \kappa_{12} \quad (\text{I-21})$$

I.2.3 - Condutividade Elétrica e Mobilidade Eletrônica

Para encontrarmos a condutividade elétrica de um semicondutor é necessário estabelecermos uma relação entre o campo elétrico aplicado e a densidade de corrente obtida. Fazendo $\vec{B} = 0$ na eq. (I-21), teremos que:

$$\vec{J} = \sigma \vec{\xi} = e^2 \kappa_{11} \vec{\xi} \quad (\text{I-22})$$

onde $\sigma = e^2 \kappa_{11}$ é a condutividade elétrica.

O coeficiente cinético κ_{11} pode ser relacionado com a densidade de portadores, através de:

$$\kappa_{11} = \frac{n \langle \tau \rangle}{m^*} \quad (\text{I-23})$$

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

$$\sigma = e n \frac{e \langle \tau \rangle}{m^*} = e n \mu_D \quad (\text{I-24})$$

onde μ_D é a mobilidade média dos elétrons.

Como a resistividade ρ é o inverso da condutividade, temos:

$$\mu_D = \frac{1}{\rho e n} \quad (\text{I-25})$$

A condutividade e a mobilidade dos portadores são determinados pela média do tempo de relaxação que é feita

na ausência do campo magnético de forma que, para material não-degenerado e que obedece a estatística de Boltzmann, teremos:

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-x} \tau(x) dx}{\int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-x} dx} \quad (I-26)$$

onde $x = \frac{E}{k_B T}$ e k_B a constante de Boltzmann

Se o tempo de relaxação é uma função potência da energia, $\tau(x) = \tau_0 x^p$, então a eq. (I-26), para um material não-degenerado, pode ser escrita:

$$\langle \tau \rangle = \tau_0 \frac{\Gamma(5/2 + p)}{\Gamma(5/2)} \quad (I-27)$$

Na tabela 1 encontramos os valores de $\langle \tau \rangle / \tau_0$ para diferentes valores de p , relativos aos mecanismos de espalhamento mais comumente encontrados.

TABELA 1:

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

Para um semiconductor degenerado, temos que:

$$\langle \tau \rangle = \tau(F') \quad , \quad \text{onde } F' \text{ é a energia de Fermi.}$$

Isto significa que a mobilidade média dos elétrons não depende do tempo de relaxação dos elétrons ou dos buracos se estes esti

verem nos estados vizinhos da superfície de Fermi. Isto porque, em um semiconductor degenerado s \tilde{o} participam do transporte de cargas os el \tilde{e} trons cujas energias est \tilde{a} o compreendidas no intervalo $F' \pm k_B T$. Com efeito, f_1 da eq. (I-17) ser \tilde{a} nulo para $E \neq F'$, sendo que a transi \tilde{c} o dos el \tilde{e} trons entre os n \tilde{i} veis de energia \tilde{e} imposs \tilde{i} vel, pois eles est \tilde{a} o ocupados. Mas o n \tilde{u} mero

de el \tilde{e} trons pr \tilde{o} ximos \tilde{a} superf \tilde{i} cie de Fermi tende \tilde{a} concentrar-se na superf \tilde{i} cie de Fermi, portanto o n \tilde{u} mero

portadores de cargas ativos deve ser proporcional ao n \tilde{u} mero total dos el \tilde{e} trons, assim temos que:

$$\sigma = en\mu(F) = \frac{e^2 \tau(F) n}{m^*}$$

onde n \tilde{e} o n \tilde{u} mero total de el \tilde{e} trons.

1.3 - Efeito Hall

Se aplicarmos um campo el \tilde{e} trico $\vec{\xi} = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ e um campo magn \tilde{e} tico $\vec{B} = (0, B_y, 0)$ a um semiconductor homog \tilde{e} neo com temperatura T constante e densidade de corrente $\vec{J} = (J_x, 0, 0)$, poderemos escrever, baseados na eq. (I-21), que:

$$J_x = e^2 \xi_x \kappa_{11} - \frac{e^3}{m^*} \kappa_{12} \xi_z B \quad (I-28)$$

$$J_y = e^2 \xi_y \kappa_{11} = 0 \quad \rightarrow \quad \xi_y = 0 \quad (I-29)$$

$$J_z = e^2 \xi_z \kappa_{11} + \frac{e^3}{m^*} \kappa_{12} \xi_x B = 0 \quad (I-30)$$

De (I-30) temos que :

$$\xi_z = - \frac{e}{m^*} \frac{\kappa_{12}}{\kappa_{11}} B \xi_x = - \mu_H B \xi_x \quad (\text{I-31})$$

onde μ_H é a mobilidade de Hall.

A componente ξ_z representa o efeito Hall, ou ainda, ξ_z é o campo de Hall. Para exprimirmos J_x em função de E_x substituímos (I-31) em (I-28):

$$J_x = e^2 \kappa_{11} \xi_x \left(1 + \frac{e^2}{m^{*2}} \frac{\kappa_{12}^2}{\kappa_{11}^2} B^2 \xi_x \right) = \sigma_B \xi_x \quad (\text{I-32})$$

onde

$$\sigma_B = e^2 \kappa_{11} + \frac{e^4}{m^{*2}} \frac{\kappa_{12}^2}{\kappa_{11}^2} B^2 = e^2 \kappa_{11} (1 + \mu_H^2 B^2) \quad (\text{I-33})$$

é a condutividade elétrica na direção do campo ξ_x devido a aplicação de um campo magnético.

Se aplicarmos uma corrente na direção x , do semicondutor já citado, e um campo magnético na direção y aparecerá um campo elétrico na direção z . A expressão, para campos fracos,

$$R_H = - \frac{\xi_z}{J_x B} \quad (\text{I-34})$$

é praticamente independente dos campos externos aplicados e R_H é a constante de Hall. Das expressões anteriores tiramos que:

$$|R_H| = \frac{\mu_H}{\sigma_B} = \frac{\frac{e}{m^*} (\kappa_{12} / \kappa_{11})}{e^2 \kappa_{11} \left(1 + \frac{e^2}{m^{*2}} \frac{\kappa_{12}^2}{\kappa_{11}^2} B^2 \right)} \quad (\text{I-35})$$

Usando as expressões de κ_{11} e κ_{12} , no limite de campos magnéticos fracos, deduzidas na referência (5):

$$\kappa_{11} = \frac{n}{m^*} \langle \tau \rangle \quad , \quad \kappa_{12} = \frac{n}{m^*} \langle \tau^2 \rangle$$

temos

$$R_H = \frac{1}{en} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \quad (I-36)$$

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

$$\frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} = \frac{\Gamma(5/2) \Gamma(5/2)}{\{\Gamma(5/2 + p)\}^2} \quad (I-37)$$

Na tabela 2 encontramos os principais mecanismos de espalhamento para semicondutores que obedecem a estatística de Boltzmann.

TABELA 2:

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

De (I-31) tiramos que:

$$\mu_H = \frac{e}{m^*} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle} \quad (I-38)$$

Usando as eqs. (I-24) e (I-38) chegamos a uma relação entre a mobilidade de Hall e a mobilidade média dos elétrons, que é dado por:

$$\mu_H = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{2 \langle \tau \rangle} \mu_D = r_H \mu_D \quad (\text{I-39})$$

Analisando a eq. (I-35) para campos magnéticos fortes⁸, teremos que a eq. (I-36) fica:

$$R_H = \frac{1}{en}$$

Para chegarmos a este resultado usamos a equação (I-20) em (I-35) e consideramos o campo não suficiente para fazer aparecer os subníveis de Landau.

Para semicondutores degenerados:

$$r_H = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{2 \langle \tau \rangle} = \frac{\tau^2 (F)}{[\tau(F)]^2} = 1 \quad (\text{I-40})$$

então, $\mu_H = \mu_D$

$$e \quad R_H = \frac{1}{en}$$

I.4 - Concentração de Portadores em Função da Temperatura

A probabilidade de que um estado de energia E , esteja ocupado por um elétron a uma determinada temperatura T é dada pela função distribuição de Fermi-Dirac.

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - F'}{k_B T}\right)} \quad (\text{I-41})$$

onde F' é a energia de Fermi e k_B a constante de Boltzmann.

Quando estados são distribuídos em limites permitidos de energia, teremos a densidade de estados $g(E)$ por unidade de um intervalo de energia para qualquer energia, que na banda de condução será dada por :

$$g(E) = 4\pi (2m^*/h^2)^{3/2} (E - E_c)^{1/2}, \quad E \geq E_c \quad (\text{I-42})$$

onde m^* é a massa efetiva de densidade de estados para elétrons e E_c é a energia da banda de condução.

Conhecida a probabilidade de ocupação dos estados na banda de condução, isto é, $f(E)$, e a densidade de estados disponíveis nessa banda, $g(E)$, podemos calcular a densidade de elétrons, n , através da integral:

$$\begin{aligned} n &= \int_{E_c}^{\infty} f(E) g(E) dE \\ &= \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi (2m^*/h^2)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} dE}{1 + \exp\left(\frac{E - F'}{k_B T}\right)} \end{aligned} \quad (\text{I-43})$$

Para o estudo desta integral será conveniente a dotarmos uma notação adimensional, como o conjunto:

$$\varepsilon = \frac{E - E_C}{k_B T} \qquad F = \frac{F' - E_C}{k_B T}$$

Simplificaremos esta discussão, escolhendo E_C como a origem da energia. Portanto, a eq. (I-43) ficará:

$$n = 4\pi \left(\frac{2m^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{1 + \exp(\varepsilon - F)} \qquad (I-44)$$

$$= N_C F_{1/2}(F) \xrightarrow{\frac{E_C - F'}{k_B T} \gg 1} N_C e^{-(E - F')/k_B T}$$

$$\text{onde } N_C = 4\pi \left(\frac{2m^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \qquad (I-45)$$

é a chamada densidade equivalente de estados na banda de condução, e $F_{1/2}(F)$ denota a integral,

$$F_{1/2}(F) = \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{1 + \exp(\varepsilon - F)}$$

Esta expressão é um dos mais importantes membros do conjunto de funções,

$$F_j(F) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^j d\varepsilon}{1 + \exp(\varepsilon - F)}$$

que são chamadas de integrais de Fermi-Dirac e estão tabeladas. (ver, por exemplo, ⁹Fistul').

I.4.1 - SEMICONDUTORES DOMINADOS POR NÍVEIS DE IMPUREZA

Consideremos um semiconductor dopado, não degenerado, parcialmente compensado. Seja N_D a densidade de doadores e N_A a densidade de aceitadores, presentes no semiconductor. Seja, ainda, $N_D > N_A$ (material de tipo n).

A densidade de doadores ionizados (N_{Di}), é expressa por:

$$N_{Di} \approx n + N_A = N_D \left[1 + g^{-1} \exp \left(\frac{E_D + F' - E_C}{k_B T} \right) \right]^{-1} \quad (I-46)$$

onde g é o fator de degenerescência do spin do nível doador.

Assim, a razão entre a densidade de doadores ionizados e a densidade de doadores neutros, $N_{Dn} = N_D - N_{Di}$, é dada por:

$$\frac{N_{Di}}{N_{Dn}} = g \exp \left(\frac{-E_D - F' + E_C}{k_B T} \right) \quad (I-47)$$

ou, ainda poderemos escrever na forma:

$$\frac{(n + N_A)}{(N_D - N_A - n)} = g^{-1} \exp \left(\frac{-E_D - F' + E_C}{k_B T} \right) \quad (I-48)$$

Usando a eq. (I-47), teremos que (I-48) se torna:

$$\frac{n(n + N_A)}{(N_D - N_A - n)} = g^{-1} N_C \exp\left(\frac{-E_D}{k_B T}\right) \quad (\text{I-49})$$

Para baixas temperaturas podemos assumir ¹⁰,

$N_A \gg n$ e $(N_D - N_A) \gg n$, teremos:

$$\frac{n N_A}{(N_D - N_A)} = \frac{N_C}{g} \exp\left(\frac{-E_D}{k_B T}\right)$$

$$n = \frac{(N_D - N_A)}{N_A} \frac{N_C}{g} \exp\left(\frac{-E_D}{k_B T}\right)$$

que é uma relação do tipo:

$$n = A T^{3/2} \exp\left(\frac{-E_D}{k_B T}\right) \quad (\text{I-50})$$

angular ... duas curvas ... coeficiente ... e ...
 calcularia energia de ionização $\log(n T^{3/2})$ contra T nos permitiria
 idor. ... nização E_D do nível doã

CAPÍTULO II - MECANISMOS DE ESPALHAMENTO

II.1 - INTRODUÇÃO

Uma das principais razões para o grande interesse que há em se conhecer a mobilidade dos portadores em um cristal é que, através de um estudo da dependência entre a mobilidade e a temperatura, podemos obter valiosas informações a respeito dos mecanismos de espalhamento.

Se admitirmos a validade da Regra de Matthiessen, ou seja, que os mecanismos de espalhamento são mutuamente independentes, conseguiremos ajustar teoricamente a curva experimental da mobilidade em função da temperatura. Então, a mobilidade total poderá ser obtida na aproximação do tempo de relaxação, a partir da soma aritmética dos inversos das mobilidades devidas a cada mecanismo de espalhamento conhecido e passível de ser atribuído ao material a ser estudado

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

Este procedimento, baseado na aproximação do tempo de relaxação, tem sido usado com sucesso em quase todos os tipos de semicondutores, inclusive para mecanismos de espalhamentos inelásticos, caso do espalhamento por fonons ópticos, por exemplo. Nos materiais puros a mobilidade é calculada mais frequentemente a partir de mecanismos de espalhamentos, tais como, os por deformação acústica e óptica, por impurezas neutras e ionizadas e outros.

Quando o material estudado é uma liga, ou seja, uma solução sólida de dois ou mais materiais, um tipo suplementar de espalhamento deve ser levado em consideração.

Tal espalhamento ocorre por desordem do potencial da rede.

Estudaremos, separadamente, cada um dos mecanismos de espalhamento citados acima.

II.2 - TEORIA DE ESPALHAMENTO

No capítulo anterior, dissemos que há uma dependência entre a energia e o tempo de relaxação, ou seja, $\tau \propto E^p$, sendo p uma constante. Esta dependência entre τ e E será discutida neste capítulo para alguns importantes mecanismos de espalhamento. Para isto faremos a priori, um levantamento de certas particularidades da teoria de espalhamento que nos serão úteis no desenrolar do capítulo.

A secção de choque de um centro espalhador (σ_s), por exemplo, está relacionado com o tempo de relaxação (τ), através da expressão ¹⁰:

$$\frac{1}{\tau} = N \sigma_s v \quad (\text{II-2})$$

onde N é a densidade volumétrica do centro espalhador.

v é a velocidade da partícula espalhada.

A secção de choque é obtida através da secção de choque diferencial $\sigma_s(\theta)$, por integração sobre o ângulo sô-

lido; θ é o ângulo de desvio da partícula de sua direção original do movimento. Depois da colisão a mudança na componente da velocidade na direção anterior ao choque é:

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

Assim, a secção de choque responsável pela transferência de momento será:

$$\sigma_s = 2\pi \int_0^\pi \sigma_s(\theta) (1 - \cos \theta) \sin \theta \, d\theta \quad (\text{II-4})$$

com isto, a eq. (II-2) fica:

$$\frac{1}{\tau} = N v 2\pi \int_0^\pi \sigma_s(\theta) (1 - \cos \theta) \sin \theta \, d\theta \quad (\text{II-5})$$

O mecanismo de espalhamento pode ser considerado como uma pequena perturbação da função de onda dos elétrons por um potencial $P(\vec{r})$, que induz uma transição dos elétrons entre um estado inicial e final. Através da teoria de perturbação teremos a probabilidade de transição do estado \vec{K} para o estado \vec{K}' por unidade de tempo (regra de Ouro nº 2 de Fermi)¹¹:

$$S(\vec{K}, \vec{K}') = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{\vec{K}', \vec{K}}^+|^2 \delta(E(\vec{K}') - E(\vec{K})) \quad (\text{II-6})$$

onde $H_{\vec{K}', \vec{K}}^+$ é o elemento de matriz do potencial espalhador entre os estados \vec{K} e \vec{K}' e a função delta de Dirac satisfaz a conservação de energia. Sendo $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*}$ e usando as eqs. (II-2) e (II-6), teremos :

$$\sigma_s(\theta) = \left\{ \left(\frac{m^* V}{2\pi\hbar^2} \right) \left| H_{\vec{K}, \vec{K}}^+ \right| \right\}^2 \quad (\text{II-7})$$

onde V é o volume do cristal. Com isto, vemos que conhecendo $H_{\vec{K}, \vec{K}}^+$, podemos calcular a secção total de choque (II-4) e o tempo de relaxação para o mecanismo de espalhamento em questão.

II.3 - ESPALHAMENTO POR IMPUREZAS IONIZADAS

A teoria de espalhamento por impurezas ionizadas foi discutida por Conwell - Weisskopf¹², Brooks - Herring¹³ e Dingle¹⁴. O primeiro considerou o espalhamento de Rutherford de cada íon independentemente e os outros dois utilizaram o potencial coulombiano blindado, ou seja, o potencial de Yukawa, para realizar o estudo deste tipo de espalhamento.

Utilizando a eq. (I-18) e substituindo $\vec{v} = \frac{\hbar\vec{K}}{m^*}$, teremos que:

$$\vec{J} = \frac{e\hbar}{4\pi^3 m^*} \int \vec{K} f_1 d^3K \quad (\text{II-8})$$

Tomando o valor de f_1 da eq. (I-17), para $\vec{B}=0$, e substituindo em (II-8),

$$\vec{J} = \frac{e^2 \hbar^2 \xi}{4\pi^3 m^{*2}} \int \tau K^2 \cos \theta \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) d^3K \quad (\text{II-9})$$

Sabemos que

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = \frac{m^*}{\hbar^2 K} \frac{\partial f_0}{\partial K} \quad (\text{II-10})$$

Portanto, (II-9) fica:

$$\vec{J} = \frac{e^2 \hbar^{-1}}{4\pi^3 m^*} \int \tau K \cos \theta \frac{\partial f_0}{\partial K} d^3 K \quad (\text{II-11})$$

Como $d^3 K = K^2 \sin \theta d\theta d\varphi dK$, a eq. (II-10) torna-se:

$$\vec{J} = \frac{e^2 \hbar^{-1}}{3\pi^2 m^*} \int_0^\infty K^3 \tau(K) \frac{\partial f_0}{\partial K} dK \quad (\text{II-12})$$

Usando a relação (I-22) teremos que a condutividade elétrica, é dada por:

$$\sigma = \frac{e^2}{3\pi^2 m^*} \int_0^\infty K^3 \tau(K) \frac{\partial f_0}{\partial K} dK \quad (\text{II-13})$$

Substituindo a eq. (II-10) em (II-13) e sabendo que $K = \frac{(2m^*E)^{1/2}}{\hbar}$ e fazendo $\epsilon = \frac{E}{k_B T}$, teremos:

$$\sigma = \frac{16 \sqrt{2} \pi e^2 m^{*1/2} (k_B T)^{3/2}}{3h^3} \int_0^\infty \epsilon^{3/2} \tau \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} d\epsilon \quad (\text{II-14})$$

sendo $\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = \frac{\exp(\epsilon - F)}{\{\exp(\epsilon - F) + 1\}^2}$, teremos:

$$\sigma = \frac{16 \sqrt{2} \pi e^2 m^{*1/2} (k_B T)^{3/2}}{3h^3} \int_0^\infty \frac{\tau \epsilon^{3/2} \exp(\epsilon - F)}{\{\exp(\epsilon - F) + 1\}^2} d\epsilon \quad (\text{II-15})$$

Para determinarmos σ , precisamos da relação entre τ e ϵ . Para isto, usamos a aproximação de Born para calcular o elemento de matriz de uma transição, induzida pelo potencial coulombiano blindado, conhecido como potencial de Yukawa, dado por:

$$\phi = \frac{e}{K_s r} e^{-r/L} \quad (\text{II-16})$$

onde K_s é a constante dielétrica estática.

Substituindo este elemento de matriz em (II-7) obtemos:¹⁵

$$\sigma_s(\theta) = \left\{ \frac{e^2/K_s}{m^*v^2(1 - \cos\theta) + v^2} \right\}^2, \quad v^2 = \frac{h^2}{8\pi^2 m^*L^2} \quad (\text{II-17})$$

que substituído em (II-5) nos dará a expressão do tempo de relaxação para este tipo de espalhamento, que é:

$$\frac{1}{\tau_{II}} = N_i v 2\pi \left\{ \frac{e^2}{K_s 2 \epsilon k_B T} \right\}^2 g(b) \quad (\text{II-18})$$

onde N_i é a concentração de impurezas ionizadas e

$$g(b) = \ln(1 + b) - \frac{b}{b + 1} \quad (\text{II-19})$$

$$\text{sendo } b = \frac{32 \pi^2 m^* E L^2}{h^2} = \frac{32 \pi^2 m^* k_B T \epsilon L^2}{h^2}$$

Para calcularmos o campo próximo de um centro de impurezas ionizadas e determinarmos o comprimento da blindagem L da eq. (II-16) será necessário solucionar a e

equação de Poisson,

$$\nabla^2(\phi) = -\frac{4\pi e}{K_s}(n_0 - n) \quad (\text{II-20})$$

onde n_0 é a concentração de elétrons na rede não perturbada e n a concentração de elétrons na rede perturbada.

Se $G(F) = n_0$ e $G(F + \phi) = n$, expandindo-se até a primeira ordem em ϕ , tem-se $G(F+\phi) = G(F) + \phi G'(F)$. Vimos no Cap. I que:

$$G(F) = \frac{4\pi (2m^* k_B T)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{\exp(\varepsilon - F) + 1} = \frac{4\pi (2m^* k_B T)^{3/2}}{h^3} F_{1/2}$$

$$G'(F) = \frac{4\pi (2m^* k_B T)^{3/2}}{h^3} F_{1/2}' \frac{e}{k_B T}$$

então, de (II-16) e (II-20) vem:

$$\nabla^2(\phi) = \frac{4\pi e}{K_s} \phi G'(F) = \frac{\phi}{L^2}$$

A solução de Poisson será igual à eq. (II-16)

com

$$\frac{1}{L^2} = \frac{16\pi^2 e^2 (2m^*)^{3/2} (k_B T)^{1/2}}{K_s h^3} F_{1/2}' \quad (\text{II-21})$$

Sabemos que a relação geral para as integrais de Fermi, é dado por:

$$F_j'(F) = F_{j-1}(F)$$

Teremos então, que (II-21) será:

$$\frac{1}{L^2} = \frac{16 \pi^2 e^2 (2m^*)^{3/2} (k_B T)^{1/2}}{K_s h^3} F^{-1/2} \quad (\text{II-22})$$

Para o cálculo da mobilidade usaremos a relação (I-24)

$$\mu = \frac{\sigma}{n \cdot e}$$

Substituindo (II-15) e (I-44) em (I-24), este ficará da seguinte forma:

$$\mu_{II} = \frac{2 e}{3 m^* F^{1/2}} \frac{1}{F^{1/2}} \int_0^\infty \frac{\mu_{II} \epsilon^{3/2} \exp(\epsilon - F) d\epsilon}{\{\exp(\epsilon - F) + 1\}^2} \quad (\text{II-23})$$

que é a expressão geral para a mobilidade por espalhamento de impurezas ionizadas.

A validade das aproximações discutidas acima estão ligadas à aproximação de Born utilizada. Nesta aproximação¹⁶ admite-se que o fator b da eq.(II-19) é

$$b \gg 1 \quad (\text{II-24})$$

Fazendo um estudo da eq.(II-19), levando em conta esta condição citada acima, vemos que $g(b)$ tem uma variação lenta, o que nos possibilita considerar que esta função é uma constante, tirando-a assim da integral da eq.(II-23). Usando a eq.(II-18) a mobilidade em (II-23) fica

$$\mu_{II} = \frac{4 (m^*)^{-1/2} K_S^2 (k_B T)^{3/2}}{3 \sqrt{2} \pi e^3 N_{\pm}^{1/2} g(\bar{\epsilon})} \int_a^{\infty} \frac{\epsilon^3 \exp(\epsilon - F) d\epsilon}{[\exp(\epsilon - F) + 1]^2}$$

$$\text{onde } \bar{\epsilon} = \frac{32 \pi^2 m^* k_B T L^2}{h^2} \bar{\epsilon}$$

sendo $\bar{\epsilon}$ o valor da energia ϵ que torna o integrando de (II-23) máximo.

II.4 - ESPALHAMENTO POR FONONS ACÚSTICOS

Quando uma onda acústica se propaga em uma rede cristalina, os átomos vibram em torno de suas posições de equilíbrio. Representaremos estas vibrações por ondas longitudinais e transversais. Uma vibração longitudinal através de um cristal dá origem a regiões alternadas de compressão e expansão da rede cristalina. Isto altera as bandas de energia de tal maneira que a largura da banda proibida sofre uma modulação que pode ser aproximada por degraus como na FIG. II-1.

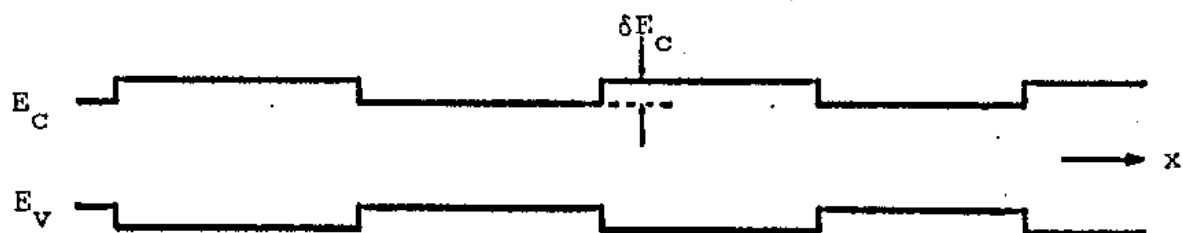


Fig.II-1: Esquema da variação das energias das bandas de condução e valência em um semicondutor, produzida por forças de compressão e expansão associadas a uma vibração longitudinal.

A quantidade δE_C pode-se relacionar com a deformação de compressão ou expansão $\delta V/V_0$, a uma primeira aproximação, mediante uma relação linear da forma¹⁷:

$$- \delta E_C = E_{1c} \left(\frac{\delta V}{V_0} \right) \quad (\text{II-25})$$

onde E_{1c} é um fator de proporcionalidade, conhecido como

"constante do potencial de deformação", que representa o campo na borda da banda de condução por unidade de deformação ou de dilatação, como foi mostrado no teorema do potencial de deformação de Bardeen.¹⁸

O elemento de matriz que descreve este tipo de espalhamento, é dado por:

$$|H_{K',K}^{\rightarrow,\rightarrow}|^2 = \frac{E_{1c}^2 k_B T}{2V \rho u_z^2} \quad (\text{II-26})$$

onde ρ é a densidade de massa do material,

u_z é a velocidade do som

E_{1c} é o potencial de deformação

V é o volume do cristal

Substituindo (II-26) em (II-7) e este último em (II-5) teremos o tempo de relaxação, que nos fornecerá:

$$\frac{1}{\tau_{PA}} = \frac{\sqrt{2} (m^*)^{3/2} E_{1c}^2 (k_B T)^{3/2}}{\pi \hbar^4 \rho u_z^2} \epsilon^{1/2} \quad (\text{II-27})$$

Substituindo a eq. (II-27), na expressão da mobilidade e usando (I-26), teremos que:

$$\mu = \frac{2e}{3m^*} \int_0^\infty \tau_{PA} \epsilon^{3/2} \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} d\epsilon \quad (\text{II-28})$$

Assim, a mobilidade limitada pelo espalhamento de fonons acústicos será¹⁹:

$$\mu_{PA} = \frac{2 (2\pi)^{1/2} e \hbar^4 \rho u_z^2}{3 (m^*)^{5/2} E_{1c}^2 (k_B T)^{3/2}} \quad (\text{II-29})$$

II.5 - ESPALHAMENTO POR FONONS ÓPTICOS POLARES

Até agora, lidamos com processos de espalhamento elástico, cuja transferência de energia do elétron para o íon fixo na rede, durante uma colisão, é certamente pequena devido à grande diferença entre suas massas.

No caso de espalhamento por fonons ópticos, onde há colisões entre partículas, elétrons e fonons, as transferências de energia são grandes havendo, assim, a possibilidade de alteração no número de fonons, portanto estes processos tem de ser tratados como processos inelásticos.

O espalhamento óptico polar é conhecido como a interação, em semicondutores polares, entre os portadores de corrente e o modo óptico de vibrações da rede, ou seja, os fonons ópticos polares.

O elemento de matriz que descreve esta interação, conforme foi estudado por Frölich e Mott²⁰ e revisto por Ehrenreich²¹, é composto por dois termos, a saber:

$$H_{\vec{k}, \vec{k}+\vec{q}}^{\uparrow} = \frac{e e^*}{V K_0} \left(\frac{\hbar}{2MN\omega} \right)^{1/2} \vec{\sigma}_q \cdot \vec{q} (n_q + 1)^{1/2} \quad (\text{II-30})$$

que expressa o elemento de matriz de transição quando o resultado da interação é a criação de um fonon. Quando ocorre a destruição de um fonon, temos:

$$H_{\vec{k}, \vec{k}-\vec{q}}^{\uparrow} = \frac{e e^*}{V K_0} \left(\frac{\hbar}{2MN\omega} \right)^{1/2} \vec{\sigma}_q \cdot \vec{q} (n_q)^{1/2} \quad (\text{II-31})$$

onde N e V são, respectivamente, o número e o volume de cada célula unitária do cristal

$n_{\vec{q}}$ é a população de fonons no estado cujo momento é $\hbar\vec{q}$ que corresponde a uma energia $\hbar\omega$ e cujo vetor unitário de polarização é $\vec{\sigma}_{\vec{q}}$

M é a massa reduzida dos íons de cada célula unitária

ω é a frequência do modo óptico longitudinal

\vec{q} é o vetor de onda do fonon

e^* é a carga efetiva dos íons e é dada por:²²

$$e^* = \left\{ M V K_0 \omega^2 \left(\frac{K_s - K_d}{K_s K_d} \right) \right\}^{1/2}$$

sendo K_s e K_d , respectivamente, as constantes dielétricas estática e de alta frequência.

Para processos inelásticos não é possível fazermos a aproximação de $f(\vec{K} \pm \vec{q})$ para $f(\vec{K})$ e com isto, usar a eq. (I-8) para definirmos o tempo de relaxação¹⁰. Esta dificuldade pode ser contornada se usarmos o método variacional de Howarth e Sondheimer²³, que produz para a mobilidade limitada por fonons ópticos polares a expressão:

$$\mu_{PO} = \frac{16 \hbar K_0 (2 \pi k_B T)^{1/2}}{(3 e m^*/m_0 \omega)^{3/2}} \cdot \frac{K_s K_d}{K_s - K_d} \left\{ \exp\left(\frac{\theta}{T}\right) - 1 \right\} G\left(\frac{\theta}{T}\right) \quad (\text{II-32})$$

onde θ é a temperatura do fonon óptico, conhecida como "temperatura de Debye para fonons ópticos" e

$$\frac{\theta}{T} = \frac{\hbar \omega}{k_B T} \quad e$$

$G\left(\frac{\theta}{T}\right)$ é uma função que leva em conta o efeito de blindagem dos portadores.

As expressões para $G\left(\frac{\theta}{T}\right)$ para temperaturas baixas e altas são ^(23, 24, 25) :

$$G\left(\frac{\theta}{T}\right) = 1 \quad \text{quando} \quad \frac{\theta}{T} \ll 1$$

$$G\left(\frac{\theta}{T}\right) = \frac{3}{8} \left(\pi \frac{\theta}{T}\right)^{1/2} \quad \text{quando} \quad \frac{\theta}{T} \gg 1$$

II.6 - ESPALHAMENTO POR DESORDEM NO POTENCIAL DA REDE

Nas ligas cristalinas, embora a rede essencialmente não se altere, não se conhece com precisão a vizinhança de um átomo, isto é, dado um átomo fixo em um determinado ponto da rede, não se pode saber que tipo de átomos, entre os possíveis formam a sua vizinhança. Pode-se falar, apenas, na probabilidade de se encontrar um átomo de certo tipo em um dado ponto da rede. Por isso, associando a cada tipo de átomo um potencial, existe na rede uma certa desordem de potencial em cada ponto do cristal.

Existem basicamente dois problemas em estabelecer um modelo teórico para o espalhamento por desordem do potencial na rede. O primeiro se refere à questão de se encontrar uma maneira de se medir a quantidade de desordem presente, isto é, o grau de aleatoriedade na distribuição dos diferentes tipos de átomos pelos pontos da rede. O segundo problema é selecionar dentre os teoricamente possíveis, o potencial de espalhamento ou interação resultante da desordem compatível com os resultados experimentais disponíveis.

Para solucionar o primeiro problema Flinn²⁶ demonstrou que não é obrigatório a completa aleatoriedade na distribuição dos átomos numa liga, pois certas características dos materiais constituintes do composto podem originar um arranjo energético favorável ao estabelecimento de uma ordem local.

A introdução de um artifício, a aproximação do cristal virtual, resolve satisfatoriamente o segundo problema introduzindo como ônus um novo tipo de espalhamento, falaremos disto a seguir.

II.6.1 - O POTENCIAL VIRTUAL

Imaginemos uma rede ocupada por dois átomos, A e B, cujas distribuições pelos pontos da rede sejam aleatórias. Associemos os potenciais U_A e U_B aos átomos dos tipos A e B, respectivamente. Então, o potencial total do cristal será²⁷

$$U(\vec{r}) = \sum_A U_A(\vec{r} - \vec{y}) + \sum_B U_B(\vec{r} - \vec{y}) \quad (\text{II-33})$$

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

O potencial $U(\vec{r})$ pode ser colocado sob uma forma mais prática, separando-o em duas partes, uma periódica, que é dada por:

$$U_1(\vec{r}) = \sum_Y \{C_A U_A(\vec{r} - \vec{y}) + C_B U_B(\vec{r} - \vec{y})\} \quad (\text{II-34})$$

(C_i é a concentração relativa do átomo i , com $i = A, B$) que é o potencial do cristal virtual de Mott²⁸. A outra é a parte desordenada, que dê conta da diferença entre o potencial real e o potencial virtual:

$$U_2(\vec{r}) = U(\vec{r}) - U_1(\vec{r}) = \sum_Y C_Y \Delta U(\vec{r} - \vec{y}) \quad (\text{II-35})$$

onde $\Delta U(\vec{r}) = U_A(\vec{r}) - U_B(\vec{r})$.

A função C_Y foi introduzida por Flinn²⁶ em sua discussão sobre ordem local em compostos desordenados e, é de-

finida nos pontos da rede por;

$$C_{\vec{y}} = \begin{cases} C_B & \text{para um átomo do tipo A em } \vec{y}. \\ -C_A & \text{para um átomo do tipo B em } \vec{y}. \end{cases}$$

tendo as seguintes propriedades:

$$\sum_{\vec{y}} C_{\vec{y}} = 0$$

$$\sum_{\vec{y}} C_{\vec{y}'} C_{\vec{y}'+\vec{y}} = N C_A C_B$$

O potencial U_1 é o potencial periódico e define o potencial de Bloch para o cristal. O potencial U_2 é o responsável pelo espalhamento.

II.6.2 - MOBILIDADE LIMITADA POR DESORDEM NO POTENCIAL DA REDE

Um elétron trafegando de uma região normal para uma região de substituição encontra uma diferença de potencial, sofrendo portanto uma transição. Mott²⁸ demonstrou que o espalhamento resultante é similar ao de um feixe de elétrons espalhados por um potencial da forma

$$\Delta U = \begin{cases} E_0 - E_0' & \text{para } r < r_0 \\ 0 & \text{para } r > r_0 \end{cases}$$

sendo que r_0 , o alcance do potencial, será definido posteriormente.

Usando-se a aproximação de Born para calcular o elemento de matriz de uma transição entre o estado \vec{K} e o estado \vec{K}' , induzida por um potencial de intensidade E e extensão r_0 , obtém-se:

$$H_{\vec{K}\vec{K}'}^{\rightarrow\rightarrow} = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i \Delta\vec{K} \cdot \vec{r}) \Delta U d^3r$$

$$\text{com } \Delta\vec{K} = \vec{K} - \vec{K}' \quad \text{e}$$

$$d^3r = r^2 dr \sin \theta d\theta d\psi$$

Devido à simetria azimutal, a integração sobre ψ resulta em um fator 2π . Tomando θ como o ângulo entre $\Delta\vec{K}$ e \vec{K}' , tem-se:

$$H_{\vec{K}\vec{K}'}^{\rightarrow\rightarrow} = 4\pi \frac{\Delta E}{(\Delta K)^3} \{ \sin(\Delta K r_0) - \Delta K r_0 \cos(\Delta K r_0) \}$$

Expandindo $\sin x$ e $\cos x$ em série, teremos

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

Desprezamos, sem problemas, o segundo termo entre parênteses por ser pequeno em comparação a $1/3$. Adotaremos que o valor de r_0 é a distância entre os primeiros vizinhos numa configuração tetraédrica, ou seja, $r_0 = \frac{\sqrt{3}}{4} a$, onde a é o parâmetro de rede. Com isto, o quadrado do elemento de matriz fica

$$|H_{\vec{K}\vec{K}'}^{\rightarrow\rightarrow}|^2 = \frac{3\pi^2 C_A (1 - C_A) (\Delta E)^2}{16 N}$$

Substituindo este valor em (II-7) encontramos $\sigma_s(\theta)$ que utilizado em (II-5) nos dará o tempo de relaxação para este tipo de espalhamento:

$$\tau_A = \frac{8 \hbar^4 N \epsilon^{-1/2}}{3 \sqrt{2} \pi C_A (1 - C_A) (\Delta E)^2 m^{*3/2} (k_B T)^{1/2}}$$

onde N é o número de centros espalhadores por unidade de volume e $C_A (1 - C_A) (\Delta E)^2 = (\Delta U)^2$

Na estrutura de III-V, $N = 4/\Omega$, por célula unitária. Portanto,

$$\tau_A = \frac{32 \hbar^4 \epsilon^{-1/2}}{3 \sqrt{2} \pi (\Delta U)^2 m^{*3/2} (k_B T)^{1/2} \Omega}$$

onde $\Omega = a^3/4$ é o volume da célula unitária.

Utilizando a estatística de Fermi-Dirac, como foi feito na secção (II-3), tiramos o valor médio do tempo de relaxação. Portanto, a expressão da mobilidade é dada por:

$$\mu_A = \frac{2}{3} \frac{e}{m^*} \frac{1}{F_{1/2}} \int_0^\infty \frac{\tau_A \epsilon^{3/2} \exp(\epsilon - F) d\epsilon}{\{\exp(\epsilon - F) + 1\}^2} \quad (\text{II-36})$$

II.6.3 - POTENCIAL DE DESORDEM PARA LIGAS QUATERNÁRIAS

Para uma liga quaternária III-V, o potencial do cristal virtual para as subredes do grupo III e V são, respectivamente²⁹ :

$$U_{\text{III}} = (1 - x) U_A + x U_B$$

$$U_V = (1 - y) U_C + y U_D$$

para uma liga $A_{1-x}B_xC_{1-y}D_y$.

Se os átomos A e B estão distribuídos pelos pontos da rede cúbica de faces centradas destinada aos elementos do grupo III, e os átomos C e D estão distribuídos pela outra subrede, a taxa de espalhamento devida às flutuações de potencial nas duas subredes é proporcional ao elemento de matriz e às probabilidades $(1 - x)$, x , $(1 - y)$ e y de ocorrência dos elementos A, B, C e D, respectivamente no cristal. O elemento de matriz que representa a transição de um estado para outro é dado por:

$$|M_i|^2 = \left| \int \psi^* \Delta U_i \psi \, d\bar{r} \right|^2 \quad \text{onde}$$

$$\Delta U_i = U_{\text{III}} - U_i \quad \text{para } i = A \text{ ou } B$$

$$\Delta U_i = U_V - U_i \quad \text{para } i = C \text{ ou } D$$

Logo, a taxa de espalhamento total ou tempo de relaxação, é dada por:

$$\frac{1}{\tau} \sim x(1 - x) |M_{\text{III}}|^2 + y(1 - y) |M_V|^2$$

$$\text{com } |M_{III}|^2 = \left| \int \psi^* (U_A - U_B) \psi \, d\vec{r} \right|^2$$

$$|M_V|^2 = \left| \int \psi^* (U_C - U_D) \psi \, d\vec{r} \right|^2$$

Se $U_A - U_B$ é vista como a variação do potencial na subrede do grupo III com o átomo do grupo V fixo, então:

$$U_A - U_B = (1 - y) (U_{BC} - U_{AC}) + y(U_{BD} - U_{AD})$$

$$U_C - U_D = (1 - x) (U_{BD} - U_{BC}) + x(U_{AD} - U_{AC})$$

onde U_{AC} é o potencial referente ao composto AC, e assim por diante. Deste modo, calculando segundo o modelo que mostramos chega-se a:

$$|\Delta U|^2 = x(1-x)y^2 |\Delta U_{ABD}|^2 + x(1-x)(1-y)^2 |\Delta U_{ABC}|^2 +$$

$$y(1-y)x^2 |\Delta U_{BCD}|^2 + y(1-y)(1-x)^2 |\Delta U_{ACD}|^2$$

(II-37)

com ΔU_{ABC} sendo o potencial do composto $A_{1-x}B_xC$.

Deste modo tendo os valores de ΔU para os ternários pode-se obter os valores para os quaternários.

II.6.4 - INTENSIDADE DO POTENCIAL ΔU

Uma decisão precisa ser tomada sobre a altura do potencial de espalhamento, para que se possa ter uma estimativa razoavelmente precisa da importância relativa do espalhamento por desordem na rede, como fator limitante da mobilidade dos portadores nas ligas desordenadas. Este é o ponto confuso da teoria, as hipóteses levantadas até hoje não são suficientemente justificáveis e, nem estão confiavelmente confirmadas experimentalmente.

Brooks¹³ sugere que ΔU seja a diferença entre as larguras das bandas proibidas dos compostos puros. Este ponto de vista pode explicar alguns resultados experimentais⁴⁶.

Harrison e Hauser⁴⁷ adotam para ΔU a diferença entre as eletroafinidades dos compostos puros; esta parece ser a interpretação correta do potencial de Mott e, por razões de consistência interna do modelo, deveria ser a altura do potencial adotada.

A tendência mais recente é deslocar os estudos em direção às eletronegatividades, conforme a reformulação deste conceito feita por Phillips⁴⁸.

Sem decisão teórica, o procedimento habitual é obter o valor de ΔU através de análise dos dados da mobilidade. Esta análise é complexa, e trata com parâmetros não completamente conhecidos e, que por vezes, tem papel sensível

nos cálculos. Assim, a confirmação de uma hipótese teórica qualquer, através de resultados experimentais é difícil.

Entretanto, utilizando a equação (II-37), podemos calcular ΔU segundo cada uma das teorias. Denominando ΔU_{EG} , ΔU_{EA} e ΔU_{EN} do potencial de espalhamento como sendo, respectivamente, a diferença entre a largura da banda proibida, a diferença entre a eletroafinidade e a diferença entre eletronegatividade, e usando os valores $x = 0,29$ e $y = 0,63$ temos

$$\Delta U_{EG} = 0,52 \text{ eV}$$

$$\Delta U_{EA} = 0,39 \text{ eV}$$

$$\Delta U_{EN} = 0,37 \text{ eV}$$

Como se pode observar, diferença entre eletroafinidade e eletronegatividade dão valores aproximadamente iguais para ΔU . Diferença entre a largura da banda proibida dá um valor diferente e substancialmente maior. Resultados experimentais certamente não podem distinguir, neste caso, entre teorias que relacionam ΔU com a eletroafinidade ou eletronegatividade.

CAPÍTULO III - EXPERIMENTO

III.1 - Criostato e Sistema de Vácuo

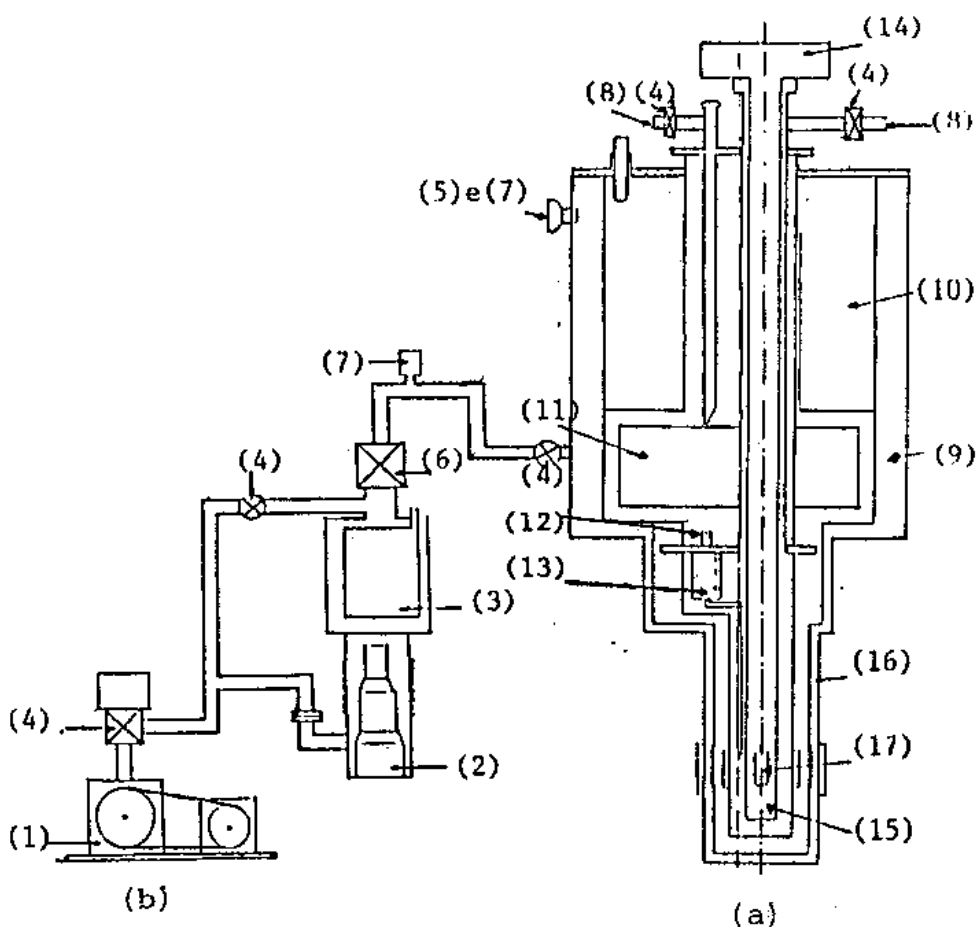
Usamos para a experiência um criostato de aço inoxidável da "AIR LIQUIDE", que pode operar no intervalo 1,5K - 300K (Fig. III-1-a). Este consta de quatro câmaras, uma de nitrogênio líquido (LN_2), uma de hélio líquido (LHe), uma para a amostra e as de isolamento. As câmaras de isolamento estão conectadas constantemente a um sistema de vácuo através de tubos flexíveis. A câmara de LN_2 pré-esfria a câmara de LHe e a câmara para a amostra, através de trocadores de calor de alumínio. A câmara de amostra é ligada à câmara de LHe através de um tubo capilar de aço inoxidável.

O gás que se quer colocar para esfriar a amostra passa por uma resistência de aquecimento de aproximadamente 45 Ω , neste local, encontra-se, também, um diodo GaAs que usamos como sensor de temperatura. A resistência de aquecimento tem a função de controlar a temperatura do fluxo de gás.

O sistema de vácuo usado para a isolamento das câmaras aparece na Fig. III-1-b. É constituído basicamente de uma bomba mecânica primária que atinge pressão de 10^{-3} torr e uma bomba de difusão de óleo, constantemente refrigerada por uma corrente de água à temperatura ambiente, que atinge pressão de 10^{-6} torr; acima da bomba difusora fica a armadilha de LN_2 que separa o sistema de vácuo do sistema a ser bombeado.

Tanto a câmara de amostra como a câmara de hélio estão ligadas ao sistema de recuperação de hélio.

Na saída da câmara de hélio para o circuito de



- | | |
|------------------------------|--------------------------------|
| (1) Bomba Primária | (10) Câmara de LN ₂ |
| (2) Bomba de Difusão | (11) Câmara de LHe |
| (3) Armadilha Fria | (12) Giclê |
| (4) Válvula Manual | (13) Aquecedor de gás |
| (5) Medidor de Vácuo (Veeco) | (14) Suporte de Amostras |
| (6) Válvula Borboleta | (15) Câmara de Amostras |
| (7) Medidor de Alto-Vácuo | (16) Blindagem |
| (8) Saída para Recuperação | (17) Amostra |
| (9) Vácuo de Isolamento | |

FIG. III - 1 - (a) Criostato (b) Sistema de Vácuo

recuperação (Fig.III-2) existe um manômetro, cuja pressão máxima durante as medidas foi de 10 Kg/cm^2 . Esta pressão é usada para controlar o fluxo de saída de hélio gasoso, controlando assim a pressão exercida sobre o reservatório de LHe. Com isto estabelecemos um fluxo de LHe para a câmara de amostra.

A bomba de vácuo, selada para He, foi instalada prevendo-se a hipótese de se querer diminuir ainda mais a pressão sobre o LHe, fazendo com que a temperatura desça para menos do que $4,2 \text{ K}$. Em nossas medidas isto não foi feito.

Os medidores de pressão usados foram da Veeco para pressão de 10^{-3} torr e da Leybold-Heraeus para pressão de 10^{-6} torr.

III.2 - Suporte de Amostras

Na fig.(III-3) temos o esquema do suporte de amostras utilizado.

Em A' temos uma visão mais detalhada de A, onde encontra-se a amostra e um sensor de temperatura do tipo C.L.T.S (Cryogenic Linear Temperature Sensor).

A parte A do suporte de amostras está ligada a fios de cobre envernizados que passam pelo tubo de inóx B e estão soldados nos conectores tipo BNC's (C), onde são conectados os cabos coaxiais dos aparelhos de medição.

O sensor de temperatura C.L.T.S. é formado por uma grade de níquel e alumínio montada sobre um suporte i-

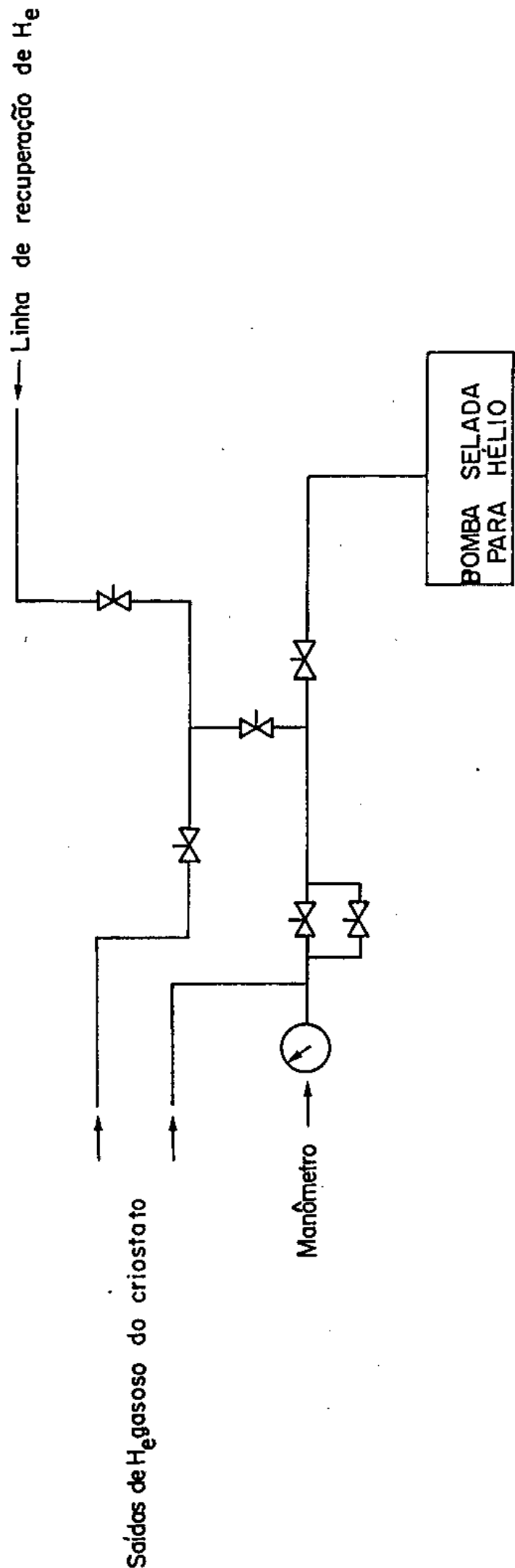


FIG. III.2 - ESQUEMA DO SISTEMA DE CONTROLE DE FLUXO DE H_e.

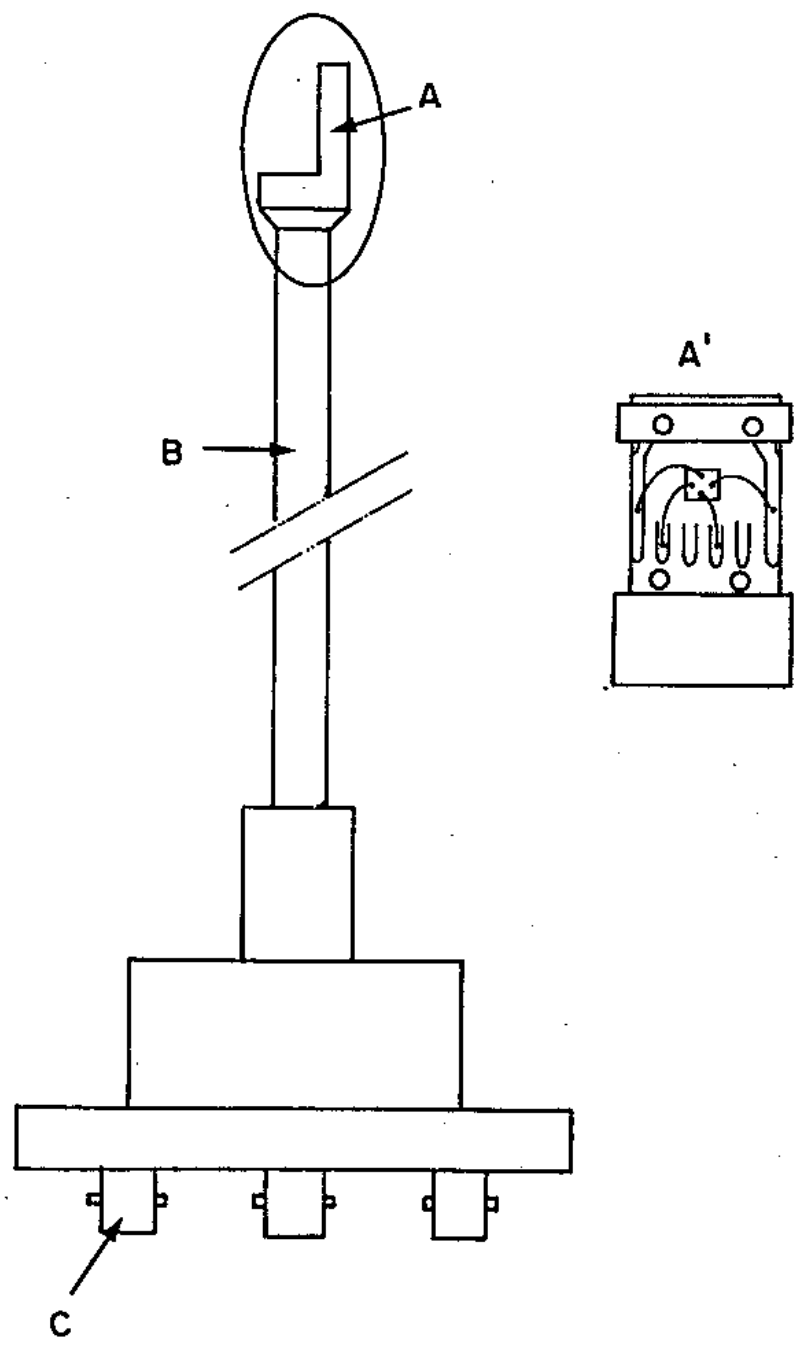


Fig. III - 3 - Suporte de Amostras

solante de dimensões $11 \times 8 \times 0,1$ mm. Seu parâmetro termométrico é uma resistência elétrica que varia quase linearmente com a temperatura de 220Ω (4,2K) a 290Ω (297K). Isto dá uma sensibilidade em torno de $0,239 \Omega/K$.

Para melhorar a medida de temperatura, calibramos o sensor C.L.T.S. em três pontos: 4,2, 77 e 300K. Com isto, utilizamos duas retas, uma entre 4,2 K e 77 K e outra entre 77 K e 300 K. Assim, a leitura da temperatura está dentro de 1% de precisão.

III.2.1 - As Amostras e Seus Contatos

Sobre substratos de fosfeto de índio semi-isolante, foram crescidas, por epitaxia de fase líquida, as camadas de liga quaternária $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$ que estudamos. Estas são de formato retangular, a espessura de suas camadas variam de $0,5 \mu m$ a $2,0 \mu m$, tendo um comprimento próximo de 1cm e largura próximo de $0,5$ cm. Seus contatos são pequenos pedaços de índio recozidos a $400^\circ C$ sobre sua superfície obtendo-se, assim, contatos ôhmicos de pequena área e de forma semi-esférica. Os contatos estão localizados nas bordas da amostra. Há uma configuração ortogonal para as linhas que unem contatos de lados opostos, pois isto facilita as medições, e não influencia os resultados.

A influência dos contatos sobre o processo de condução na amostra é pequeno, pois eles ocupam apenas cerca de 1% da superfície da amostra. A ligação entre a amostra e os aparelhos de medição é feita através de fios de ouro de 0,5 mm de espessura soldados nos contatos e no suporte da amostra.

III.3 - Conjunto de Equipamentos de Medida Utilizados

Para as medidas de resistividade e efeito Hall em função da temperatura, usamos a montagem apresentada na Fig. III-4. Construímos, para a realização de medidas elétricas, uma unidade de comutação para o uso do método de Van der Pauw. Consiste de uma placa de alumínio, com conectores tipo BNC e tipo borne (fêmea), dotada de duas chaves seletoras. As ligações internas foram feitas, de modo que, apenas mudando a posição das chaves seletoras, intercambiávamos os contatos de aplicação de corrente e leitura de tensão. A chave seletora que tem a função de aplicar corrente possui 8 posições e a de leitura de tensão possui 11 posições.

A corrente é fornecida por uma fonte de corrente (Keithley, modelo 225), que varia seus valores de corrente entre $1 \cdot 10^{-9}$ A e 10^{-1} A com precisão de $\pm 0,1\%$ e com alta estabilidade. As leituras das tensões são efetuadas por um nanovoltímetro digital (Keithley, modelo 180) com precisão de 0,1% na região de trabalho. A variação e estabilização da temperatura, durante as medidas, é programada externamente com um controlador de temperatura (Air Liquide, modelo RD 4300) ligado ao diodo GaAs e à resistência de aquecimento do criostato.

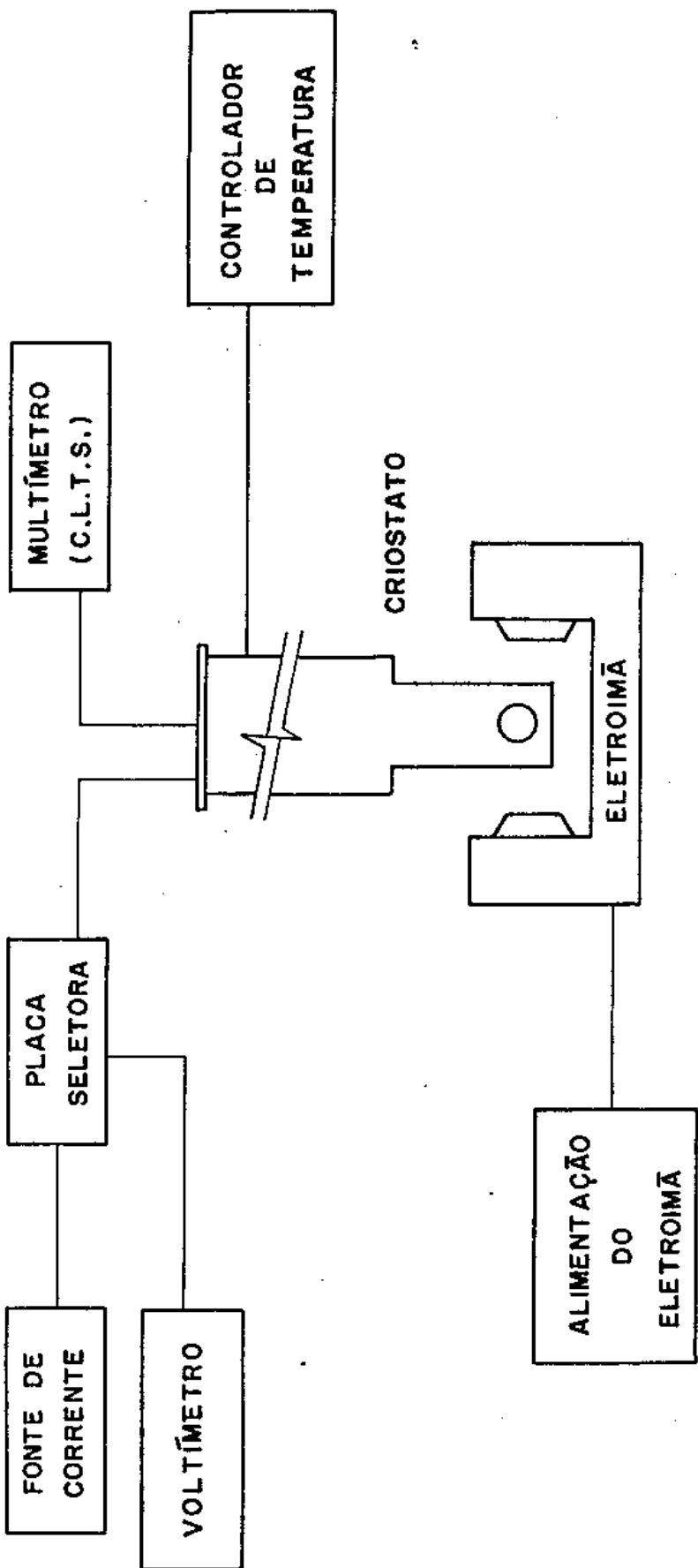


FIG. III-4.: ESQUEMA DO CONJUNTO DE EQUIPAMENTOS DE MEDIDAS

A temperatura onde se encontra a amostra, que é detectada pelo C.L.T.S., é medida através de um multímetro de 5 dígitos e meio (Keithley, modelo 191). O campo magnético é fornecido por um eletroímã (Varian, modelo V 7700), que possibilita um campo de até 10 KG. Adotamos um sistema extra de calibração utilizando uma sonda de efeito Hall com a qual temos uma precisão de 1,0% da medida do campo magnético.

III.4 - Procedimento Experimental

Fixamos a amostra no suporte e o introduzimos na câmara de amostra. Fazemos, vácuo primário (10^{-3} torr) nesta câmara, com a bomba de vácuo selada para He. Em seguida, insere-se gás He na câmara da amostra para ajudar a resfriar esta parte do criostato.

A câmara de isolamento é evacuada até a pressão de 10^{-6} torr. O nitrogênio líquido é colocado na sua câmara e o sistema fica esfriando durante aproximadamente 24 horas. Depois de frio, transferimos ao sistema aproximadamente 10 litros de hélio líquido. O gás evaporado da transferência exerce uma sobrepressão no líquido que acarreta, depois de resfriado a câmara de amostra, seu escoamento através do capilar para o local onde se encontra a amostra. Quando o hélio líquido atinge esta região começamos a realizar as medidas elétricas, sobre as quais falaremos agora.

Para a medida da resistividade no método de Van der Pauw³⁰, faz-se fluir corrente entre os contatos A e B e mede-se a tensão resultante entre os outros dois contatos (CD)

(Figura III-5).

Para que haja uma diminuição nos erros das medidas causadas por pequenas inomogeneidades da amostra e por efeitos térmicos nos contatos, costumamos revezar o sentido da corrente obtendo assim uma média das resistividades das várias partes da amostra.

Para a medida da constante de Hall, a corrente tem que fluir entre os contatos A e D, medindo-se a tensão entre os contatos B e C, isto é feito na presença de um campo magnético perpendicular à superfície da camada. Se os dois contatos sobre os quais é feita a leitura da tensão não estiverem na mesma equipotencial, detectaremos uma tensão residual a qual pode mascarar a tensão de Hall. Para eliminar essa influência, as medidas são realizadas revezando o sentido do campo magnético.

Depois de feitas estas medidas à temperatura do hélio eliminamos a sobrepressão sobre o LHe, abrindo a válvula que liga a linha de recuperação à câmara de LHe e esperamos até que o LHe contido na câmara da amostra evapore. Em seguida, fechamos novamente esta válvula e ligamos a resistência de aquecimento, que se encontra na saída do capilar, este aquecedor evapora o líquido, deixando entrar na câmara da amostra apenas o gás frio responsável pela variação da temperatura na amostra. Com isto, variamos a temperatura realizando as medidas elétricas citadas acima até atingirmos a temperatura ambiente.

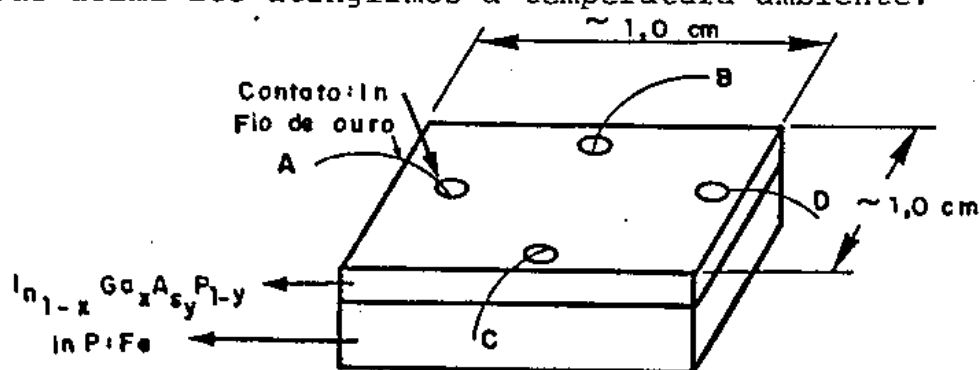


FIG. III - 5: Esquema da Amostra com seus contatos.

III.5 - Fontes de Erros Experimentais

Uma análise dos vários fatores que afastam a amostra real daquela que se poderia considerar a amostra ideal para medidas de transporte, bem como, os cuidados para reduzi-lhes a influência, é descrito detalhadamente na referência (31).

Analisaremos agora, através das expressões das grandezas medidas, os erros originados dos equipamentos de medidas:

$$\rho = \text{cte} \frac{V_{\rho}}{i_{\rho}} d \quad \text{e} \quad R_H = \text{cte} \frac{V_H d}{i_H B}$$

onde ρ é a resistividade, R_H a constante de Hall, V a tensão, i a corrente, B o campo magnético e d a espessura.

O erro total percentual nas medidas originadas por incerteza dos aparelhos de medição é, para a resistividade:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\Delta V_{\rho}}{V_{\rho}} + \frac{\Delta i_{\rho}}{i_{\rho}} + \frac{\Delta d}{d}$$

e, para a constante de Hall:

$$\frac{\Delta R_H}{R_H} = \frac{\Delta V_H}{V_H} + \frac{\Delta i_H}{i_H} + \frac{\Delta B}{B} + \frac{\Delta d}{d}$$

ou seja,

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

$$\frac{\Delta R_H}{R_H} = 1,2\% + \frac{\Delta d}{d}$$

A espessura é medida em microscópio através da revelação fotográfica da junção, o erro máximo cometido é de 10%. Desta forma o erro experimental na determinação da constante de Hall (11,2%) e da resistividade (10,2%) é praticamente todo originado pela imprecisão na medida da espessura da camada.

Sendo a mobilidade de Hall calculada através de

$$\mu_H = \frac{R_H}{\rho} = \text{cte} \frac{V_H I_\rho}{V_\rho I_H B}$$

o erro referente à medida da espessura não causará imprecisão no seu valor. Portanto, o erro experimental causado pelos aparelhos de medição, na medida da mobilidade, é menor que 2%.

Se usarmos a mesma corrente para a mobilidade de R_H e ρ , o erro reduz ainda mais, pois μ_H fica,

$$\mu_H = \text{cte} \frac{V_H}{V_\rho B} \quad \frac{\Delta \mu_H}{\mu_H} = \frac{\Delta V_H}{V_H} + \frac{\Delta V_\rho}{V_\rho} + \frac{\Delta B}{B} = 1,2\%$$

CAPÍTULO IV - APRESENTAÇÃO E ANÁLISE DOS RESULTADOS EXPERI-
MENTAIS

IV.1 - ESTUDO DOS PARÂMETROS A SEREM UTILIZADOS

Nos capítulos anteriores, várias grandezas físicas do material foram utilizadas como parâmetros dos cálculos desenvolvidos, portanto, faz-se necessário uma análise dos valores obtidos para estes parâmetros.

Para a determinação da massa efetiva dos elétrons para uma liga quaternária cristalina $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$, Nicholas e outros³² empregaram vários métodos de medidas obtendo resultados concordantes na maior parte das possíveis composições. Seus resultados coincidem com os de Perea e outros³³ e dão para nossas amostras ($y=0,63$ e $x=0,29$) $m^* = 0,057 m_0$.

O parâmetro de rede da camada epitaxial difere ligeiramente da do substrato e depende da composição da liga. Nahory e outros³⁴ mediram o parâmetro de rede das ligas abrangendo todo o espectro de composições. Para a composição aqui analisada, teremos que $a = 5,8688 \text{ \AA}$.

Através do método de interpolação que se baseia nos valores das grandezas dos binários ou dos ternários constituintes da liga, podemos estimar os parâmetros que não tem de terminação experimental. Para isto, a grandeza do quaternário é calculada por³⁵ :

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

para compostos da forma $A_{1-x}B_xC_yD_{1-y}$, onde T_{ij} é o parâmetro do binário ij .

Por esta interpolação obtemos os valores das constantes dielétricas estática³⁶, $K_s = 13,3$, e de alta frequência, $K_d = 11,1$, da temperatura de Debye para fonons ópticos³⁷, $\theta = 442$ K, do potencial de deformação acústica³⁶, $E_{1c} = 6,83$ eV, da velocidade do som $u_l = 3,5 \cdot 10^5$ cm.s⁻¹ e da banda proibida³⁴, $E_g = 0,96$ eV.

IV.2 - RESULTADOS EXPERIMENTAIS

As medidas experimentais se resumem, basicamente, na determinação do comportamento da constante de Hall (R_H) e da resistividade (ρ) em função da temperatura entre 4,2 e 300 K. As figuras (IV-1) e (IV-2) apresentam, respectivamente, as variações do logaritmo da constante de Hall e da resistividade com o inverso da temperatura absoluta (T). Notamos que há certas amostras que apresentam um valor máximo para R_H em torno de 100 K, o que em geral caracteriza uma região de transição entre processos de condução. Mas a maior parte delas mostram que a densidade de portadores se mantém praticamente constante, o que pode ser explicada por uma degenerescência ou exaustão do nível de impureza. Para o nosso cristal que é do tipo n, isto significa que os níveis doadores de energia estão muito próximos da banda de condução. Para confirmação disto, realizamos o cálculo da posição do nível de Fermi através da eq. (I-44) usando para n o valor de $\frac{1}{eR_H}$. Com

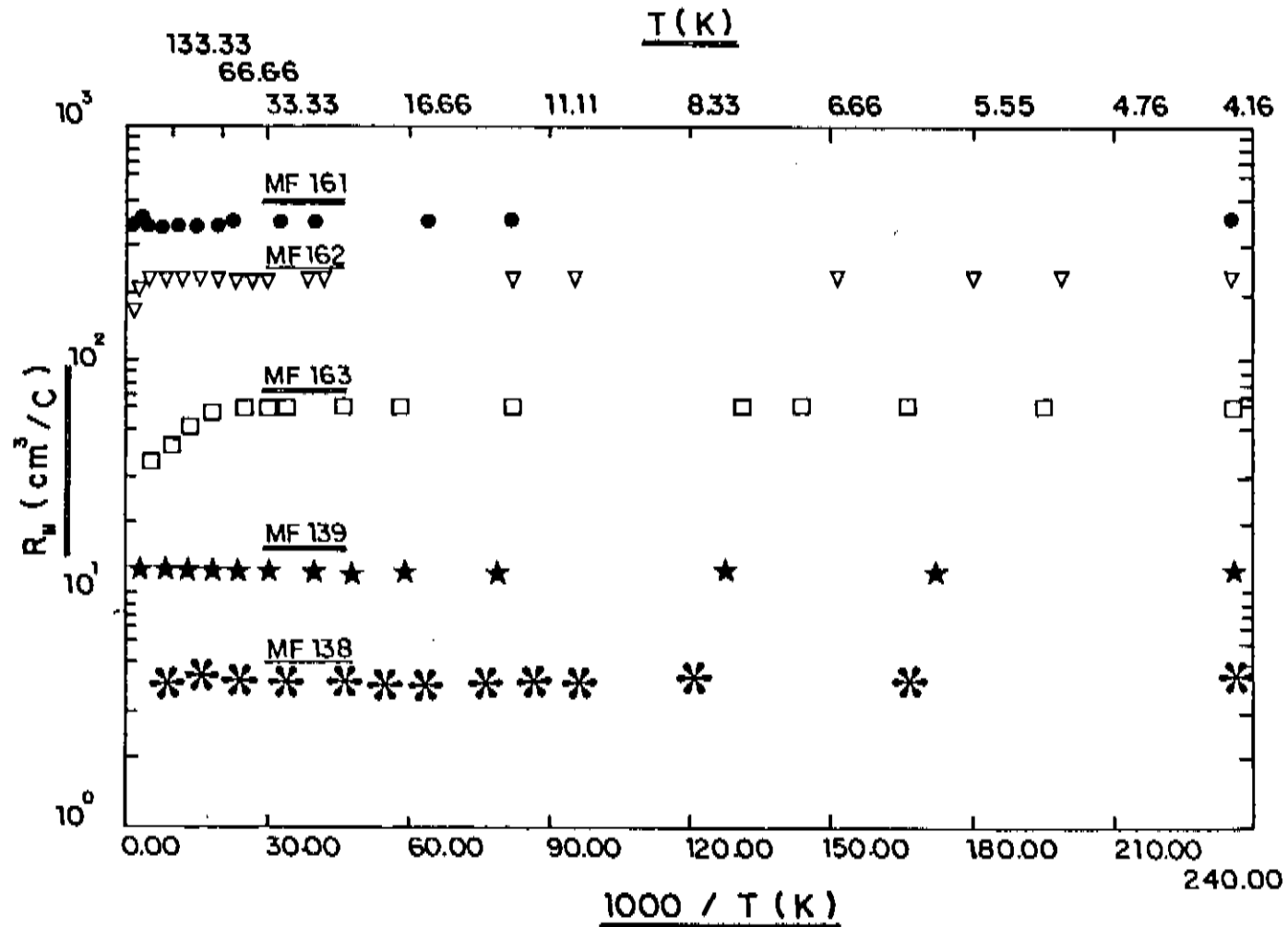
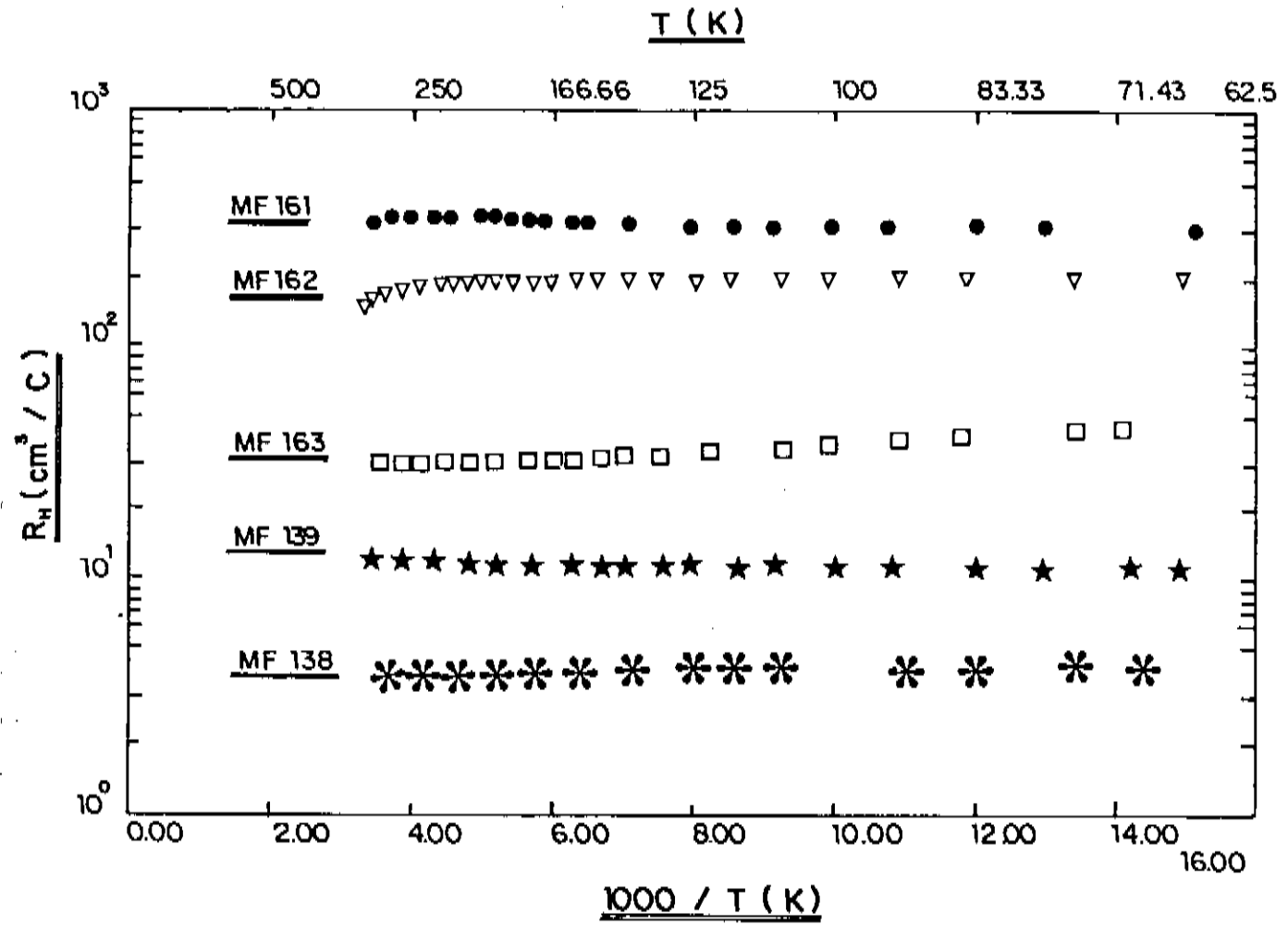


FIG. IV - 1: Variação do logaritmo da constante de Hall (R_H) com o inverso da temperatura.

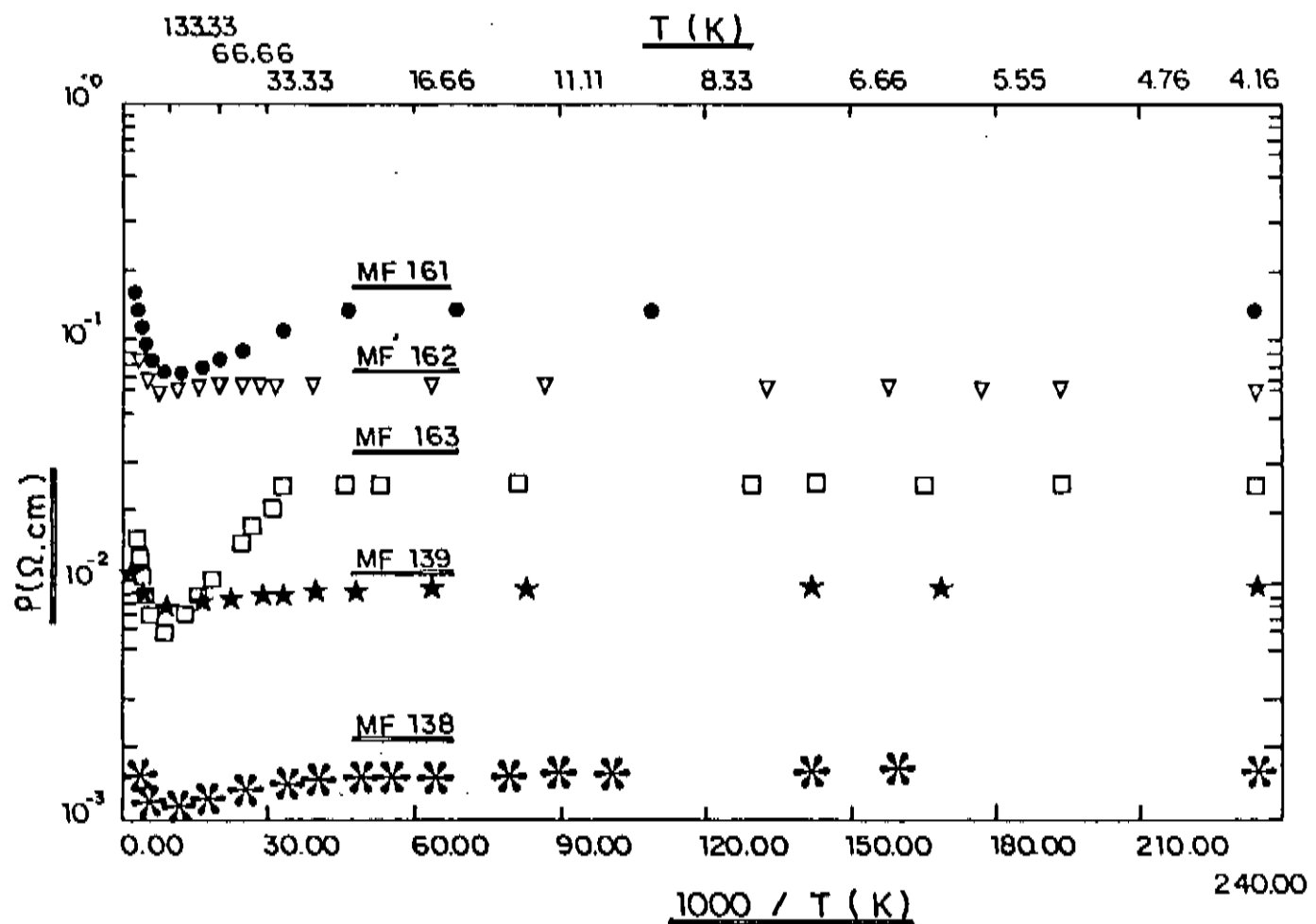
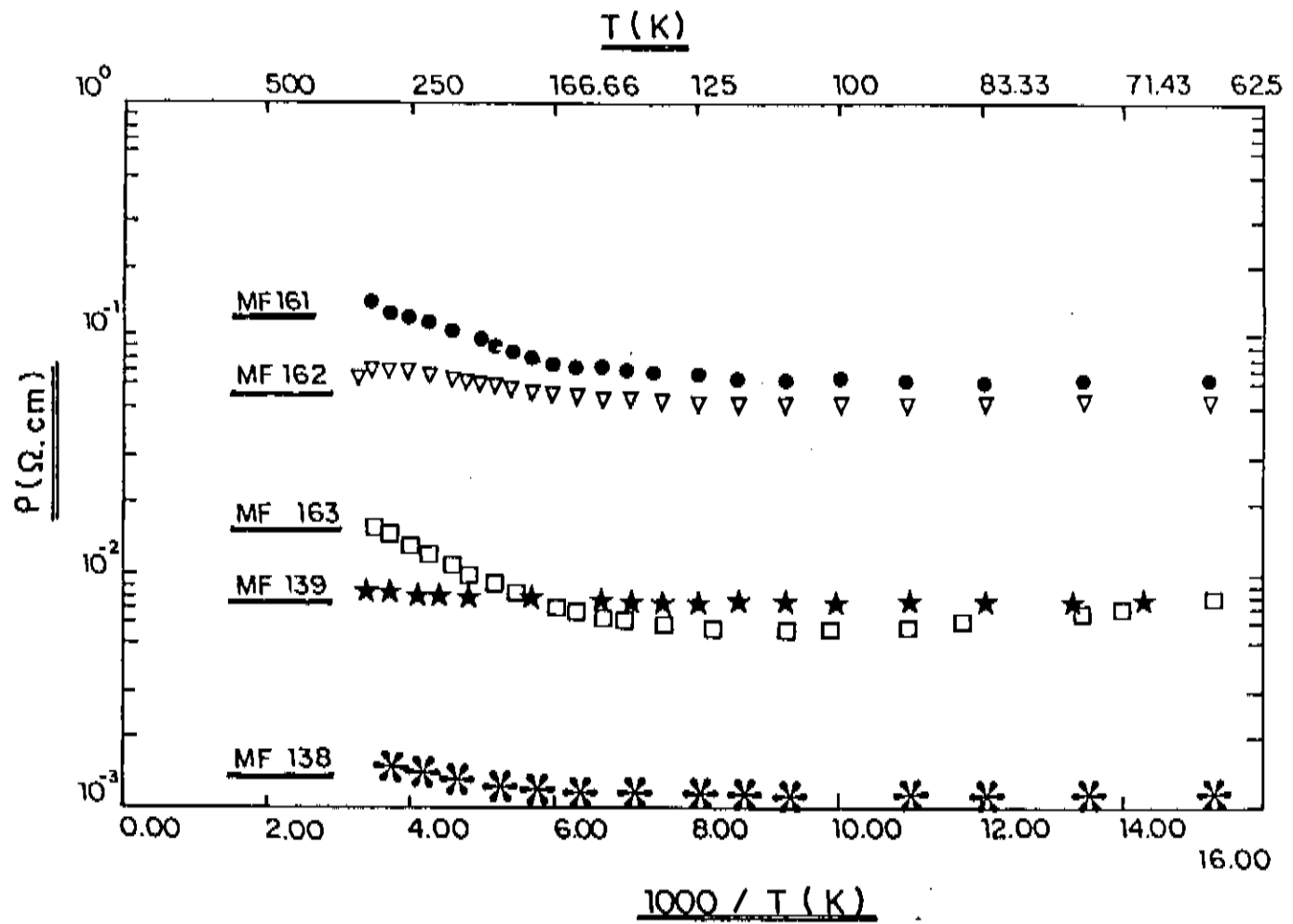


FIG. IV - 2: Variação do logaritmo da resistividade (ρ) com o inverso da temperatura.

isto, mostramos que os níveis de Fermi, ou se encontram próximos da banda de condução (para temperaturas altas), ou estão dentro dela (para temperaturas baixas). Este cálculo foi realizado através do computador cujo programa se encontra no Apêndice I.

Por outro lado, como os níveis doadores que cedem elétrons para a condução estão esgotados, isto é, estão totalmente ionizados, podemos escrever:

$$n = N_D - N_A$$

e a densidade de impurezas ionizadas é dada por:

$$N_i = N_A + N_D$$

Os níveis de impurezas doadoras (N_D) e aceitadoras (N_A) são mais fáceis de serem observadas à baixa temperatura porque, para bandas proibidas não muito pequenas, não há influência dos portadores intrínsecos.

O coeficiente de Hall da amostra MF163 apresenta um decaimento na faixa de temperatura entre 53 K e 300 K, o que significa que neste cristal há um nível de impureza próximo à banda de condução. Através da eq. (I-50), na aproximação para $k_B T \gg F'$, calculamos a energia de ionização deste nível na região que se apresenta a inclinação citada. Obtivemos, através de interpolação pelo método dos mínimos quadrados, o valor $\Delta E = 32,6$ meV, que corresponde a um átomo de impureza de silício ^(38, 39).

Na amostra MF162, possivelmente encontraríamos

impurezas em um nível mais profundo, se continuássemos a realizar medidas para temperaturas acima da ambiente.

Para o cristal menos dopado (MF161), é de se esperar que o fator de Hall r_H seja diferente de 1, pelo menos perto da temperatura ambiente. Para verificarmos isto, utilizamos o valor da energia de Fermi encontrada através de

$$n = \frac{1}{eR_H} = N_c F_{1/2} \quad (\text{eq. (I-44)}) \text{ e, com eles, calculamos}$$

$$r_H = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \quad \text{para todos os tipos de espalhamento.}$$

Este procedimento é justificável porque os valores de r_H estão sempre entre 1 e 2 e a posição do nível de Fermi varia muito pouco com uma variação desta ordem em n .

Os gráficos de $r_H \times 1/T$ para os vários tipos de espalhamento do cristal citado acima, são mostrados na figura (IV-3).

As curvas de resistividade não evidenciaram qualquer mudança de comportamento a baixa temperatura. Verificamos, também, que elas atingem um mínimo em torno de 100 K.

As figuras (IV-4) mostram o comportamento da mobilidade de Hall (μ_H), que é derivada das medições efetuadas ($\mu_H = R_H/\rho$), com o inverso da temperatura absoluta, das amostras estudadas neste trabalho. Através delas determinamos a densidade de impurezas ionizadas (N_i) e o potencial de espalhamento por desordem na rede (ΔU) que, como veremos mais adiante, juntamente com a densidade de portadores (n) obtida pela curva da constante de Hall, fornecem as densidades de impurezas doadoras e aceitadoras.

Analisando com cuidado as figuras (IV-4) vemos que na maioria das curvas a mobilidade apresenta-se constante

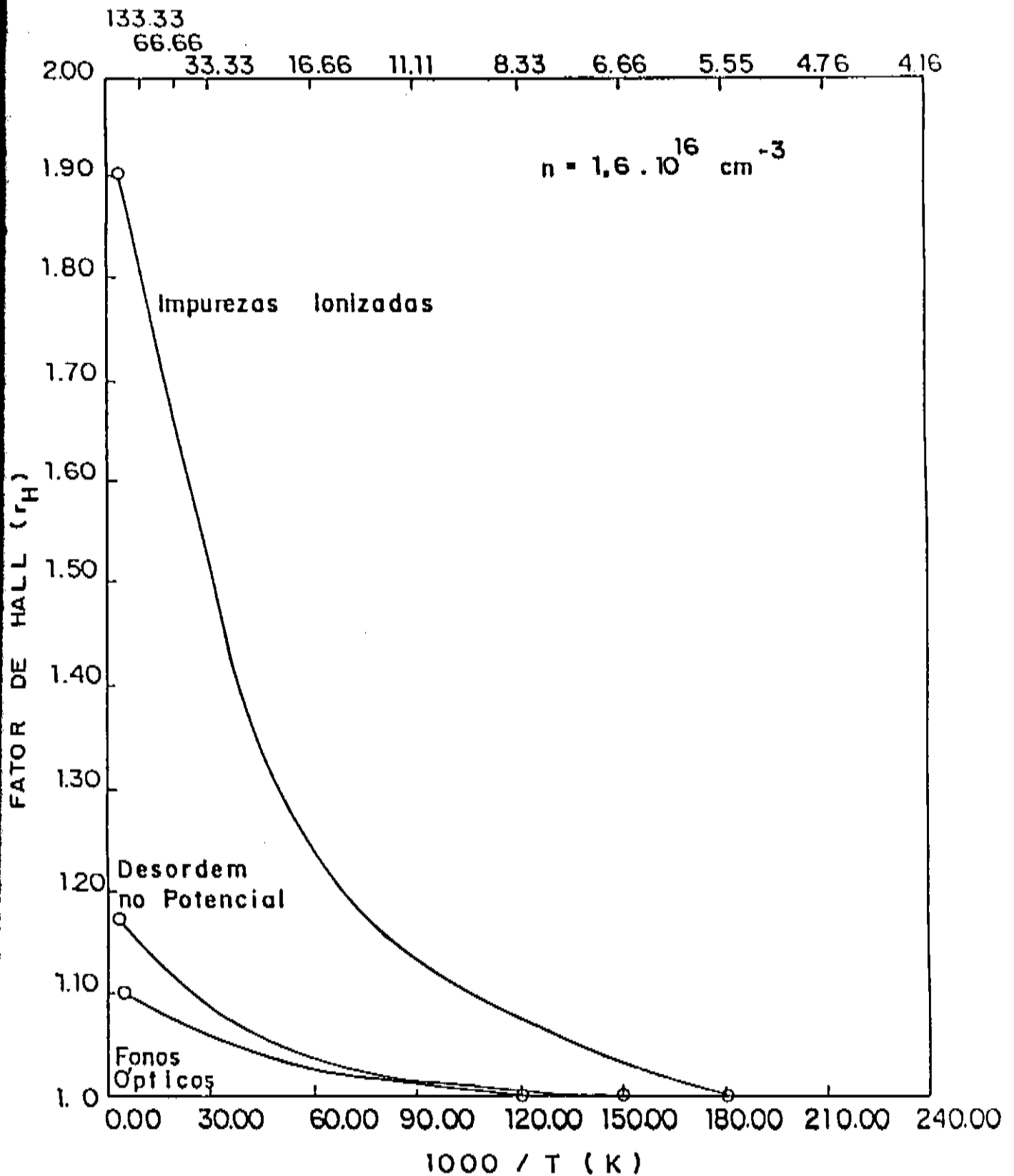
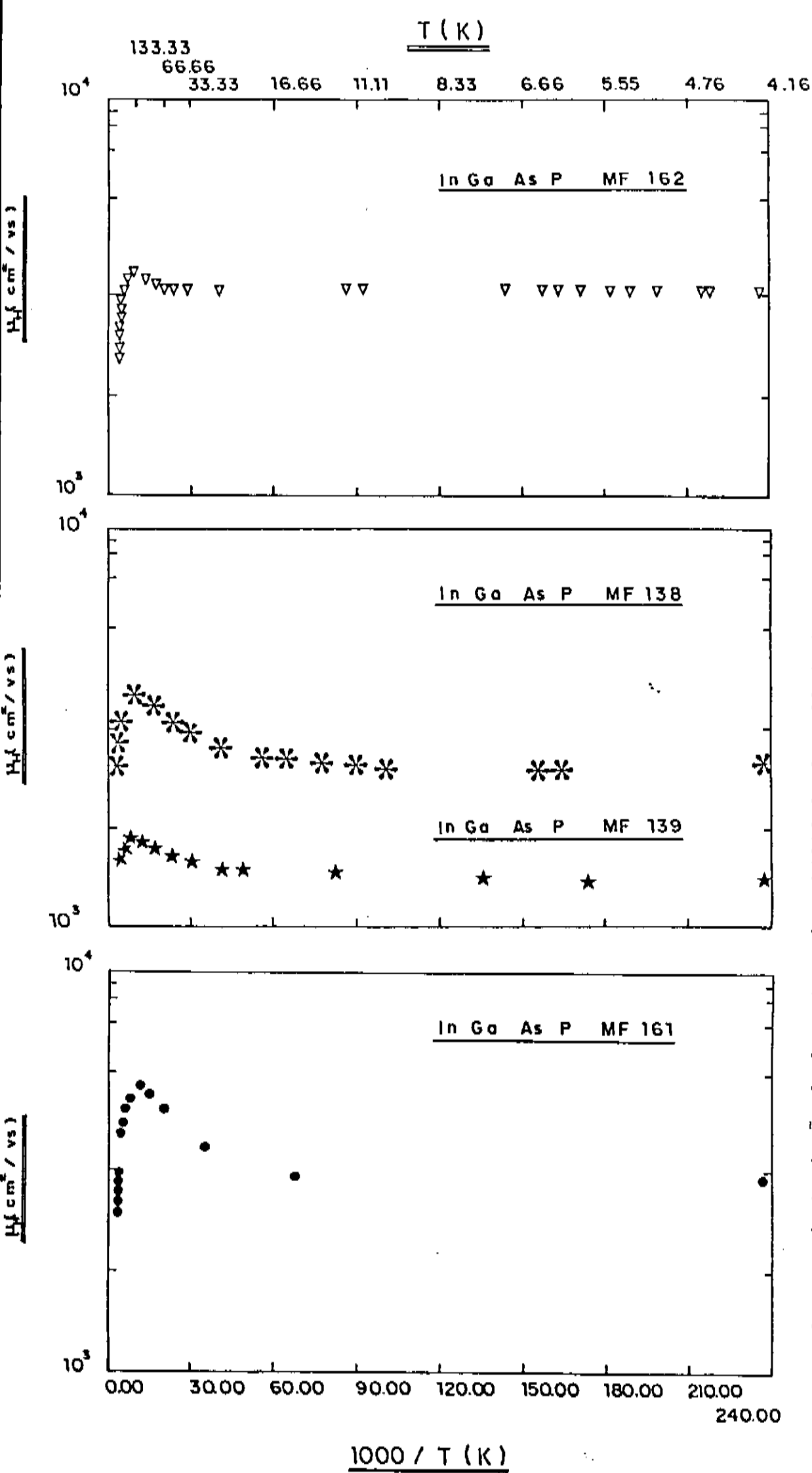


FIG.IV - 3: Variação do Fator de Hall (r_H) para impurezas ionizadas, desordem no potencial e fonos ópticos com o inverso da temperatura.



entre 4,2 K e 17 K, crescendo , a partir daí, até atingir um máximo em torno de 100 K e em seguida decrescendo rapidamente até a temperatura ambiente. Este máximo, verificado nas curvas da mobilidade, identifica uma transição do domínio de um certo tipo de espalhamento para um outro. A baixa temperatura (4,2 - 50 K) é marcante a influência das impurezas ionizadas, enquanto que para temperaturas próximas à ambiente a curva sofre influência marcante do espalhamento por fonons ópticos . O espalhamento por desordem da rede influencia a curva em toda a faixa de temperatura medida. É importante assinalar que, para amostras pouco dopados, a influência do espalhamento por desordem da rede pode ser até maior que a do espalhamento por impureza ionizada.

Na tabela 3 encontra-se as características das amostras estudadas neste trabalho.

TABELA 3:

Amostra	composição		$n(\text{cm}^{-3})$	$\rho(4,2\text{K})$	$\rho(\approx 77\text{K})$	$\rho(\approx 300\text{K})$
	x	y				
MF 161	0,29	0,63	$1,6 \cdot 10^{16}$	$1,33 \cdot 10^{-1}$	$7,66 \cdot 10^{-2}$	$1,59 \cdot 10^{-1}$
MF 162	0,29	0,63	$3,2 \cdot 10^{16}$	$7,06 \cdot 10^{-2}$	$6,56 \cdot 10^{-2}$	$7,94 \cdot 10^{-2}$
MF 163	0,29	0,63	$3,1 \cdot 10^{16}$	$9,66 \cdot 10^{-3}$	$6,74 \cdot 10^{-3}$	$1,7 \cdot 10^{-2}$
MF 139	0,29	0,63	$5,2 \cdot 10^{17}$	$9,04 \cdot 10^{-3}$	$7,6 \cdot 10^{-3}$	$8,38 \cdot 10^{-3}$
MF 138	0,29	0,63	$1,6 \cdot 10^{18}$	$1,6 \cdot 10^{-3}$	$1,15 \cdot 10^{-3}$	$1,51 \cdot 10^{-3}$

$\mu_H(4,2\text{K})$	$\mu_H(\approx 77\text{K})$	$\mu_H(\approx 300\text{K})$	d (μm)
$3,02 \cdot 10^3$	$5,05 \cdot 10^3$	$2,46 \cdot 10^3$	0,55
$3,33 \cdot 10^3$	$3,52 \cdot 10^3$	$2,19 \cdot 10^3$	0,60
$6,46 \cdot 10^3$	$7,84 \cdot 10^3$	$2,14 \cdot 10^3$	0,50
$1,41 \cdot 10^3$	$1,68 \cdot 10^3$	$1,51 \cdot 10^3$	0,55
$2,61 \cdot 10^3$	$2,61 \cdot 10^3$	$2,75 \cdot 10^3$	0,50

sendo que ρ é dado em $\Omega \cdot \text{cm}$ e μ_H em $\text{cm}^2/\text{V.s}$.

O programa utilizado para fazermos os cálculos de R_H , ρ , μ_H e traçar as curvas apresentadas nesta secção estão no Apêndice II.

IV.3 - MÉTODO DE ANÁLISE DA MOBILIDADE

Num primeiro passo, utilizando os valores de constantes encontrados na literatura e valores para concentração de impurezas ionizadas coerentes com os nossos resultados experimentais e utilizando a regra de Mathiessen dada pela eq. (II-1), traçamos uma curva teórica de $\mu_D \times 1/T$.

Esta curva teórica (μ_D), juntamente com as curvas teóricas de $\mu_{||}$, μ_{PO} , μ_A e μ_{PA} que encontram-se na figura (IV-5), nos serve de referência para a análise dos resultados experimentais. No Apêndice III encontra-se o programa utilizado para realizar estes cálculos.

Como resultados observamos que:

- a) Espalhamento por fonon acústico praticamente não influencia no cálculo da mobilidade.
- b) À temperatura ambiente, fonons ópticos e desordem do potencial cristalino são os modos predominantes de espalhamento.
- c) À baixa temperatura, impurezas ionizadas e desordem do potencial cristalino são os modos predominantes. Portanto, ao contrário do que tem sido considerado usualmente ^(40, 41), impurezas ionizadas não são os únicos centros de espalhamento importantes à baixa temperatura.

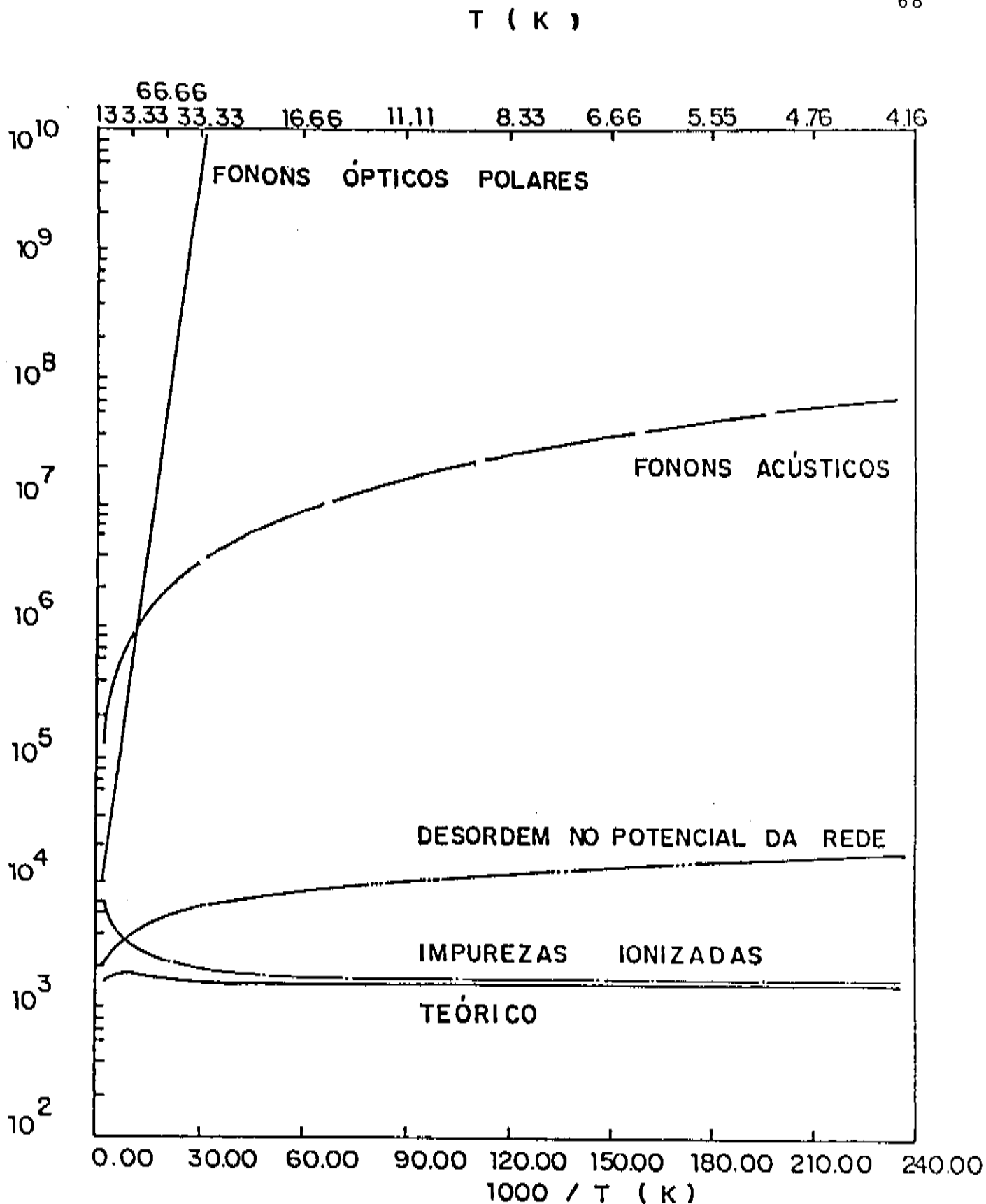


FIG.IV - 5: Variação das mobilidades teóricas ($\mu_{PO}, \mu_{PA}, \mu_A, \mu_{II}, \mu_D$) com o inverso da temperatura.

Dos parâmetros a serem utilizados nestes cálculos, não conhecemos com precisão, para o nosso material, a densidade de impurezas ionizadas (N_i), usada no cálculo da mobilidade limitada por espalhamento por impurezas ionizadas (μ_{II}), nem o potencial de espalhamento (ΔU) usada no cálculo da mobilidade limitada por espalhamento por desordem no potencial da rede (μ_A). Para a análise dos resultados experimentais propriamente dito, utilizamos o fato de que os fonons não influenciam a mobilidade dos portadores do material à baixa temperatura e como, à 4,2 K, todos os cristais estão degenerados, substituímos o valor da mobilidade de Hall à esta temperatura na equação da mobilidade limitada por impurezas ionizadas e obtivemos um valor da densidade de impurezas ionizadas (N_i).

Levando em conta que a mobilidade limitada por desordem no potencial da rede pode ser expressa como função do potencial ΔU , ou seja, $\mu_A = h(\Delta U)$ calculamos o valor de ΔU para temperaturas entre 4,2 e 300K, através da equação, derivada da regra de Mathiessen:

$$\frac{1}{h(\Delta U)} = \frac{1}{\mu_{PO}} + \frac{1}{\mu_{II}} + \frac{1}{\mu_{PA}} - \frac{1}{\mu_H} \quad (IV-1)$$

Consideramos sempre $r_H = 1$ e N_i fixo, exceto para o cristal MF 161, como veremos depois.

Este cálculo foi realizado através do computador, cujo programa se encontra no Apêndice IV.

Evidentemente, o valor de ΔU calculado não está tão correto uma vez que, como vimos, espalhamento por desordem do potencial da rede também influencia a mobilidade a 4,2 K. Entretanto, ele serve como valor inicial para ajustar as curvas teóricas às experimentais. Para isto, demos pequenos a-

crêscimos a ΔU . calculamos um novo valor de N_i através da eq. (IV-1) bem como o desvio padrão. Novos incrementos são dados a ΔU até que o desvio padrão passe por um mínimo. O valor de ΔU e N_i correspondentes a este valor mínimo são considerados os melhores.

Para o cristal MF 161, consideramos o fator de Hall calculado fig. (IV-3) . Neste caso, a equação IV-1 foi modificada para :

$$\frac{1}{\mu_H} = \frac{1}{r_{H_{PO}} \mu_{PO}} + \frac{1}{r_{H_{\Pi}} \mu_{\Pi}} + \frac{1}{r_{H_A} \mu_A}$$

Para a amostra MF 163, fizemos o ajuste somente para temperaturas abaixo de 50 K pois, como vimos, acima desta temperatura começa a excitação de um nível de impureza. Para a interpolação acima de 50 K, consideramos $N_i = N_{i_{T < 50K}} + \Delta n$, Δn sendo a variação de n .

IV.4 - RESULTADOS DA ANÁLISE E DISCUSSÃO

Na tabela 4 temos os resultados obtidos através dos cálculos realizados na secção anterior, para as densidades de impurezas ionizadas, aceitadoras e doadoras e para o potencial de espalhamento de cada uma das amostras estudadas.

TABELA 4 :

Amostra	N_i (cm ⁻³)	N_A (cm ⁻³)	N_D (cm ⁻³)	ΔU (eV)
MF 161	$1,88 \cdot 10^{16}$	$1,4 \cdot 10^{15}$	$1,74 \cdot 10^{16}$	0,56
MF 162	$4,65 \cdot 10^{16}$	$7,3 \cdot 10^{15}$	$3,92 \cdot 10^{16}$	0,61
MF 163	$5,83 \cdot 10^{16}$	$1,37 \cdot 10^{16}$	$4,46 \cdot 10^{16}$	0,57
MF 139	$6,86 \cdot 10^{17}$	$8,3 \cdot 10^{16}$	$6,03 \cdot 10^{17}$	0,52
MF 138	$5,07 \cdot 10^{18}$	$1,73 \cdot 10^{18}$	$3,34 \cdot 10^{18}$	0,62

Com os resultados acima obtidos, podemos calcular a curva teórica para a mobilidade através da regra de Mathiessen (eq.II-1). Comparando esta curva com a experimental, observamos uma boa interpolação (Figs.IV-6).

Leheny e outros⁴² mostraram que esta interpolação é impossível sem considerarmos o espalhamento por desordem no potencial da rede. A maioria dos trabalhos subsequentes leva em consideração este tipo de espalhamento mas, por outro lado não analisam a mobilidade à baixa temperatura e consideram, em geral, $N_i = n$, estatística de Boltzmann e $r_H = 1$. O uso da estatística de Boltzmann ao invés da de Fermi-Dirac pode dar diferenças substanciais nos resultados. Talvez advenha daí a dispersão dos valores de ΔU encontrados na literatura (entre $0,3^{29}$ e $0,8^{43}$). Naturalmente, para uma certa faixa de concentração, as aproximações usadas normalmente são válidas e os valores de ΔU devem coincidir com o nosso. Um ponto importante que não levamos em conside

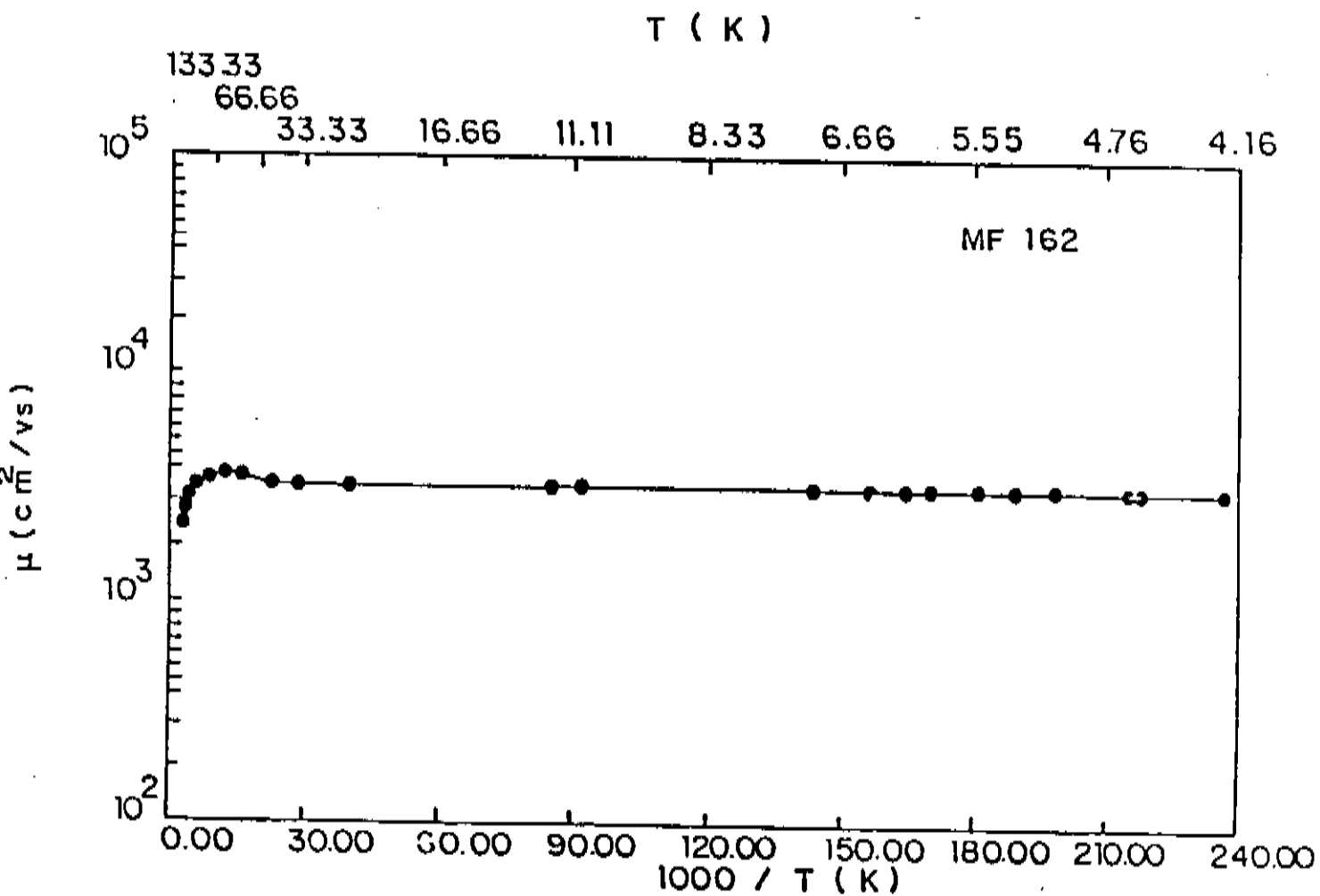
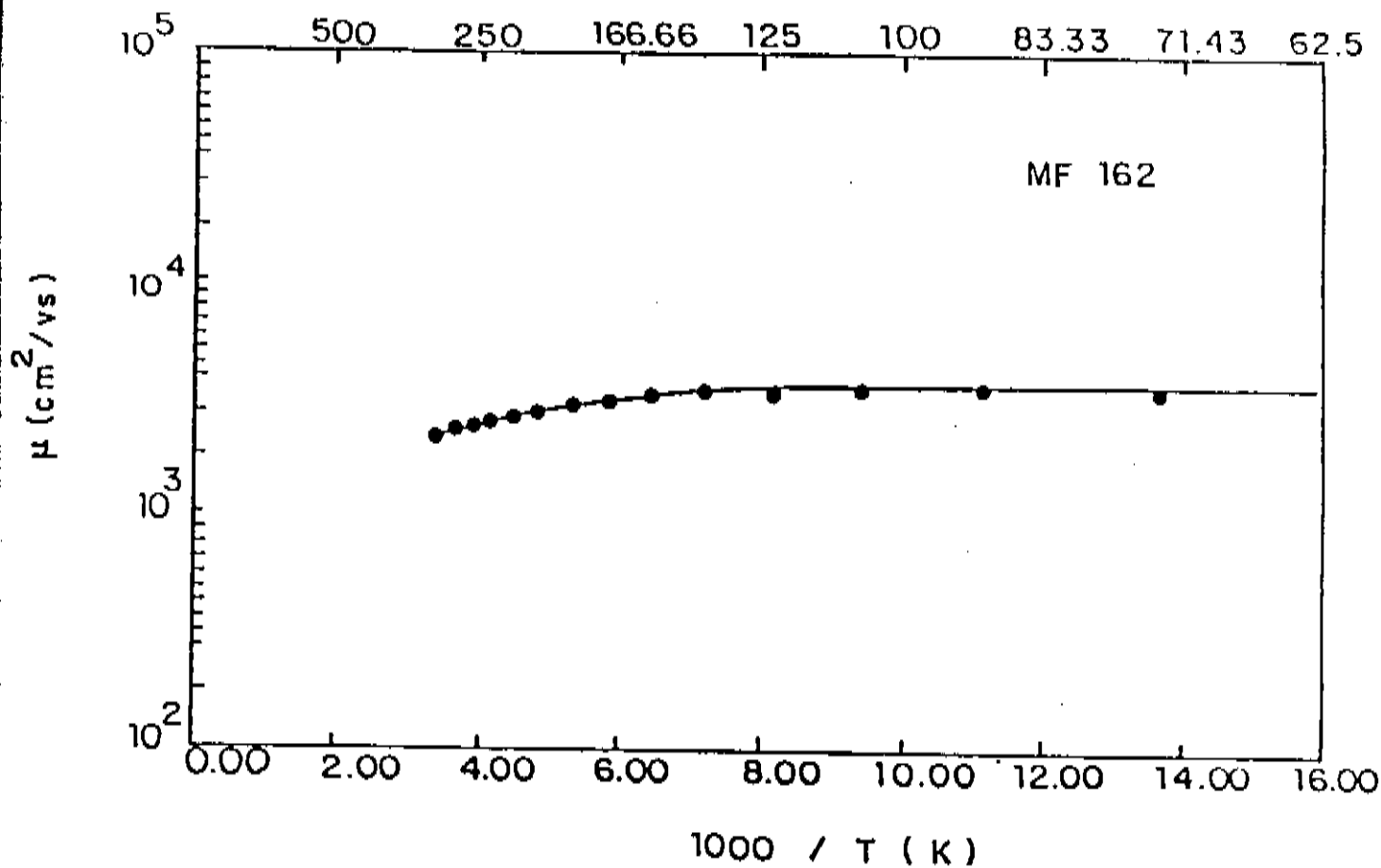


FIG. IV - 6: Comparação da curva da mobilidade teórica (μ_D) com os pontos experimentais (μ_H), em função do inverso da temperatura.

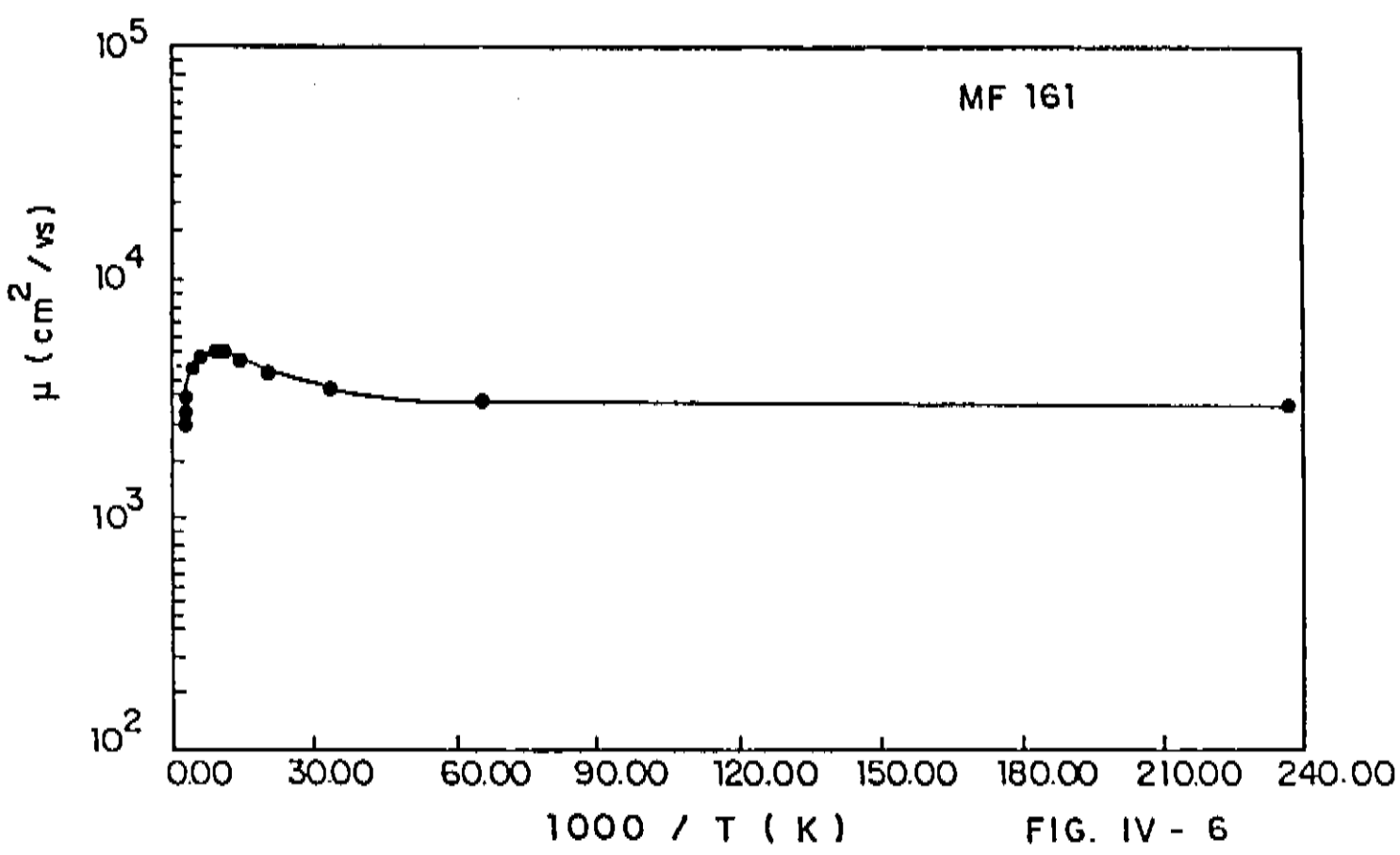
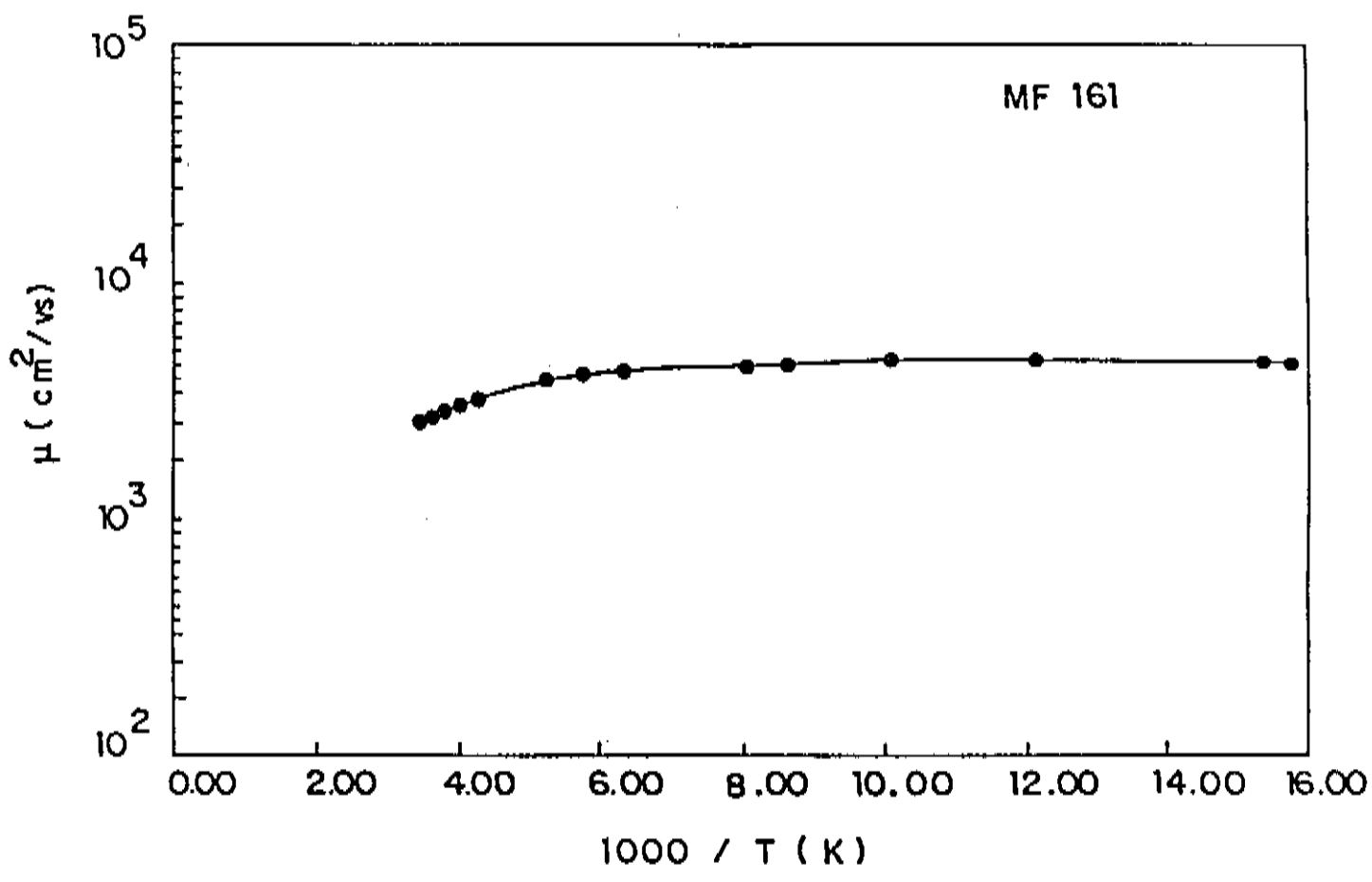


FIG. IV - 6

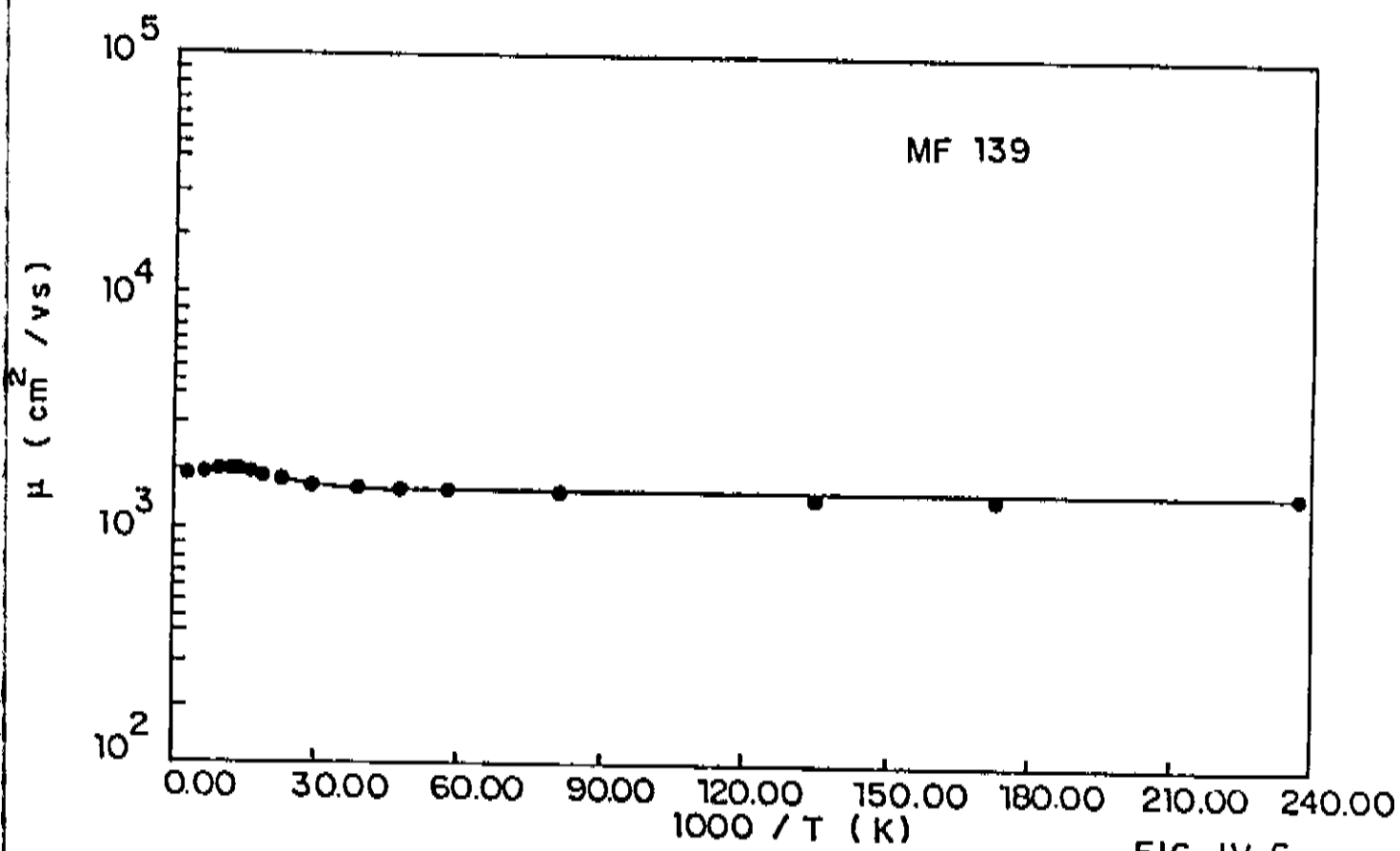
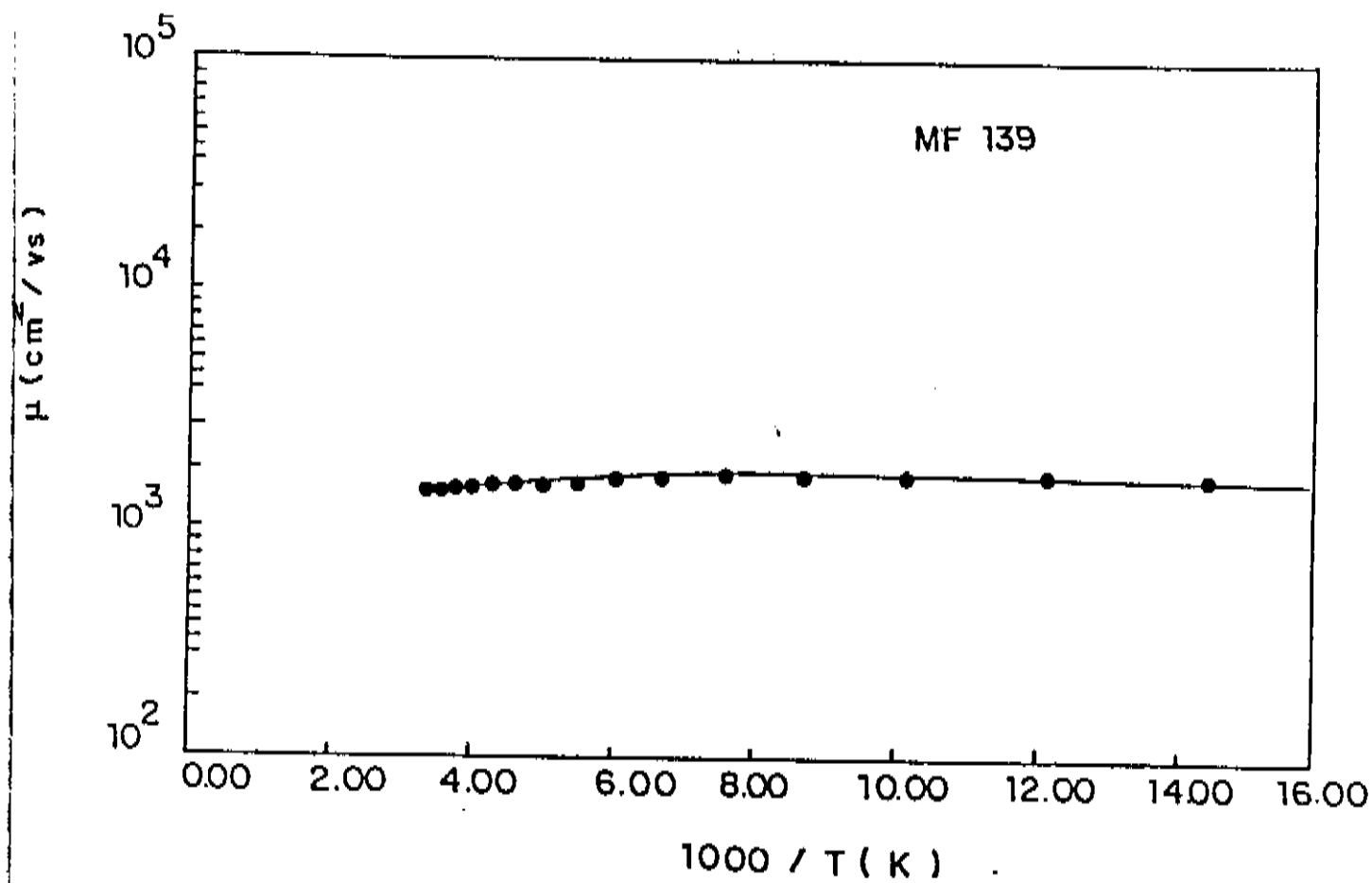


FIG. IV-6

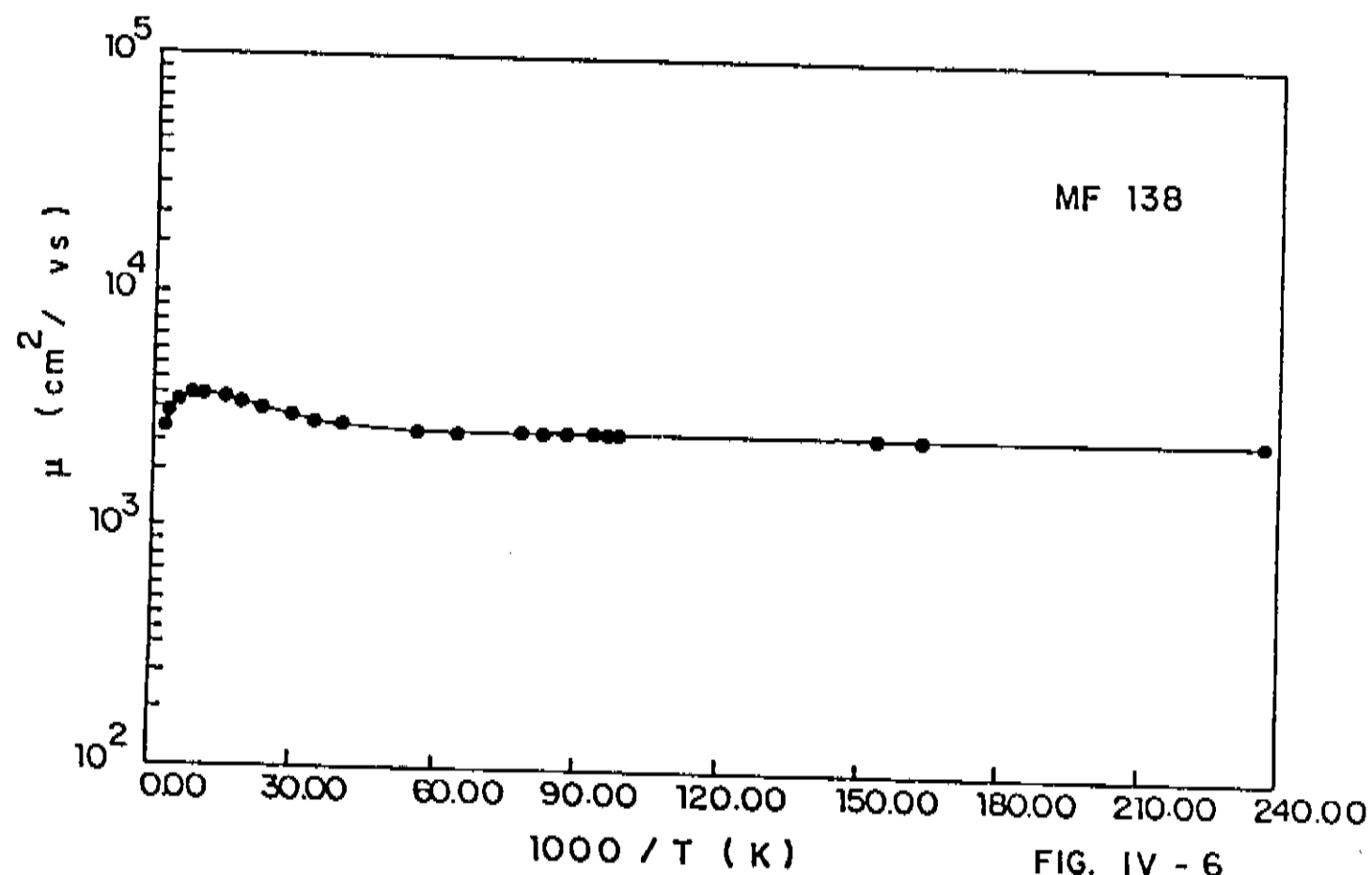
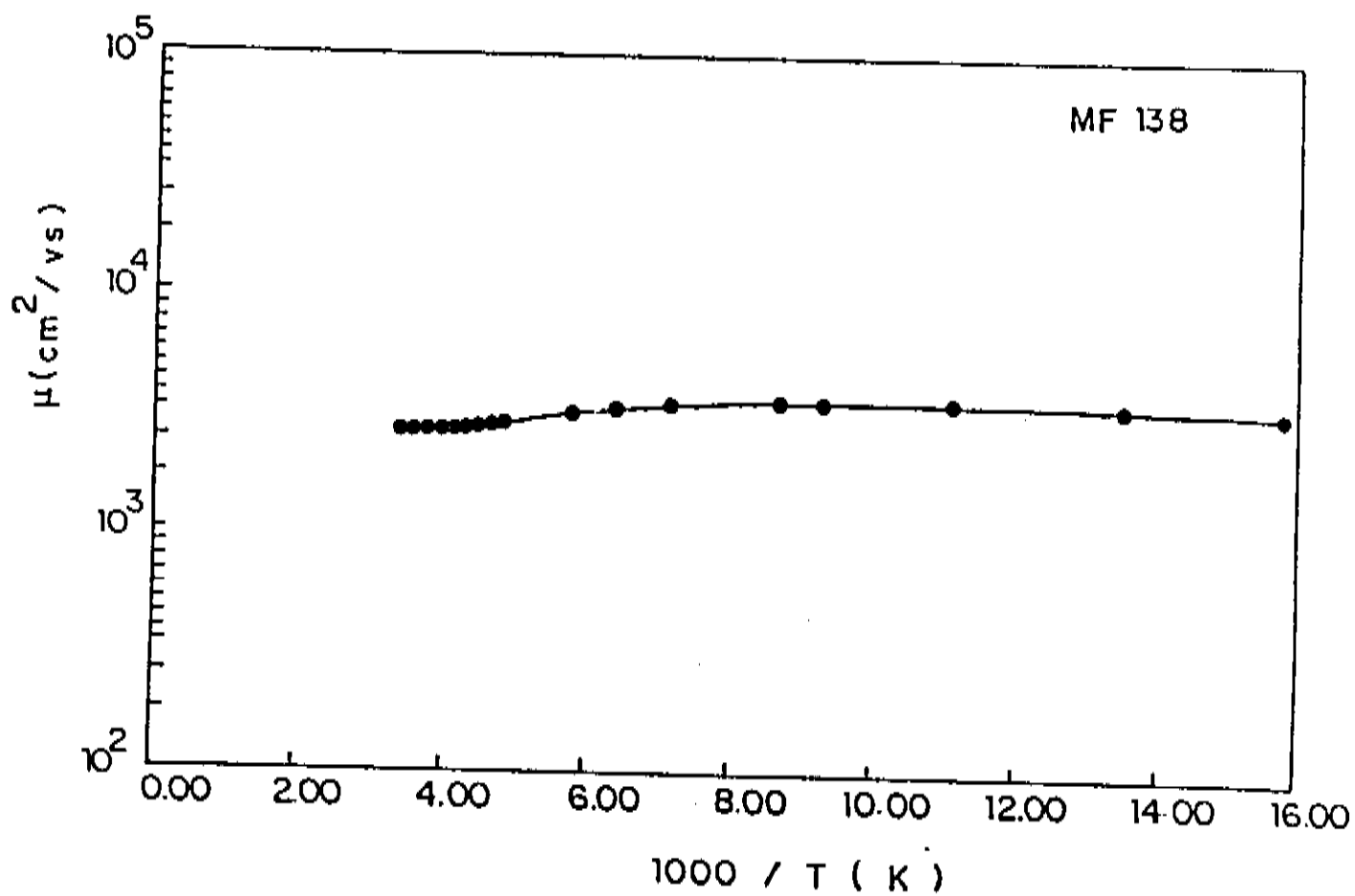


FIG. IV - 6

ração, foi a influência da região de depleção e da interface em camadas tão finas. Chandra e outros⁴⁴ demonstraram que, para o GaAs pouco dopado ($n < 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), estas influências são muito importantes. Entretanto, como o InGaAsP aqui estudado tem uma banda proibida da ordem de 60% da do GaAs e concentrações maiores que 10^{16} cm^{-3} , acreditamos que podemos desprezar estas influências. Corroborando com este raciocínio, temos o resultado de uma experiência feita por Ceolin⁴⁵ que verificou a invariância de n , ρ e μ com a decapagem da amostra.

No que concerne a precisão dos nossos resultados, podemos dizer que dentre as medidas, a menos precisa é a da espessura da camada. Entretanto, esta espessura não tem nenhuma influência sobre a mobilidade e sua influência sobre n praticamente não se reflete sobre a posição do nível de Fermi cujo cálculo foi a principal razão da medida de n . Assim, como as precisões das medidas das tensões, correntes, campo magnético são melhores que 1%, o valor da mobilidade é preciso a menos de 15%. Considerando o desvio padrão das curvas de mobilidade encontrada, o erro relativo de ΔU e N_i é de aproximadamente 10%.

Finalmente, através dos valores de ΔU calculados, podemos concluir que a interpretação que mais se aplica ao significado de ΔU é a da diferença entre as larguras das bandas proibidas cujo valor teórico esperado é de 0,52eV conforme calculado na secção II.6.4 .

CAPÍTULO V - CONCLUSÕES

Mostramos que para nossas amostras o nível de Fermi, mesmo para concentrações da ordem de 10^{16} cm^{-3} , encontra-se na banda de condução à baixa temperatura. Assim, ao contrário do que se tem feito em geral, é importante levar em consideração a estatística usada. Normalmente usa-se a estatística de Boltzmann que, como visto no decorrer deste trabalho, não é conveniente para este tipo de material. Por isto, utilizamos a estatística de Fermi - Dirac.

Outro fato a ser levantado, é a respeito da importância da mobilidade limitada pelo espalhamento por desordem no potencial da rede à baixa temperatura. Vimos que, apesar da mobilidade limitada por impurezas ionizadas ser dominante, nesta região, a influência da mobilidade limitada pelo espalhamento por desordem no potencial da rede não pode ser desprezada, o que não é considerado nas referências consultadas.

Levando em consideração estes fatores, os valores de ΔU por nós encontrados estão concentrados entre 0,52 e 0,62 eV. Se considerarmos o valor de 0,57 eV (valor médio) como o valor mais provável de ΔU , todos os outros valores de ΔU estarão dentro da faixa de 10% de erro o que indica uma boa precisão para este tipo de análise. Queremos ainda chamar a atenção para o fato do valor experimental de ΔU estar próximo do valor teórico, calculado em II.6.4, para o caso de ΔU ser originário da diferença entre as bandas proibidas ($\Delta U_{EG} = 0,52 \text{ eV}$).

```

C *****
  FIM(I) = FIM(FK, I, FI)
  FIM = 9001(FK)/(EXP(FK*E1)+1.)
C *****
  FIM = 9.2513E19*SQRT(X)/(1+EXP((X=FI)/(0.861735E-4*T)))
  RETURN
  FIM
C *****
C ***** INTEGRALAC = REGRA DE SIMPSON
  DATA XMIN, XMAX
  TYPE 1
1  FORMAT('TEMPERATURA =')
  ACCEPT *, T
  TYPE 2
2  FORMAT('KBT =')
  ACCEPT *, FT
  E1 = FI/(0.617E-2*T)
  IF (ET, LE, 0.) ENMAX = 86. + ET
  IF (ET, GE, 0.) ENMAX = 86. - ET
  TYPE 3, 'VALOR MAXIMO CALCULADO E1, ENMAX'
  TYPE 21
21  FORMAT('KBT MAXIMO =')
  ACCEPT *, XMAX
  TYPE 3
3  FORMAT('REGRA RELATIVO =')
  ACCEPT *, ER1
  IFLAG = 0
  DELTA = (XMAX - XMIN)/2.
30  CRT = INT((XMAX - XMIN)/DELTA) + 1
  TYPE 6, CRT
6  FORMAT('X, T4, I PONTOS EM CALCULO E1, /')
  DO I = 0, (CRT-1)
  TYPE 7, I+1
7  FORMAT('I+1, T25, T4)
  X = XMIN + I*DELTA
  IF (I, EQ, 0) THEN
  SOMA = FIM(X, T, ET)
  ELSE IF (I, EQ, (CRT-1)) THEN
  SOMA = SOMA + FIM(X, T, FT)
  ELSE IF (FLOAT(I)/2., EQ, INT(I/2.)) THEN
  SOMA = SOMA + 2*FIM(X, T, ET)
  ELSE
  SOMA = SOMA + 4*FIM(X, T, ET)
  END IF
  END DO
  SOMA1 = SOMA + DELTA/3.
  TYPE *, 'SOMA1 =', SOMA1
  IF (IFLAG, EQ, 0) GO TO 10
  ER2 = ABS(SOMA1 - SOMA2)/SOMA2
  IF (ER2, LT, ER1) GO TO 20
10  SOMA2 = SOMA1
  DELTA = DELTA/2.
  IFLAG = 1
  GO TO 30
20  RES = SOMA1 + 7.4159653E13*T**1.5
  TYPE 5, RES
5  FORMAT('INTEGRAL =', 2PF15.6)
  STOP 'TERMINOU'
  END

```

```

SUBROUTINE PLOG(X,Y,NPT,EIXOY,NEIX,TIT,NTIT,CAMP)
DIMENSION X(100),Y(100),XX(102),YY(102),XINC(2),YL(2)
CHARACTER*(*) EIXOY,TIT
DATA COMP,XINC,YL/5.,30.,2.,0.,0.8/
CALL PLOT(.5,13.,40)
CALL SYMBOL(1.,12.5,.2,TIT,0.,20)
CALL SYMBOL(4.75,12.5,.15,'1 B (KG) 1=1,0.,10)
CALL NUMBER(7.,12.5,.15,CAMP,0.,2)
CALL PLOT(0.,0.,3)
MIN=INT(LOG10(Y(1)))
MAX=MJN
DO 1=1,NPT
XX(1)=1V00./X(1)
YY(1)=LOG10(Y(1))
WRITE(10,*)Y(1),YY(1),X(1),XX(1)
IF(YY(1).LT.MIN)MIN=INT(YY(1))
IF((YY(1).LT.MIN).AND.(YY(1).LE.0))MIN=INT(YY(1))-1
IF((YY(1).GT.MAX).AND.(YY(1).LE.0))MAX=INT(YY(1))
IF(YY(1).GT.MAX)MAX=INT(YY(1))+1
END DO
TYPE *, 'POTENCIA GRAFICA MINIMA =',MIN,' MAXIMA =',MAX
TYPE *, 'DE "MINIMO" E "MAXIMO"'
ACCEPT *,MIN,MAX
NP=NPT
DO 10 J=1,2
IF(1.EQ.1)GO TO 20
NP=0
DO 30 J=1,NPT
IF(XX(J).GT.16)GO TO 30
NP=NP+1
IF(NP.GT.100)STOP 'ESTOUROU DIM NA SUBROTINA'
XX(NP)=XX(J)
YY(NP)=YY(J)
CONTINUE
XX(NP+1)=0.0
XX(NP+2)=XINC(1)
YY(NP+1)=FLOAT(MIN)
YY(NP+2)=FLOAT(MAX-MIN)/COMP
CALL PLOT(.5,YL(1)+.5,=3)
CALL RECT(0.,0.,COMP,8.,0.,2)
CALL AXIS(0.,0.,'1000/T(K)',=9,8.,0.,0.,XINC(1))
YP=(1./YY(NP+2))
DO 100 J=MIN,MAX
YP=YP+(1./YY(NP+2))
CALL SYMBOL(=.22,YP,.1,'10',0.,2)
YP2=YP+.15
CALL NUMBER(=.12,YP2,.06,FLOAT(J),0.,=1)
IF(J.EQ.MAX)GO TO 100
DO 100 K=2,10
YP3=YP+(1./YY(NP+2))*LOG10(FLOAT(K))
CALL PLOT(0.,YP3,3)
XP=-LOG(FLOAT(K))/20.
CALL PLOT(XP,YP3,2)
CALL PLOT(8.,YP3,3)
CALL PLOT(8.-XP,YP3,2)
CONTINUE
YP=COMP/2.=0.5
CALL SYMBOL(=.3,YP,.2,EIXOY,90.,NEIX)
CALL LINE(XX,YY,NP,1.=1,43)
CALL PLOT(=.5,YL(1)=.5,=3)

```

30
20

100

10

```

CALL PLOT(0.,0.,999)
WRITE(40,5)
5   FORMAT(1H1)
110  TYPE *,'***** SAINDO DA SUBROTINA PLOG.'
RETURN
END

FUNCTION TEMP(T0)
IF(T0.LT.221.46)STOP '***** TEMP. ABAIXO DO INTERVALO.'
IF(T0.LE.237.87)TEMP=4.4363193+T0-978.26732
IF(T0.GT.237.87)TEMP=4.1010062+T0-898.50636
IF(T0.GT.292.25)STOP '***** TEMP. ACIMA DO INTERVALO.'
RETURN
END

REAL ICOR,M1(100),L02
DIMENSION B(300),VH(300),VR1(300),VR2(300),T(300),
IR0(100),TRO(100),RH(100),TRH(100),TMI(100)
CHARACTER DADOS*12,AMOSTRA*40
DATA I,NRH,NRO,NMI,L02/1,3*0.,69314718/
TYPE 1
1   FORMAT('IGUAL ARQUIVO DE DADOS? ')
ACCEPT 2,DADOS
2   FORMAT(A12)
OPEN(UNIT=5,NAME=DADOS,TYPE='OLD')
READ(5,3)AMOSTRA
3   FORMAT(A20)
WRITE(10,4)AMOSTRA
4   FORMAT(/,X,'AMOSTRA = ',A20)
READ(5,*)ICOR,D,POTV,NMUD
WRITE(10,5)ICOR,D,POTV
5   FORMAT(/,X,'CORRENTE =',E11.3,2X,' D =',E11.3,2X,
1   ' POTENCIA DE V =',E11.3,/)
201 READ(5,*,END=200,ERR=299)B(I),VH(I),VR1(I),VR2(I),T(I)
WRITE(10,6)I,B(I),VH(I),VR1(I),VR2(I),T(I)
6   FORMAT(X,13,5(X,F10.3))
VH(I)=VH(I)*POTV
VR1(I)=VR1(I)*POTV
VR2(I)=VR2(I)*POTV
I=I+1
IF(T.GT.300)STOP 'FUZA DO LIMITE DO DIM. EXECUSSAO INTERRUMPIDA.'
GO TO 201
299 TYPE 6,1,B(I),VH(I),VR1(I),VR2(I),T(I)
STOP 'ERRO NA LINHA DE DADOS ACIMA'
200 NDA0=I-1
TYPE 15
15  FORMAT('SSFLECCIONE CAMPO B :')
ACCEPT *,HSEL
TYPE 10
10  FORMAT(X,'LINHA DE DADOS EM CALCULO',/)
DO 100 I=1,NDA0
TYPE 16,I
16  FORMAT('+I,T30,I3)
IF(I.EQ.NMUD)THEN
TYPE 7
7   FORMAT('SNOVA CORRENTE ')
ACCEPT *,ICOR
WRITE(10,8)ICOR
8   FORMAT(/,X,'MUDANDO CORRENTE P/ ',E15.5)
END IF
IF(D/I).EQ.0.)THEN
NRO=NRO+1

```



```

IF(NR0.GT.100)STOP 'FORA DO DIM PARA R0. INTERROMPIDO.'
R1=VR1(I)/ICUR
R2=VR2(I)/TCUR
R1R2=((R1+R2)/(R1+R2))**2.
F=1.-R1R2*LO2/2.-R1R2**2.*(LO2**2./4.-LO2**3./12.)
R0(NR0)=2.20618**30*4*D*(R1+R2)*F
TR0(NR0)=TEMP(T(I))
GO TO 100

```

```

END IF
IF(B(I).EQ.BSEL)THEN
IF(B(I+1).EQ.(=1.*BSEL))THEN
NRH=NRH+1
IF(NRH.GT.100)STOP 'FORA DO DIM PARA RH. INTERROMPIDO.'
RH(NRH)=10.*ABS((VH(I)-VH(I+1))*D/(2.*ICUR+ABS(B(I))))
T0=(T(I)+T(I+1))/2.
TRH(NRH)=TEMP(T0)
GO TO 100

```

```

END IF
WRITE(10,17)I+1
17 FORMAT(X,'FALTA DADO DE CAMPO NEGATIVO NA LINHA ',I3)
TYPE 17,I+1
STOP 'CALCULO INTERROMPIDO.'
END IF

```

```

100 CONTINUE
WRITE(10,9)BSEL
9 FORMAT(/,T19,'CAMPO SELECIONADO B(KG)=',F6.3,/,T3,'RH(CM3/C)',
IT18,'ILN(RH)',T36,'T(K)',T49,'1000/T(K)',/)
CALL PTLOG(TRH,RH,NRH,'RH(CM3/C)',9,AMOSTRA,20,BSEL)
WRITE(10,12)
12 FORMAT(/,T3,'R0(OHM.CM)',T20,'ILN(R0)',T36,'T(K)',T49,'1000/T(K)',/)
CALL PTLOG(TR0,R0,NR0,'R0(OHM.CM)',10,AMOSTRA,20,BSEL)

```

```

DO 20 I=1,NRH
DO 20 J=1,NR0
IF(ABS(TRH(I)-TR0(J)).GT.1.0)GO TO 20
NM1=NM1+1
MI(NM1)=RH(I)/R0(J)
TMI(NM1)=(TRH(I)+TR0(J))/2.
20 CONTINUE

```

```

WRITE(10,25)
25 FORMAT(/,T3,'MI(CM2/VS)',T20,'ILN(MI)',T36,'T(K)',T49,'1000/T(K)',/)
CALL PTLOG(MI,MI,NM1,'MI(CM2/VS)',10,AMOSTRA,20,BSEL)
CLOSE(UNIT=5)
TYPE 25

```

```

23 FORMAT('NOME DO ARQUIVO DE SAIDA DO MI ')
ACCEPT 2,DADOS
IF(DADOS.EQ.1)GO TO 21
OPEN(UNIT=5,NAME=DADOS,TYPE='NEW')
WRITE(5,*)NM1
DO 30 I=1,NM1
30 WRITE(5,*)TMI(I),MT(I)
CLOSE(UNIT=5)
21 STOP 'GRAFTCO EXECUTADO'
END

```

```

*****
SUBROUTINE GRAF(INIC,IFIM,MIN,MAX,NOME,DELTA,EST)
COMMON /H1,2/NPT(2),TEMP(2,601),YMI(7,601)
DIMENSION XINC(2),ICAR(7),XPLOT(603),YPLT(603)
CHARACTER NOME*12,TIPO(7)*23
DATA COMP,XINC/1.,.3,2./
IF(INIC.EQ.1)COMP=COMP/2.
DATA ICAR/43,18,35,10,4,11,3/
TIPO(1)'!==> EXPERIMENTAL'
TIPO(2)'!==> TEORICO'
TIPO(3)'!==> FONDONS ACUSTICOS'
TIPO(4)'!==> IMPUREZAS IONIZADAS'
TIPO(5)'!==> IMPUREZAS NEUTRAS'
TIPO(6)'!==> FONDONS OTICOS'
TIPO(7)'!==> ALLOY'
YMIN=FLOAT(MIN)
YMAX=FLOAT(MAX)
YESC=(YMAX-YMIN)/COMP
DO 10 I=1,2
CALL PLOTS(10,5,13,40)
CALL SYMBOL(2,12.5,25,'MOBILIDADES',0,11)
CALL SYMBOL(5,12.5,15,'AMOSTRA ==>',0,11)
CALL SYMBOL(6,8,12.5,15,NOME,0,12)
IF(EST.NE.0)CALL SYMBOL(6,8,12,15,'DEGENERADA',0,10)
CALL SYMBOL(5,11.5,12,'DELTA U =',0,9)
CALL NUMBER(6,35,11.5,1,DELTA,0,4)
YPLT=12.
DO 20 J=INIC,IFIM
CALL SYMBOL(2,YPLT,1,CHAR(ICAR(J)),0,1)
CALL SYMBOL(2.5,YPLT,1,TIPO(J),0,24)
YPLT=YPLT+.15
CALL PLOT(.5,.5,3)
CALL RECT(0,0,COMP,8,0,2)
CALL AXIS(0,0,'1MM/T(K)',9,0,0,0,XINC(1))
YPLT=(1./YESC)
DO 30 J=MIN,MAX
YPLT=YPLT+(1./YESC)
CALL SYMBOL(-.22,YPLT,1,'10',0,2)
YPLT=YPLT+.15
CALL NUMBER(-.1,YPLT,.065,FLOAT(J),0,-1)
IF(J.EQ.MAX)GO TO 30
DO 30 K=2,10
YPLT=YPLT+(1./YESC)+LOG10(FLOAT(K))
CALL PLOT(0,YPLT,3)
XPLOT=LOG10(FLOAT(K))/20.
CALL PLOT(XPLOT,YPLT,2)
CALL PLOT(8,YPLT,3)
CALL PLOT(8,XPLOT,YPLT,2)
CONTINUE
YPLT=COMP/2,=1.0
CALL SYMBOL(-.3,YPLT,2,'MI (CM**2/V.S)',90,14)
DO J=INIC,IFIM
NP=0
NTIP=1
IF(J.GT.1)NTIP=2
DO 40 K=1,NPT(NTIP)
IF((I.EQ.2).AND.(TEMP(NTIP,K).LT.62.5))GO TO 40
NP=NP+1
XPLOT(NP)=1000./TEMP(NTIP,K)
YPLT(NP)=LOG10(YMI(J,K))

```

```

IF (YPLOT(NP).LT.YMIN) YPLOT(NP)=YMIN
IF (YPLOT(NP).GT.YMAX) YPLOT(NP)=YMAX
CONTINUE
40 YPLOT(NP+1)=M,0
XPLOT(NP+2)=XINC(1)
YPLOT(NP+1)=YMIN
YPLOT(NP+2)=YESC
IF (J.EQ.1) CALL LINE(XPLOT,YPLOT,NP,1,-1,ICAR(J))
IF (J.GT.1) CALL LINE(XPLOT,YPLOT,NP,1,50,ICAR(J))
END DO
CALL PLOT(0.,0.,999)
IF (I.EQ.1) WRITE(40,1)
1 FORMAT(1H1)
TYPE *,1***** SAII GRAFICO!
10 CONTINUE
RETURN
END
C *****
REAL NETA,NI,NI
DIMENSION COEF(50),COEF(50)
COMMON /R(2/4PT(2),TEMP(2,601),YNI(7,601)
CHARACTER P*1,HOME*10,ARQUI*14
TABLEIST /DADOS/NOME,RO,UL,EI,NI,NETA
DATA TMIN,TMAX,IFAIL/4.2,304.2,0/
TYPE 1
1 FORMAT('SARQUIVO DE PARAMETROS DA AMOSTRA 1')
ACCEPT 2,ARQUI
2 FORMAT(A14)
OPEN(UNIT=1,FILE=ARQUI,STATUS='OLD')
READ(1,DADOS)
CLOSE(UNIT=1)
NI=NETA=NI
TYPE 3
3 FORMAT('XDE O DELTA 0 1')
ACCEPT *,DELTA
TYPE 4
4 FORMAT('SARQUIVO DA MOBILIDADE EXPERIMENTAL 1')
ACCEPT 2,ARQUI
OPEN(UNIT=1,FILE=ARQUI,STATUS='OLD')
READ(1,*)NPT(1)
DO 10 I=1,NPT(1)
10 READ(1,*)TEMP(1,I),YNI(1,I)
CLOSE(UNIT=1)
TYPE 7
7 FORMAT('CONSTANTE DE DEGENERESCENCIA 1')
ACCEPT *,EST
IF (EST.NE.0.) THEN
OPEN(UNIT=1,FILE='FORM02.DAT',STATUS='OLD')
READ(1,5)NCOEF
5 FORMAT(5X,12)
IF (NCOEF.GT.50) STOP 'POLINOMIO INTERPOLADOR DE ORDEM >5.'
DO 20 I=1,NCOEF
20 READ(1,6)COEF(I)
6 FORMAT(5X,F20.10)
CLOSE(UNIT=1)
OPEN(UNIT=1,FILE='FORM03.DAT',STATUS='OLD')
READ(1,5)NCOEF
IF (NCOEF.GT.50) STOP 'POLINOMIO INTERPOLADOR DE ORDEM >5.'
DO 90 I=1,NCOEF
90 READ(1,6)COEF(I)

```

```

CLOSE(UNIT=1)
END IF
TYPE 9
8  FORMAT(X,10TENENCIA DE 1M MINIMA E MAX P/GRAFICOS)
ACCEPT *,MIN,MAX
32  TYPE 9
9  FORMAT('SOMERO DE PONTOS (MAX.601):')
ACCEPT *,NPT(2)
IF(NPT(2).GT.601)GOTO 34
TIME=(314.2+4.2)/FLOAT(NPT(2)-1)
DO 44 I=1,NPT(2)
T=4.2+(I-1)*TIME
TEMP(2,I)=T
YMI(3,1)=4.49E17481E-2+RO*(DELTA**2.)/((E1**2.)*(T**1.5))
IF(EST.EQ.0.)THEN
A=9.8E9814E15*(T**2.)/META
YMI(4,1)=2.43315166E18*T**1.5*(LOG(1+A)-A/(1+A))/PI
ELSE
TCAP=((1-TIME)-(TMAX-1))/(TMAX-TMIN)
IF((TCAP.GT.1.0).OR.(TCAP.LT.-1.0))TYPE *,
11T FORA DO ROLIN. INTERPOLADOR!
CALL F2AFF(COEF,CDEF,TCAP,A,IFAIL)
YMI(4,1)=A
END IF
YMI(5,1)=(1.358E39E29/NN)*1.E20
IF(T.GT.6.1GOTO 50
YMI(6,1)=1.E36
GOTO 60
50  A=442./T
IF(A.LT.1.)G=1.
IF(A.GE.1.)G=3.+SQRT(3.141592*A)/8.
YMI(6,1)=283.8144434*(EXP(A)-1.)*SQRT(T)*G
60  IF(EST.EQ.0.)THEN
YMI(7,1)=6.0190947E4/((DELTA**2.)*SQRT(T))
ELSE
TCAP*((1-TIME)-(TMAX-1))/(TMAX-TMIN)
IF((TCAP.GT.1.0).OR.(TCAP.LT.-1.0))TYPE *,
11T FORA DO ROLIN. INTERPOLADOR!
CALL F2AFF(COEF,CDEF,TCAP,A,IFAIL)
YMI(7,1)=A
END IF.
SONA=0.
DO 70 J=3,7
70  SONA=SONA+1./YMI(J,T)
YMI(2,1)=1./SONA
40  TYPE 13,T,(YMI(J,I),J=2,7)
13  FORMAT(X,F6.2,6(IPEP,2))
CALL GRAF(2,7,MIN,MAX,NOME,DELTA,EST)
TYPE 11
11  FORA(CISSAIA DE EXPERIMENTAL E TEORIA (S/M)? 11)
ACCEPT 12,P
12  FORMAT(A1)
IF(P.NE.'S')GOTO 80
TYPE 8
ACCEPT *,MIN,MAX
CALL GRAF(1,2,MIN,MAX,NOME,DELTA,EST)
80  STOP 'FIM DO PROGRAMA'
END

```

```

C *****
SUBROUTINE MOBIL(ITIP,EST,RO,UL,E1,N1,NETA,NN)
REAL NI,NETA,NN
COMMON NPT(2),TEMP(2,601),YMI(6,601),DELTA(601),
INCOEF,COEF(50)
DATA TMIN,TMAX,IFATL/4.2,304.2,1/
DO 10 I=1,NPT(ITIP)
T=TEMP(ITIP,I)
YMI(3,I)=4.09017481E-2*RO*(UL**2.)/(E1**2.)*(T**1.5)
IF(EST.EQ.0.)THEN
A*9.809814F13*(T**2.)/NETA
YMI(4,I)=2.43315066E18*(T**1.5)/(NI*(LOG(1+A)-A/(1+A)))
ELSE
TCAP=((T-TMIN)*(TMAX-1))/(TMAX-TMIN)
IF((TCAP.GT.1.0).OR.(TCAP.LT.=1.0))TYPE *,
1'T FORA DO POLIN. INTERPOLADOR!'
CALL ER2AEF(NCOEF,COEF,TCAP,A,IFAIL)
IF(IFAIL.NE.0)TYPE *,'ERRO NA INTERPOLACAO!'
YMI(4,I)=A
END IF
YMI(5,I)=(1.358639F29/NN)*1.E20
IF(I.LT.6.)THEN
YMI(6,I)=.95E35
ELSE
A*442./T
IF(A.LT.1.)G*1.
IF(A.GE.1.)G*3.+SQRT(3.141592*A)/8.
YMI(6,I)=283.8144434*(EXP(A)-1.)*SQRT(T)*G
END IF
IF(ITIP.NE.1)GO TO 10
YMI(6,T)=1./((1./YMI(1,I)+1./YMI(3,I)+1./YMI(4,I)
+1./YMI(5,I)+1./YMI(6,I))
IF(YMI(2,I).LE.0.)THEN
WRITE(10,1)T,YMI(2,I)
TYPE 1,T,YMI(2,I)
1 FORMAT(X,1***** MI NEGATIVO CUIDADO ***** 1,F13.8,1PE15.6)
YMI(2,I)=.95E35
END IF
DELTA(I)=SQRT(6.0140907E4/(YMI(2,I)*SQRT(T)))
10 CONTINUE
RETURN
END

```

```

C *****
SUBROUTINE EXTRE(INIC,ITIP,MIN,MAX)
COMMON NPT(2),TEMP(2,601),YMI(6,601),DELTA(601),
INCOEF,COEF(50)
I1=1
IF(ITIP.EQ.2)I1=3
DO 10 I=I1,6
DO 20 J=1,NPT(ITIP)
YL=LOG10(YMI(I,J))
IF(INIC.EQ.2)GO TO 30
INIC=2
MIN=INT(YL)
MAX=MIN
GO TO 20
30 IF(YL.LT.MIN)MIN=INT(YL)
IF((YL.LT.MIN).AND.(YL.LE.0.))MIN=INT(YL)-1
IF(YL.GT.MAX).AND.(YL.LE.0.)MAX=INT(YL)
IF(YL.GT.MAX)MAX=INT(YL)+1

```

```

20 CONTINUE
   TYPE *,'MINIMO=',MIN,' MAXIMO=',MAX
10 CONTINUE
   RETURN
   END
C *****
   REAL NETA,NI,NN
   COMMON /PT(4),TEMP(2,601),YMI(6,601),DELTU(601),
   /NCOEF,COEF(50)
   DIMENSION XINC(2),TCAR(6),XPL0T(603),YPL0T(603)
   CHARACTER NOME*12,ARQUI1*14,ARQUI2*14,TIPO(6)*23
   NAMELIST /DADOS/NUME,RO,UL,E1,NI,NETA
   DATA INIC,COMP,XINC/1,11,.30.,2./
   DATA TMIN,TMAX/4.2,304.2/
   DATA TCAR/43,42,35,10,4,11/
   TIPO(1)='=> EXPERIMENTAL'
   TIPO(2)='=> ALLOY'
   TIPO(3)='=> F0NONS ACUSTICOS'
   TIPO(4)='=> IMPUREZAS IONIZADAS'
   TIPO(5)='=> IMPUREZAS NEUTRAS'
   TIPO(6)='=> F0NONS OTICOS'
   TYPE 1
1   FORMAT('SARQUIVO DE PARAMETROS DA AMOSTRA 1')
   ACCEPT 2,ARQUI1
2   FORMAT(A14)
   OPEN(UNIT=1,FILE=ARQUI1,STATUS='OLD')
   READ(1,DADOS)
   CLOSE(UNIT=1)
   WRITE(10,DADOS)
   NN=NETA=NI
   TYPE 3
3   FORMAT('SARQUIVO DA MOBILIDADE EXPERIMENTAL 1')
   ACCEPT 2,ARQUI2
   OPEN(UNIT=1,FILE=ARQUI2,STATUS='OLD')
   READ(1,*)NBT(1)
   DO 10 I=1,NPT(1)
   READ(1,*)TEMP(1,I),YMI(1,I)
   IF(I.EQ.1)DEL=TMIN*TEMP(1,I)
10  TEMP(1,I)=TEMP(1,I)+DEL
   CLOSE(UNIT=1)
   TYPE 0
9   FORMAT('SCONSTANTE DE ESTADO 1')
   ACCEPT *,EST
   IF(EST.NE.0.)THEN
   OPEN(UNIT=1,FILE='FOR002.DAT',STATUS='OLD')
   READ(1,11)NCOEF
11  FORMAT(5X,I2)
   IF(NCOEF.GT.50)STOP 'POLINUMIO INTERPOLADOR DE URDEM >50'
   DO 00 I=1,NCOEF
60  READ(1,12)COEF(I)
12  FORMAT(5X,E20,10)
   CLOSE(UNIT=1)
   END IF
   CALL MOBILI(1,EST,RO,UL,E1,NI,NETA,NN)
   CALL EXTRE(INIC,1,MIN,MAX)
   WRITE(10,4)
4   FORMAT(X,T5,'TEMPERATURA',T19,'EXPERIMENTAL',T37,
   1'ALLOY',T50,'ACUSTICOS',T65,'IONIZADOS',T81,
   1'NEUTRAS',.97,'OTICOS',T111,'DELTA U',//)
   DO 20 I=1,NPT(1)

```

```

20 WRITE(10,5)TEMP(1,1),(YMT(J,1),J=1,6),DELTU(1)
5  FORMAT(X,F13.6,7(1PE15.5))
34 TYPE 6
6  FORMAT('NUMERO DE PUNTOS (MAXIMO DE 60) :')
ACCEPT *,NPT(2)
IF(NPT(2).GT.60)GOTO 30
TINC=(TMAX-TMIN)/FLOAT(NPT(2)-1)
DO 40 I=1,NPT(2)
40 TEMP(2,I)=4.2+(I-1)*TINC
CALL MOBILI(2,EST,RO,UL,E1,NI,NETA,NN)
CALL EXTE(JNTC,2,MIN,MAX)
DO I=1,2
CALL PLOTS(10,5,13,,40)
CALL SYMBOL(2,,12.5,.25,'MOBILIDADES',0,,11)
CALL SYMBOL(5,,12.5,.15,'AMOSTRA ==>',0,,11)
CALL SYMBOL(6,8,12.5,.15,NOME,0,,12)
IF(EST.NE.0.)CALL SYMBOL(6,8,12.5,.15,'DEGENERADA',0,,10)
YP=12.
DO I2=1,6
CALL SYMBOL(2,,YP,,1,CHAR(ICAR(I2)),0,,1)
CALL SYMBOL(2,5,YP,,1,TIPO(I2),0,,24)
YP=YP+.15
END DO
CALL PLOT(.5,.5,-3)
CALL RECT(0,,0.,COMP,8,,0.,2)
CALL AXIS(0,,0.,'1000/I(K)',=9.8,,0.,0.,XINC(1))
YESC=FLOAT(MAX=MIN)/COMP
YP=(1./YESC)
DO 100 J=1,N,MAX
YP=YP+(1./YESC)
CALL SYMBOL(=,22,YP,,1,'10',0,,2)
YP2=YP+.15
CALL NUMBER(=.1,YP2,,06,FLOAT(J),0,,=1)
IF(J.EQ,MAX)GO TO 100
DO 100 K=2,10
YP3=YP+(1./YESC)*LOG10(FLOAT(K))
CALL PLOT(0,,YP3,3)
XP=-LOG10(FLOAT(K))/20.
CALL PLOT(XP,YP3,2)
CALL PLOT(8,,YP3,3)
CALL PLOT(8,=XP,YP3,2)
100 CONTINUE
YP=COMP/2.=0.5
CALL SYMBOL(=.3,YP,,2,'MT (CM**2/J.S)',90,,14)
DO J=1,6
NP=0
NTIP=1
IF(J.GT.2)NTIP=2
DO 50 K=1,NPT(NTIP)
IF((I.EQ,2).AND.(TEMP(NTIP,K).LT.62.5))GO TO 50
NP=NP+1
XPLOT(NP)=1000./TEMP(NTIP,K)
YPLOT(NP)=LOG10(YMT(J,K))
CONTINUE
XPLOT(NP+1)=0.0
XPLOT(NP+2)=XINC(1)
YPLOT(NP+1)=FLOAT(MIN)
YPLOT(NP+2)=YESC
IF(J.LT.3)CALL LINE(XPLOT,YPLOT,NP,1,=1,ICAR(J))
IF(J.GT.2)CALL LINE(XPLOT,YPLOT,NP,1,50,ICAR(J))

```

```
8      END DO  
      CALL PLOT(0.,0.,999)  
      IF(I.EQ.1)WRITE(40,8)  
      FORMAT(1H1)  
      END DO  
      STOP 'FIM DO PROGRAMA'  
      END
```


REFERÊNCIAS

- 1) P. BLOOD and J.W. ORTON; Rep. Prog. Phys., vol.41 (1978).
- 2) E.H. HALL; Amer. J. Math., 2, 287 (1879).
- 3) M. D'OLNE CAMPOS; "Efeito Hall e Condutividade Elétrica".
- 4) J.S. BLAKEMORE; Semiconductor Statistics, Pergamon Press, New York, pg. 117 (1962).
- 5) P. KIREEV; La Physique des Semiconductors, Mir Moscou, Cap. IV (1975).
- 6) M.M.G. DE CARVALHO; Tese de Doutorado, Academic de Montpellier (1982).
- 7) K. MASU, E. TOKUMITSU, M. KONAGAI and K. TAKAHASHI; J. Appl. Phys. 54(10), 5785 (1983).
- 8) M. F. CEOLIN; "Estudo da Mobilidade Eletrônica nos Compostos In Ga As P", Tese de Mestrado, UNICAMP (1983).
- 9) V.I. FISTUL'; Heavily Doped Semiconductors, Plenum Press, pg. 369 (1969).
- 10) K. SEEGER; Semiconductor Physics, Springer-Verlag, Caps. 3 e 6 (1973).
- 11) E. FERMI; Nuclear Physics, Univ. Press, Chicago, pg. 142 (1950).
- 12) E.M. CONWELL and V.F. WEISSKOPF; Phys. Rev. 77, 388 (1950)
- 13) H. BROOKS; Phys. Rev. 83, 879 (1951).
- 14) R.B. DINGLE; Phil. Mag (7) 46, 831 (1955).
- 15) R. MANSFIELD; Proc. Phys. Soc. (London), B69, 76 (1956).
- 16) A.C. BEER; Solid State Phys. - Supl. 4, Academic Press (1963).

- 17) J.P. McKELEY; Física del Estado Sólido y de Semiconductores, Editorial Limusa, Cap. 9 (1976).
- 18) J. BARDEEN and W. SHOCKLEY; Phys. Rev. 80, 72 (1950).
- 19) J.D. WILEY; Semiconductors and Semimetals, vol.10, pg. 127 (1975).
- 20) H. FRÖLICH and N.F. MOTT; Proc. Roy. Soc. (London) A171, 496 (1939).
- 21) H. EHRENREICH; J. Phys. Chem. Solids 2, 131 (1954).
- 22) J.W. HARRISON and J.R. HAUSER; J. Appl. Phys. 47(1), 292 (1976).
- 23) D.J. HOWARTH and E.H. SONDHEIMER; Proc. Roy. Soc. (London) A219, 53 (1953).
- 24) R.A. SMITH; Semiconductors, Cambridge University Press, pg. 251 (1978).
- 25) R.L. PETRITZ and W.W. SCANLON; Phys. Rev. vol. 97, 1620 (1955).
- 26) P.A. FLINN; Phys. Rev. 104(3), 350 (1956).
- 27) L. NORDHEIM; Ann. Phys. (Leipzig) 9, 607 (1931).
- 28) N.F. MOTT; Proc. Cambridge Philos. Soc. 32, 281 (1936).
- 29) M.A. LITTLEJOHN, J.R. HAUSER and T.H. GLISSON; Solid State Elect. 21, 107 (1978).
- 30) L.J. VAN DER PAUW; Philips Res. Repts. 13, 1 (1958).
- 31) M.F. CEOLIN; obra cit, pgs. 38 - 41 (1983).
- 32) R.J. NICHOLAS, J.C. PORTAL, C. COULBERT, P. FERRIER and P. PEARSALL; Appl. Phys. Lett. 34(8), 492 (1978).
- 33) E.H. PEREA, E. MENDEZ and C.G. FONSTAD; J. Elect. Mat. 9, 123 (1976).

- 34) R.E. NAHORY, M.A. POLLACK, W.D. JOHNSTON and R.L. BARNES;
Appl. Phys. Lett. 33, 659 (1978).
- 35) M.A. LITTLEJOHN, J.R. HAUSER and T.H. GLISSON; Appl. Phys.
Lett. 30 (5), 242 (1977).
- 36) D.L. RODE; Phys. Rev. B, 2, 1012 (1970).
- 37) A.R. ADAMS, H.L. TATHAM, J.R. HAYES, A.N. EL - SABBAHY and
P.D. GREENE; Elect. Lett. 16 (14), 560 (1980).
- 38) C. CHARREAUX, G. GUILLOT, A. NOUAILHAT, D. HUET, M. LAMBERT;
Physica 129 B, 413 (1985).
- 39) S.M. SZE; " Physics of Semiconductor Devices ", John Wiley
& Sons, pg. 21 (1969).
- 40) Y. TAKEDA and A. SASAKI; Japan. Journal of Appl. Phys.
24(10), 1307 (1985).
- 41) P.D. GREENE, S.A. WHEELER, A.R. ADAMS, A.N. EL - SABBAHY
and C.N. AHMAD; Appl. Phys. Lett. 35(1), 78 (1979).
- 42) R.R. LEHENY, A.A. BALLMAN, J.C. DeWINTER, R.E. NAHORY and
M.A. POLLACK; J. of Elect. Mat. 9(3), 561 (1980).
- 43) P.K. BHATTACHARYA, J.W. KU, S.J.T. OWEN, G.H. OLSEN and
S.H. CHIAO; I.E.E.E. J. Quantum Elect. QE 17(2), 150
(1981).
- 44) A. CHANDRA, C.E.C. WOOD, D.W. WOODARD and L.F. EASTMAN;
Solid State Elect. 22, 645 (1979).
- 45) M.F. CEOLIN; Comunicação Pessoal.
- 46) J.R. HAYES, A.R. ADAMS and P.D. GREENE; Elect. Lett.
16(8), 282 (1980).
- 47) J.W. HARRISON, J.R. HAUSER; Phys. Rev. B 13 (12), 5347
(1976).
- 48) J.C. PHILLIPS; Rev. Mod. Phys. 42, 317 (1970).