

**ESTUDO DA INFLUÊNCIA DOS MECANISMOS DE ESPALHAMENTO NO
TRANSPORTE SEMICLÁSSICO EM MATERIAIS SEMICONDUTORES
ATRAVÉS DO MÉTODO DE MONTE CARLO**

LUIZ GILBERTO DE OLIVEIRA MESSIAS

Tese apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Doutor em Ciências "Física Aplicada"

Orientador: Prof. Dr. Euclides Marega Júnior

u
USP/IFSC/SBI



8-2-001405

São Carlos - São Paulo
2001

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA
INFORMAÇÃO

Messias, Luiz Gilberto de Oliveira

Estudo da Influência dos Mecanismos de Espalhamento no Transporte Semiclássico em Materiais Semicondutores através do Método de Monte Carlo/ Luiz Gilberto de Oliveira Messias
São Carlos, 2001. 162 p.

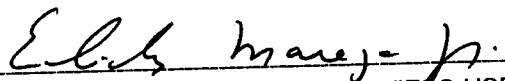
Tese (Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos, 2001.

Orientador: Prof. Dr. Euclides Marega Junior

1. Semicondutores. 2. Transporte. 3. Monte Carlo

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE LUIZ GILBERTO DE OLIVEIRA MESSIAS APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 19 DE ABRIL DE 2001.

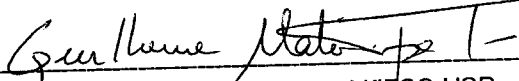
COMISSÃO JULGADORA:



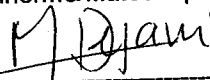
Prof. Dr. Euclides Marega Júnior/IFSC-USP



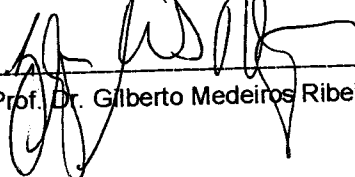
Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Júnior/IFSC-USP



Prof. Dr. Guilherme Matos Sipahi/IFSC-USP



Prof. Dr. Marcos Henrique Degani/USF



Prof. Dr. Gilberto Medeiros Ribeiro/LNLS

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Euclides Marega Junior pela orientação neste trabalho.

À minha mãe Teresa e meu pai Salem, pela força e apoio que ambos me proporcionaram todos estes anos.

Ao meu irmão Carlos, por tudo que passamos juntos.

Aos meus amigos pela ajuda e companheirismo.

Aos técnicos da USP, em especial ao Carlos e Haroldo pelo auxílio técnico e computacional.

À Wladerez pelo apoio durante minha passagem pelo programa de pós-graduação.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Sumário

Resumo	vi
Abstract	vii
Lista de Figuras	viii
Lista de Tabelas	xiii
Lista de Abreviações	xiv
1 Introdução	1
2 Transporte Semi-Clássico em Materiais Semicondutores	7
2.1 A Equação de Boltzmann	8
2.2 Mecanismos de Espalhamento	11
2.2.1 Introdução	11
2.2.2 Regra de ouro de Fermi	13
2.2.3 Integrais de "Overlap"	14
2.2.4 Interação elétron-fônon	15
2.2.5 Espalhamento por Defeitos	26
2.2.6 Taxas de Espalhamento para Buracos	31
2.2.7 Ionização por Impacto	36
2.2.8 Taxa de Espalhamento Total	38
2.2.9 Espalhamento por Rugosidade da Interface	39
2.3 Escolha do Estado Final do Portador	39
2.3.1 Espalhamento Isotrópico	40
2.3.2 Espalhamento anisotrópico	41
2.3.3 Escolha do estado final (elétrons)	43
2.3.4 Escolha do estado final (buracos)	45
3 O Método de Monte Carlo	47
3.1 Método Ensemble Monte Carlo (EMC)	48
3.2 Transporte Eletrônico em GaAs	60

3.2.1	Descrição do Modelo	61
3.2.2	Resultados	61
3.2.3	Inclusão da Blindagem no método EMC	70
3.3	Transporte de Buracos para GaAs	70
3.3.1	Descrição do Modelo para Buracos	72
4	Transporte de Portadores em Semicondutores de Pequeno Gap - o caso do GaSb	76
4.1	Transporte de elétrons em GaSb	76
4.1.1	Descrição do Modelo	78
4.1.2	Resultados	80
4.2	Transporte de buracos em GaSb	92
4.2.1	Descrição do Modelo	93
4.2.2	Resultados	94
4.3	Conclusões	98
4.3.1	Conclusões para o transporte no GaSb tipo-n	98
4.3.2	Conclusões para o transporte no GaSb tipo p	99
5	Elétrons quentes em CdTe e Cd_{1-x}Mn_xTe	100
5.1	Introdução	100
5.2	Descrição do Modelo	101
5.3	Resultados	102
5.4	Conclusões	118
6	Transporte Eletrônico em Altos Campos - o efeito do mecanismo de espalhamento de ionização por impacto no Si_{1-x}Ge_x	119
6.1	Introdução	119
6.2	Modelo	120
6.3	Resultados	122
6.4	Conclusões	130
7	Mecanismos de Espalhamento em Sistemas Bi-dimensionais - Super-Redes de GaAs/Al_xGa_{1-x}As	132
7.1	Introdução	132
7.2	Descrição do Modelo	134
7.3	Resultados	137
7.4	Conclusões	145
8	Conclusões e Trabalhos Futuros	146
8.1	Comparação entre as atuações dos mecanismos	146
8.2	Contribuições originais do trabalho	150
8.3	Propostas para trabalhos futuros	152
	Referências Bibliográficas	154
A	Avaliação Analítica de Integrais	160

B	Geração de Números Randômicos para uma Distribuição	163
B.1	Técnica de Rejeição	163
B.2	Técnica Combinada	164

Resumo

Neste trabalho estudamos a influência dos mecanismos de espalhamento no transporte semi-clássico de portadores em materiais semicondutores. Para tanto, foi desenvolvida uma rotina computacional baseada no método de Monte Carlo, sendo esta aplicada aos seguintes materiais: 1) Antimoneto de Gálio (GaSb); 2) Telureto de Cádmio e Telureto de Cádmio Manganês (CdTe e $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$); 3) Liga de Silício Germânio ($\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$); 4) Super-rede de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Os estudos realizados foram baseados na influência dos mecanismos de espalhamento nos seguintes parâmetros: i) velocidade de deriva; ii) população dos portadores iii) energia média; iv) função distribuição; v) mobilidade; vi) difusão.

No GaSb, o estudo foi realizado para o transporte de elétrons e buracos, dando ênfase na atuação do mecanismo de espalhamento por impurezas e o efeito de compensação. No estudo do transporte eletrônico no CdTe, foi realizada uma análise da influência da concentração de Manganês no composto $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. Os efeitos dos mecanismos de ionização por impacto (que atua em altos campos) e espalhamento por liga foram estudados no sistema $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. No estudo realizado na super-rede de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, o método de Monte Carlo foi adaptado ao sistema bi-dimensional, onde foi estudada a influência do mecanismo de espalhamento causado pela rugosidade da interface, na coerência das oscilações do elétron na mini-banda (Oscilações de Bloch).

O método computacional desenvolvido mostrou-se bem versátil nos estudos propostos. Os modelos adotados em cada estudo, descrevem bem os resultados experimentais disponíveis na literatura.

Abstract

In this work we have studied the influence of scattering mechanisms in semiclassical transport in semiconductor materials. So, it was developed a computational routine based on Monte Carlo method, applied to the following materials: 1) Gallium Antimonide (GaSb); 2) Cadmium Telluride and Cadmium Manganese Telluride (CdTe , $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$); 3) Silicon Germanium Alloy ($\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$); 4) Superlattice of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs. Our work have been done based in the influence of the scattering mechanisms on the transport properties, such as: i) drift velocity; ii) carrier population; iii) mean energy; iv) distribution function; v) mobility; vi) diffusion.

In GaSb, we studied the transport for both electron and hole, where we investigate the role of scattering mechanism of ionized impurity and the inclusion of carrier compensation. In the study of the electronic transport in CdTe, we analyzed the effect of Manganese concentration in the transport properties of $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. The effects of the impact ionization and alloy mechanisms were studied in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. For the $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs superlattice, the Monte Carlo method has been adapted for the bidimensional system, where we have studied the influence of the interface roughness scattering in the electron motion (Bloch Oscillations).

The computational method shown good versatility for the proposed problems and our models described very well the experimental results available in the literature.

Lista de Figuras

1.1	Esquema proposto para o desenvolvimento de dispositivos semicondutores. . .	3
2.1	Mecanismos de Espalhamento.	12
2.2	Relações de dispersão do fônon num material semicondutor.	16
2.3	Taxa de espalhamento para o processo de fônons acústicos no vale Γ do GaAs. . .	19
2.4	Taxa de espalhamento para o processo piezoelétrico no vale Γ do GaAs. . .	21
2.5	Taxa de espalhamento para o mecanismo polar óptico para o elétron no GaAs a $T = 77K$ e $T = 300K$	23
2.6	Taxa de espalhamento pelo mecanismo intervale (ΓL) no GaAs para $T = 77K$ e $T = 300K$	25
2.7	Taxa de espalhamento para o mecanismo intervale (ΓX) no GaAs para $T = 77K$ e $T = 300K$	26
2.8	Taxa de espalhamento resultante do mecanismo de impurezas ionizadas no vale Γ do GaAs para $T = 77K$ e $T = 300K$	29
2.9	Taxa de espalhamento do mecanismo de ionização por impacto para três valores de C_{ii} no GaAs. As taxas foram calculadas usando o modelo de Keldish.	37
2.10	Taxa de espalhamento total para o GaAs sem a inclusão do mecanismo de ionização por impacto.	38
2.11	Relação entre as coordenadas fixas (k_x^L, k_y^L, k_z^L) e as novas coordenadas (k_x^r, k_y^r, k_z^r).	41
3.1	Fluxograma do método de Ensemble de Monte Carlo.	49
3.2	Fluxograma da sub-rotina responsável pelo cálculo da taxa de espalhamento.	50
3.3	Fluxograma da subrotina responsável pela geração das condições iniciais do sistema.	52
3.4	Fluxograma da sub-rotina emc.	54
3.5	Fluxograma da sub-rotina responsável pelo cálculo das componentes do vetor de onda e do vetor posição.	56
3.6	Fluxograma representando a escolha de qual mecanismo de espalhamento foi responsável pelo final do movimento livre do elétron.	58

3.7	Velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico para o GaAs com uma concentração de impurezas de 10^{14} cm^{-3} . O resultado obtido com o método desenvolvido é comparado com o resultado teórico de Pozela e Reklaitis[36] e com o resultado experimental de Houston e Evans[38] a $T = 300\text{K}$	62
3.8	A velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico para uma concentração de 10^{14} cm^{-3} . Comparamos o efeito do número total de partículas no resultado final.	63
3.9	Ocupação do elétron nos Vales Γ , L e X em função do campo elétrico para o GaAs a 300 K. A concentração de impurezas é 10^{14} cm^{-3}	65
3.10	Velocidade de deriva em função do o campo elétrico para o GaAs. É mostrada a contribuição da cada um dos Vales para a velocidade.	66
3.11	Energia média do elétron em função do campo elétrico no GaAs a 300 K. A concentração de impurezas é 10^{14} cm^{-3}	67
3.12	Velocidade do elétron em função do tempo para o GaAs. A concentração de impurezas é 10^{14} cm^{-3}	68
3.13	Energia média do elétron em função do tempo para o GaAs. A concentração de impurezas é 10^{14} cm^{-3} . Estudo em função do campo.	69
3.14	Comparação entre os resultados de Pantoja[43] e os nossos resultados para validar o modelo de blindagem. Concentração usada de $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	71
3.15	Velocidade de Deriva para buracos em função do campo elétrico aplicado no GaAs. Para uma concentração de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	73
3.16	População dos vales de buracos leve e pesado em função do campo elétrico aplicado.	74
4.1	Velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico para o GaSb. Comparação entre o cálculo teórico obtido através do método de Monte Carlo e resultado experimental, realizado à temperatura ambiente com $N_i = 6.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	80
4.2	Velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico para diversas temperaturas usando o modelo BH no GaSb. A concentração de impurezas é $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, não sendo incluído o efeito de compensação neste cálculo.	81
4.3	População para elétrons nos vales Γ , L e X em função do campo elétrico para duas temperaturas. O modelo utilizado no espalhamento por impurezas foi o BH e a concentração de impurezas é $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (não foi incluído compensação neste cálculo).	83
4.4	Energia média calculada através do método de Monte Carlo para diferentes temperaturas. O modelo de impurezas utilizado foi o BH. (Não considerando o efeito de compensação). A concentração de impurezas é 10^{16} cm^{-3}	84
4.5	A velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico no GaSb para várias concentrações de impurezas e sem compensação. O modelo de impurezas utilizado foi o de BH.	85
4.6	Mobilidade em função da temperatura para várias concentrações de aceitadores e para concentração de impurezas de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ usando o modelo BH.	86

4.7	Campanação entre os modelos Brooks-Herring e Cowell-Weiskopft para o cálculo da mobilidade em função da temperatura. A concentração de impurezas é de $N_i = 6.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. (não foi utilizado compensação neste cálculo) . . .	87
4.8	Mobilidade em função da temperatura para vários graus de compensação ($kc=N_a/N_d$) usando o modelo de CW. A concentração de impurezas foi de $N_i = 6.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	89
4.9	Mobilidade em função da temperatura para vários graus de compensação ($kc=N_a/N_d$) usando o modelo BH. A concentração de impurezas foi de $N_i = 6.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	90
4.10	Mobilidade em função da temperatura para o GaSb no caso em que o mecanismo de piezoelétrico é ou não considerado. Esta análise foi realizada com ambos os modelos Brooks-Herring (BH) e Cowell-Weisskopft (CW) para uma concentração de $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	91
4.11	Mobilidade de buracos em função da temperatura. Compara-se o resultado experimental[67] com o obtido pelo método de EMC.	95
4.12	Velocidade de deriva do buraco em função do campo elétrico para duas temperaturas, e para uma concentração de $2.73 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	96
4.13	População de buracos calculada para o GaSb a $T = 300 \text{ K}$ e $T = 77 \text{ K}$. A concentração de impurezas é $2.73 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	97
5.1	Velocidade do elétron em função do campo elétrico. Comparação entre o resultado do modelo proposto com o resultado experimental de Canali[80] e o resultado teórico de Borsari-Jacoboni[79].	104
5.2	População de elétrons em função do campo elétrico à temperatura ambiente. Sem a inclusão de compensação e para uma concentração de impurezas de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	105
5.3	Velocidade do elétron como função do campo elétrico aplicado para temperaturas de $T = 77 \text{ K}$, $T = 300 \text{ K}$ e $T = 400 \text{ K}$	106
5.4	Velocidade de deriva em função do campo elétrico aplicado. Comparação entre a velocidade de deriva para a situação em que o vale X é incluído na simulação e para o caso em que desconsidera-se o vale X.	108
5.5	Comparação entre a velocidade de deriva do elétron para o $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ para sete valores de concentração de Manganês.	109
5.6	Energia média do elétron em função do campo elétrico aplicado, para várias concentrações de Manganês. O cálculo foi feito a temperatura ambiente e para uma concentração de impurezas de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	111
5.7	Comparação para a população dos elétrons em função do campo elétrico para duas concentrações de Manganês.	112
5.8	Mobilidade em função da concentração de Manganês.	113
5.9	Velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico aplicado para várias temperaturas para o $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$	114
5.10	Energia média do elétron em função do campo elétrico aplicado para quatro temperaturas.	115

5.11	Velocidade de deriva em função do campo elétrico para uma concentração de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ a temperatura ambiente. Comparação entre três diferentes métodos de aumento da massa efetiva do vale L.	116
5.12	Velocidade de deriva em função do campo elétrico para uma concentração de $N_i = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ a temperatura ambiente. Comparação entre diversos valores do potencial de liga.	117
6.1	Estrutura da banda de condução do Si. São ilustrados os mecanismos de espalhamento f e g.	121
6.2	Velocidade de deriva em função do campo elétrico, calculado à temperatura ambiente para várias concentrações de germânio.	123
6.3	Velocidade de deriva em função do campo elétrico para o Si. Resultados comparando a inclusão do mecanismo de ionização por impacto.	124
6.4	Velocidade de deriva em função do campo elétrico. Compara-se o efeito do espalhamento por liga.	125
6.5	Energia média do elétron em função do campo elétrico para o $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$	126
6.6	A difusão em função do campos elétrico para quatro diferentes concentrações de germânio à temperatura ambiente	127
6.7	Coefficiente da ionização por impacto do elétron no $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ como função do inverso do campo elétrico aplicado, para várias concentrações de germânio.	128
6.8	Função distribuição em função da energia para diferentes valores de campos elétrico em unidades arbitrárias para $\text{Si}_{0.95}\text{Ge}_{0.05}$	129
7.1	Velocidade do elétron em função do tempo para uma super-rede de GaAs / $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Campo elétrico aplicado de 10 kV/cm.	139
7.2	Velocidade de Deriva do elétron em função do campo elétrico, comparando como o espalhamento por rugosidade afeta as propriedades do estado estacionário. Os resultados foram obtidos com $N_i = 0$, $L = 30 \text{ nm}$	140
7.3	Energia média longitudinal em função do campo elétrico. Compara-se como o ER afeta as propriedades do regime estacionário. Os resultados foram obtidos à $T = 77\text{K}$ $N_i = 0$ e $L = 30 \text{ \AA}$	141
7.4	Velocidade do elétron em função do tempo. Neste gráfico é comparado a proposta feita pela equação (7.8). Parâmetros utilizados $\Delta_{ER} = 0.9 \text{ nm}$, $E = 10\text{kV/cm}$, $L = 30 \text{ \AA}$	142
7.5	Mobilidade em função raiz quadrática média da altura da rugosidade.	143
7.6	Velocidade de Deriva do elétron em função do campo elétrico. Comparação para a influência do efeito da degenerescência, $N_i = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	144
8.1	Comparação entre a atuação dos mecanismos de espalhamento à temperatura ambiente.	147
8.2	Velocidade de Deriva em função do campo elétrico para o n-GaSb. Resultado retirado do trabalho de Damayanthi e colaboradores [59].	150
8.3	Condutividade em função da temperatura para o n-GaSb. Retirado do trabalho de Kourkoutas [98].	151

- B.1 Interpretação geométrica da técnica de rejeição para uma distribuição $g(x)$ em um intervalo (a,b) . Os números randômicos estão distribuídos entre 0 e 1. 165
- B.2 Interpretação geométrica da técnica combinada para uma distribuição $g(x)$ em um intervalo (a,b) . Os números randômicos estão distribuídos entre 0 e 1. 166

Lista de Tabelas

2.1	Limites de integração para o espalhamento de fônons acústicos.	18
3.1	Parâmetros utilizados na simulação de transporte de elétrons no GaAs.	64
3.2	Parâmetros usados na simulação do transporte de buracos no GaAs.	73
4.1	Parâmetros usados na simulação do transporte de elétrons no GaSb.	79
4.2	Parâmetros usados na simulação para o transporte de buracos no GaSb.	94
5.1	Parâmetros usados na simulação do transporte eletrônico no CdTe.	103
6.1	Parâmetros usados na simulação para transporte de elétrons no SiGe.	122
6.2	Parâmetros usados na simulação para transporte de elétrons no SiGe.	122

Lista de Abreviações

- a - Largura do poço numa super-rede.
- a_0 - Raio de Bohr.
- a_q - Operador de destruição.
- a_q^\dagger - Operador de criação.
- $Al_xGa_{1-x}As$ - Arseneto de Gálio Alumínio (x - concentração de alumínio).
- b - Largura da barreira numa super-rede.
- B** - Campo Magnético.
- BH - Modelo de Brooks-Herring para o espalhamento por impurezas ionizadas.
- BL - Buracos leves.
- BP - Buracos pesados.
- Bulk - Material volumétrico.
- $Cd_{1-x}Mn_xTe$ - Telureto de Cádmio Manganês (x - concentração de Manganês).
- CdTe - Telureto de Cádmio.
- CDN - Condutividade diferencial negativa.
- C_{ii} - Constante usada no modelo de Keldish para o espalhamento de ionização por impacto.
- CW - Modelo de Conwell e Weisskopf para o espalhamento por impurezas ionizadas.
- d - Período de uma super-rede.
- D_b - Difusão para buracos.
- D_e - Difusão para elétrons.
- $D_{es}(E_k), D_{es}(k)$ - Densidade de estados.
- D_l - Coeficiente de difusão longitudinal.
- dt - Passo temporal.
- E_0 - Valor do "gap" a $T = 0$.
- E_k - Auto-valor da energia.

- EMC - Ensemble Monte Carlo.
- E_{ns} - Energia da n-ésima subbanda.
- ER - Espalhamento devido à rugosidade numa interface.
- F - Campo elétrico.
- f_d - Função distribuição.
- G - Vetor da rede recíproca.
- GaAs - Arseneto de Gálio.
- Gap, E_g - Diferença de energia entre o topo da banda de condução e o fundo da banda de valência para um material semiconductor.
- H - Hamiltoniano total.
- H_0 - Hamiltoniano não perturbado.
- H_1 - Hamiltoniano perturbado.
- II - Ionização por impacto.
- J_b - Densidade de corrente para buracos.
- J_n - Densidade de corrente para elétrons.
- k - Vetor de onda.
- k_b - Constante de Boltzmann.
- k_f - Vetor de onda final.
- k_i - Vetor de onda inicial.
- k_x - Componente x do vetor de onda na direção x.
- k_y - Componente y do vetor de onda na direção y.
- k_z - Componente z do vetor de onda na direção z.
- L - Largura da rugosidade no espalhamento por rugosidade.
- m_0 - Massa do elétron livre.
- m^* - Massa efetiva de um portador num semiconductor.
- m_d^* - Massa efetiva da densidade de estados.
- m_t^* - Massa efetiva transversal.
- m_l^* - Massa efetiva longitudinal.
- MC - Método de Monte Carlo.
- MOSFET - Transistor de efeito de campo baseado numa junção metal-óxido-semiconductor.
- n_q, n_{ac}, n_{op} - Número de ocupação de fônons.
- N_i - Concentração de impurezas ionizadas.
- N_{II} - Concentração de impurezas neutras.
- n_e - Densidade de portadores para elétrons.

- p_b - Densidade de portadores para buracos.
 p_i - Operador momento.
 \mathbf{P} - Vetor polarização.
 $P(\tau)$ - Probabilidade por unidade de tempo.
 \mathbf{q} - vetor de onda do fônon.
 r_1, r_2 - Números randômicos.
 \mathbf{r} - Vetor posição.
 \mathbf{R} - Taxa de geração e recombinação.
 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ - Liga Germânio Silício (concentração de Germânio).
 SMD - Semicondutor magnético diluído.
 t - Tempo.
 T_e - Temperatura do elétron.
 T_s - Tempo total da simulação.
 $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ - Vetor deslocamento.
 U_0 - Potencial de liga.
 $U_e(r_i)$ - Potencial cristalino.
 V - Volume do semicondutor.
 V_o - Potencial da barreira numa super-rede.
 \mathbf{v}_b - Velocidade de deriva para buraco.
 \mathbf{v}_e - Velocidade de deriva para elétron.
 v_s - Velocidade do som.
 $W(\mathbf{k})$ - Taxa de espalhamento.
 Warp - Modelo para a banda de valência usualmente adotado para buracos.
 X - Vale satélite de um material semicondutor.
 Z_j - Número de vales finais disponíveis.
 2D - Sistema bidimensional.
 3D - Sistema tridimensional.
 α_j, α - Fatores de não parabolicidade.
 α_{vs}, β_{vs} - Parâmetros empíricos do modelo de Varshini.
 ϵ_0 - Permittividade no vácuo.
 ϵ_k - Energia do portador.
 κ - Permittividade do material.
 μ_b - Mobilidade para buracos.
 μ_{calc} - Mobilidade calculada por métodos teóricos.
 μ_e - Mobilidade para elétrons.

μ_{exp} - Mobilidade para experimental de portadores.

λ_0 - Taxa do auto-espalhamento.

λ_d - Comprimento de Debye.

$\lambda_T(\varepsilon)$ - Taxa de espalhamento total.

ρ - Densidade do material.

$\tau_{E_k(E_k)}$ - Tempo de relaxação da energia.

$\tau_p(E_k)$ - Tempo de relaxação do momento.

τ - Tempo de movimento livre.

ω_B - Frequência de ressonância ciclotron.

ϕ - Ângulo azimutal.

θ - Ângulo entre \mathbf{k} e \mathbf{k}' .

Δ_{ER} - Raiz quadrática média da altura da rugosidade na interface para o modelo

ER.

Δ_j - Diferença de energia entre o vale Γ e o j -ésimo vale.

$\Delta\varepsilon_{ij}$ - Diferença de energia entre dois vales.

Δ_n - Largura da n -ésima subbanda.

$\Xi_{ac,po,npo}$ - Potencial deformação acústico, óptico, intervala.

$\Psi(\mathbf{r},t)$ - Função de onda escrita como uma combinação linear da função de onda não perturbada.

$\Psi_k^0(\mathbf{r},t)$ - Função de onda não perturbada.

$\Psi_k(\mathbf{r})$ - Função de onda usada no modelo de Sommerfeld.

Λ - O maior valor de $\lambda_T(\varepsilon)$.

Γ - Vale gama.

$\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ - Energia do fônon.

Capítulo 1

Introdução

O estudo do transporte de carga em materiais semicondutores é de fundamental importância, tanto do ponto de vista da física básica, quanto de suas aplicações em dispositivos eletrônicos. Em física básica, a análise dos fenômenos de transporte ajudam na compreensão das interações elementares no cristal, estrutura de bandas, coeficiente de ionização, etc. No aspecto aplicado, os problemas tem um grau de importância maior, já que a microeletrônica exerce um papel fundamental na vida moderna. A sofisticação dos dispositivos atuais, torna a compreensão dos mecanismos fundamentais do transporte de carga essencial para o seu contínuo desenvolvimento.

Projeções da indústria de Semicondutores mostram que a atual tecnologia empregada na confecção de dispositivos baseados na tecnologia MOSFET (Transistor de Efeito de Campo baseado na junção Metal-Óxido-Semicondutor) terá dimensões de "gate" da ordem de aproximadamente $0.07 \mu\text{m}$ até o ano de 2007. Apesar da indústria não ter ainda atingido este limite, a pesquisa tem direcionado seus esforços no entendimento de mecanismos físicos que surgem nestas escalas de tamanho e condições de operação. Podemos citar como exemplo:

- Efeito de portadores quentes("hot carriers"), que surgem sob certas condições de campo.

- Efeitos de quantização de tamanho.
- Flutuações atômicas na distribuição de impurezas.
- Efeitos de Tunelamento.

Neste contexto, a ciência dos materiais aplicada ao estudo de materiais optoeletrônicos tem um papel fundamental na compreensão dos mecanismos presentes nos processos de transporte de portadores de carga.

Para exemplificar como as pesquisas se desenvolvem nesta área, recorreremos ao esquema proposto na figura 1.1, na qual representamos as várias etapas dos processos de desenvolvimento de um dispositivo semicondutor. Como se pode observar através deste esquema, para que um dispositivo seja desenvolvido, há a necessidade de se ter um conhecimento prévio das propriedades fundamentais do material que será empregado. O desenvolvimento e a sofisticação das técnicas de caracterização óptica, estrutural e elétrica, permitem a determinação de inúmeras grandezas relacionadas às características intrínsecas e extrínsecas dos materiais, com uma acurácia muito boa. De mão destas propriedades é possível fazer uma re-engenharia do material em estudo. Em geral os processos de desenvolvimento e obtenção de materiais eletrônicos são custosos, e a determinação prévia de suas propriedades é um indicativo muito importante neste processo. A simulação computacional, do comportamento de suas propriedades básicas, reduz em muito os custos de desenvolvimento, porque re-direciona a metodologia para a obtenção dos parâmetros desejados do material, relacionando-os com as características dos dispositivos a serem obtidos.

O transporte de cargas em materiais semicondutores é em geral um problema bastante complexo, tanto do ponto de vista matemático, quanto dos aspectos físicos envolvidos. A solução da equação de Boltzmann, que descreve o problema, não oferece nenhuma solução analítica, exceto em algumas situações, que em geral não se aplicam a problemas reais. Além disto, os parâmetros de transporte são derivados de processos físicos que envolvem muitas médias, e "a priori" não se conhece a importância relativa destes processos, o que acaba tornando o estudo ainda mais difícil. Quando se passa do regime linear, para o regime não-linear, as dificuldades tornam-se ainda maiores, sendo que as soluções analíticas da equação de Boltzmann são um problema matemático insolúvel. Para que se obtenha alguma solução, é necessário que se introduza uma série de aproximações, que acabam tornando o problema

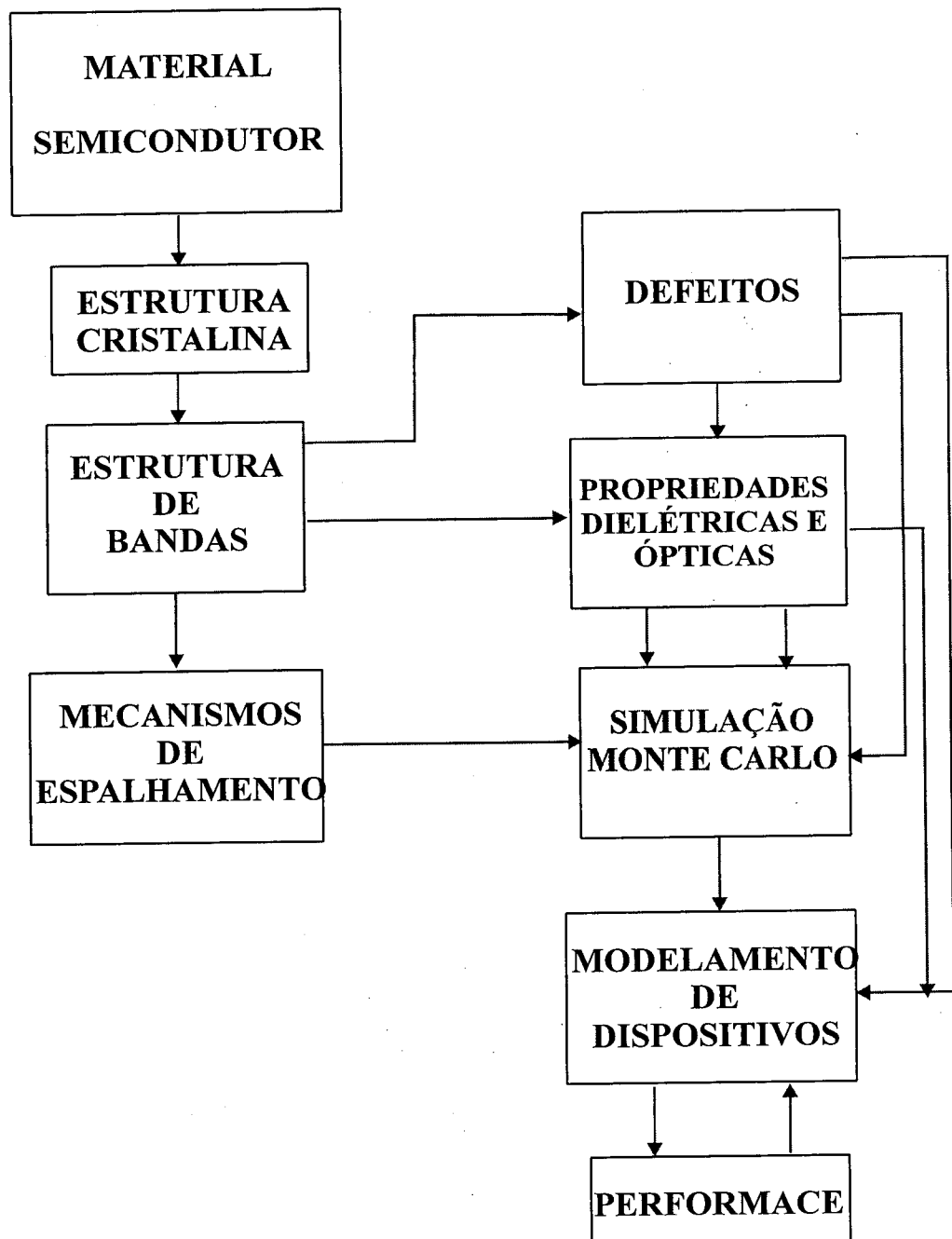


Figura 1.1: Esquema proposto para o desenvolvimento de dispositivos semicondutores.

distante do sistema real. Para solucionar este problema, dois métodos foram propostos na conferência de Semicondutores de Kyoto no ano de 1966. O primeiro é o método de Monte Carlo[1] e o segundo é a técnica iterativa [2]. O método de Monte Carlo é distante a técnica mais utilizada no estudo do transporte de portadores em materiais semicondutores.

O método de Monte Carlo, aplicado ao transporte de carga em materiais semicondutores, consiste na simulação do movimento de um ou mais portadores de cargas num cristal, sujeitos a ação de forças externas, devido a campos elétricos e magnéticos, e a mecanismos de espalhamento. A duração do movimento livre do portador (intervalo de tempo entre duas colisões sucessivas) e os eventos de espalhamento envolvidos na simulação são selecionados estocasticamente de acordo com certas probabilidades que descrevem os processos microscópicos.

O conhecimento dos mecanismos de espalhamento é essencial no desenvolvimento do Método de Monte Carlo, já que estes controlam a natureza do transporte de portadores. Os mecanismos de espalhamento mais importantes são:

- Fônons acústicos.
- Fônons ópticos (polar).
- Fônons intervale (Equivalente e não equivalente).
- Piezoelétrico.
- Impurezas ionizadas.
- Liga.
- Defeitos
- Interação portador-portador.

Os primeiros quatro tipos são inerentes ao próprio material e suas propriedades básicas. O espalhamento portador-portador e os espalhamentos por impurezas, defeitos e liga podem ser controlados, e ou minimizados, durante os processos de obtenção do material através de fatores como: nível de contaminação, cristalinidade e concentração de dopantes.

O objetivo principal deste trabalho foi o de realizar um estudo sistemático da influência dos mecanismos de espalhamento nas propriedades de transporte de materiais semicondutores. Para isto, foi desenvolvida uma rotina computacional baseada no método de Monte Carlo aplicado ao transporte semi-clássico. Na escolha dos materiais para o

estudo, foram seguidos os seguintes critérios: 1 - Interesse tecnológico; 2 - Disponibilidade de resultados na literatura; 3 - Abrangência das propriedades eletrônicas com relação à atuação dos mecanismos de transporte; 4 - Contribuição dos resultados obtidos. Detalhes de cada material serão reportados nos capítulos específicos.

Baseando-se nos critérios acima apresentados, os seguintes materiais foram escolhidos:

- 1 - Antimoneto de Gálio (GaSb).
- 2 - Telureto de Cádmio e Telureto de Cádmio Manganês (CdTe e $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$).
- 3 - Liga de Silício Germânio ($\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$).
- 4 - Super-Rede de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

A tese foi estruturada em oito capítulos, bibliografia e dois apêndices. No capítulo 2 é feita uma formulação dos conceitos básicos do transporte de carga em materiais semicondutores, incluindo os tópicos principais para o desenvolvimento da rotina Monte Carlo com ênfase especial na abordagem da natureza dos mecanismos de espalhamento. Este capítulo é uma compilação de inúmeras referências bibliográficas com o objetivo básico de servir de material de consulta para futuros trabalhos relacionados ao eixo temático proposto.

No capítulo 3 é feita uma revisão dos princípios e conceitos básicos do método de Monte Carlo (MC) e sua aplicação no Arseneto de Gálio (GaAs). Além do caráter didático da reprodução dos resultados, pudemos verificar a acurácia da rotina computacional, já que o GaAs é um material bastante estudado, e seus resultados estão bem estabelecidos.

Os capítulos 4, 5, 6 e 7 representam os estudos realizados nos materiais propostos. Cada capítulo foi estruturado da seguinte forma: Introdução, Modelo, Resultados e Conclusões. Para cada material estudado é proposto um modelo para a sua abordagem, a partir do MC, baseado na sua estrutura de bandas e nos mecanismos de espalhamento relevantes às propriedades de transporte do material em estudo. No item resultados, apresentamos uma coletânea dos resultados mais significativos para cada material, seguido de uma análise do seu comportamento. As conclusões parciais de cada capítulo são realizadas de modo a sintetizar as propriedades obtidas.

No capítulo 8 referente as conclusões e propostas de trabalhos futuros, fazemos uma comparação entre os materiais estudados, enfatizando a atuação dos diversos mecanismos

de espalhamento. Neste capítulo expomos também as contribuições inéditas geradas pelo nosso trabalho. Ao final deste capítulo, apresentamos três propostas de continuação deste trabalho, baseadas nas observações realizadas ao longo do seu desenvolvimento.

Capítulo 2

Transporte Semi-Clássico em Materiais Semicondutores

O método de Monte Carlo aplicado ao transporte de portadores em materiais semicondutores têm como princípio básico estudar o movimento de portadores no espaço de fase, coletando informações através dos diversos tipos de interação (espalhamentos), a que estes são submetidos. Este método depende fundamentalmente de dois pontos básicos: a estrutura de banda do material e dos mecanismos de espalhamento relevantes ao problema em estudo. Neste capítulo faremos uma breve explanação dos modelos mais simples usados no cálculo de transporte em semicondutores, bem como das taxas de espalhamento. O estudo é feito adaptando-se o conteúdo extraído da literatura para a aplicação direta ao método de MC. É dada ênfase na formulação específica para os mecanismos de espalhamento de portadores.

Detalhes de cálculos de estruturas de bandas de materiais semicondutores podem ser encontrados nas seguintes referências [3]-[8].

2.1 A Equação de Boltzmann

A equação de Boltzmann é usada direta ou indiretamente para resolver problemas de transporte de portadores no regime semi-clássico. Esta equação descreve um sistema de muitas partículas e têm sido utilizada para resolver problemas em materiais do tipo "bulk", ou mesmo, em dispositivos semicondutores. A solução da equação de Boltzmann é obtida a partir da função distribuição do problema a ser estudado. A função distribuição de uma partícula é simbolizada por:

$$f_d = f_d(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t), \quad (2.1)$$

onde \mathbf{r} representa o vetor posição e \mathbf{k} o vetor momento. A equação de transporte de Boltzmann é descrita pela seguinte expressão[3] [6]:

$$\frac{\partial f_d}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_d + \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_d = \left. \frac{\partial f_d}{\partial t} \right|_{col}. \quad (2.2)$$

Esta equação descreve a evolução do sistema físico, através do movimento das partículas, as forças que atuam sobre o sistema e seus espalhamentos (que ocorrem através de colisões entre os elétrons e a rede). O primeiro termo da equação (2.2), representa a mudança da função distribuição devido a partículas sendo espalhadas, capturadas, adicionadas ou subtraídas, ou mesmo fenômenos de geração e recombinação. O segundo termo representa a dependência espacial da função distribuição, e o termo $\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t}$ a aceleração resultante da força de Lorentz. O último termo, expressa a mudança da função distribuição devido a processos de colisões.

A partir da equação de Boltzmann desenvolveram-se modelos simplificados que são utilizados na sua solução. Dentre os modelos mais utilizados estão o modelo "drift-diffusion" ou difusão e o modelo hidrodinâmico.

Modelo de Difusão.

Há muitos trabalhos utilizando soluções aproximadas da equação de Boltzmann, o modelo de difusão é popular devido a sua simplicidade. Ainda houve várias tentativas de sofisticar este modelo devido ao fato de que os dispositivos, a cada dia menores, evidenciam a deficiência deste modelo.

Neste modelo a equação de continuidade para elétrons é dada por:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{J}_n - \mathbf{R}, \quad (2.3)$$

e para buracos:

$$\frac{\partial p_b}{\partial t} = \frac{1}{e} \nabla \cdot \mathbf{J}_b - \mathbf{R}, \quad (2.4)$$

aqui os termos n_e e p_b representam a densidade de portadores para elétrons e buracos respectivamente; \mathbf{J}_n e \mathbf{J}_b representam a densidade de corrente para elétron e buracos respectivamente; e \mathbf{R} corresponde a taxa de geração e recombinação. As densidades de corrente para elétrons e buracos neste modelo são usualmente descritas pelas seguintes equações:

$$\mathbf{J}_n = en_e\mu_e\mathbf{F} + eD_e\nabla n_e, \quad (2.5)$$

$$\mathbf{J}_b = ep_b\mu_b\mathbf{F} - eD_b\nabla p_b, \quad (2.6)$$

onde μ_e é a mobilidade do elétron, μ_b é a mobilidade do buraco, D_e a constante de difusão para elétron, D_b a constante de difusão para buracos e \mathbf{F} o campo elétrico aplicado. Vamos resumir as suposições necessárias para a validade destas equações[9]: 1 - Todos os espalhamentos são considerados elásticos; 2 - Variações espaciais do tempo de colisão e da estrutura de banda são desprezadas, o que significa que para ser válido a concentração de impurezas deve variar lentamente durante todo livre caminho médio do portador; 3 - Efeitos de degenerescência são desprezados; 4 - Variação espacial das forças externas é desprezada; 5 - Campo magnético nulo; 6 - Variação espacial da temperatura do portador é desprezada, e supõe-se que a temperatura da rede é igual a do portador; 7 - Bandas parabólicas.

Na literatura encontra-se frequentemente trabalhos que usam formas ligeiramente diferentes das relações aqui apresentadas, normalmente são tentativas de se contornar algumas das restrições. Devido a estas restrições muitos autores preferem o modelo hidrodinâmico que segundo eles é um grande avanço em relação ao modelo de difusão[9].

Modelo Hidrodinâmico.

Naturalmente o modelo hidrodinâmico exige um maior esforço computacional que o modelo de difusão. Contudo, este modelo não sofre de algumas restrições que o modelo

anterior têm. Neste modelo as equações (2.3) e (2.4) ainda são válidas mas as expressões das densidades de corrente são substituídas pelas seguintes equações:

$$\mathbf{J}_n = en_e \mathbf{v}_e, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{J}_b = -ep_b \mathbf{v}_b, \quad (2.8)$$

onde \mathbf{v}_e e \mathbf{v}_b são as velocidades de deriva para elétron e buraco respectivamente. Além destas equações este modelo faz uso das conservações de energia e momento, sendo que a conservação de momento é expressa por:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \mathbf{v} + \frac{e\mathbf{F}}{m^*} + \frac{1}{m^* n_e} \nabla (n_e k_b T_e) + \frac{\mathbf{v}(E_k)}{\tau_p(E_k)} = 0, \quad (2.9)$$

e a conservação da energia por:

$$\frac{\partial E_k}{\partial t} + e\mathbf{v} \cdot \mathbf{F} + \mathbf{v} \cdot \nabla E_k + \frac{1}{n_e} \nabla \cdot (n_e \mathbf{v} k_b T_e) + \frac{E_k - E_{k0}}{\tau_{E_k}(E_k)} = 0, \quad (2.10)$$

com

$$E_k = \frac{1}{2} m^* \mathbf{v}^2 + \frac{3}{2} k_b T_e, \quad (2.11)$$

expressando a energia média do elétron, T_e representa a temperatura do elétron, $\tau_p(E_k)$ é o tempo de relaxação do momento, $\tau_{E_k}(E_k)$ expressa o tempo de relaxação da energia e ambos dependentes da energia do elétron. Os tempos de relaxação podem ser obtidos experimentalmente, porém recentemente estes parâmetros têm sido extraídos a partir do método de Monte Carlo. As equações que representam as conservações de momento e energia também são válidas para buracos, fazendo-se as devidas correções. Apesar de ser um modelo melhor desenvolvido que o modelo de difusão ele ainda sofre de algumas restrições que o modelo anterior apresenta. Notadamente uma delas é a suposição de que a função distribuição é similar a distribuição de Maxwell, o que para altos campos elétricos não é verdade. Várias tentativas foram feitas para adequar este modelo para sua aplicação em dispositivos, porém sua aplicação ainda é questionável [3]. Sem mencionar que em certas condições os problemas envolvendo dispositivos têm uma série de agravantes numéricos que têm que ser contornados para a sua aplicação.

O método de Monte Carlo não apresenta a maioria dos problemas que estes métodos têm, resolvendo a equação de Boltzmann indiretamente. Além disto, qualquer refinamento a ser introduzido no método de MC é usualmente mais fácil de ser implementado do que em outros métodos[4].

2.2 Mecanismos de Espalhamento

2.2.1 Introdução

No método de MC aplicado ao transporte de portadores em semicondutores, a física dos problemas abordados está na estrutura de banda do material e na compreensão dos mecanismos de espalhamento de portadores. Portanto, é de suma importância analisar com cuidado os mecanismos de espalhamento que podem ocorrer em um semicondutor. Tradicionalmente, os cálculos das taxas de espalhamento levam em consideração apenas a primeira ordem de perturbação, conseqüentemente apenas a interação entre dois corpos são analisadas. Em geral, supõe-se que os mecanismos de espalhamento não dependam de qual forças externas estejam sendo aplicadas ao material, e que as colisões ocorram instantaneamente[4]-[5].

Quando estudamos o problema de um elétron em um material perfeitamente cristalino e resolvemos a equação de Schrödinger independente do tempo e obtemos as funções de Bloch estacionárias. Através desta concepção, o elétron estando em um cristal perfeito não seria perturbado e conseqüentemente deveria, com o tempo, aumentar gradualmente sua velocidade de forma linear com o campo elétrico. No entanto, quando estudamos um cristal real, observamos que este comportamento não acontece. A razão para esta discrepância deve-se a que num cristal real o elétron interage com as imperfeições da rede cristalina como defeitos e as próprias vibrações desta rede. Estas imperfeições desviam o elétron de sua trajetória e podem alterar sua energia. Assim em vez de aumentar sua velocidade com o tempo, a velocidade do elétron alcança um certo limite que depende da magnitude do campo aplicado.

Os elétrons interagem com a rede de várias maneiras. Vamos apresentar o seguinte Hamiltoniano para iniciar o estudo deste problema:

$$\mathfrak{H}_{tot} = \mathfrak{H}_1 + \mathfrak{H}_2 + \mathfrak{H}_3 + \dots \quad (2.12)$$

Este Hamiltoniano representa todas as interações que ocorrem em um semicondutor, sendo que cada termo deste representa uma interação diferente. Porém, o que ocorre com frequência é que apenas alguns mecanismos de espalhamento são relevantes para o problema que está sendo estudado. A meta deste estudo, como já foi dito anteriormente,

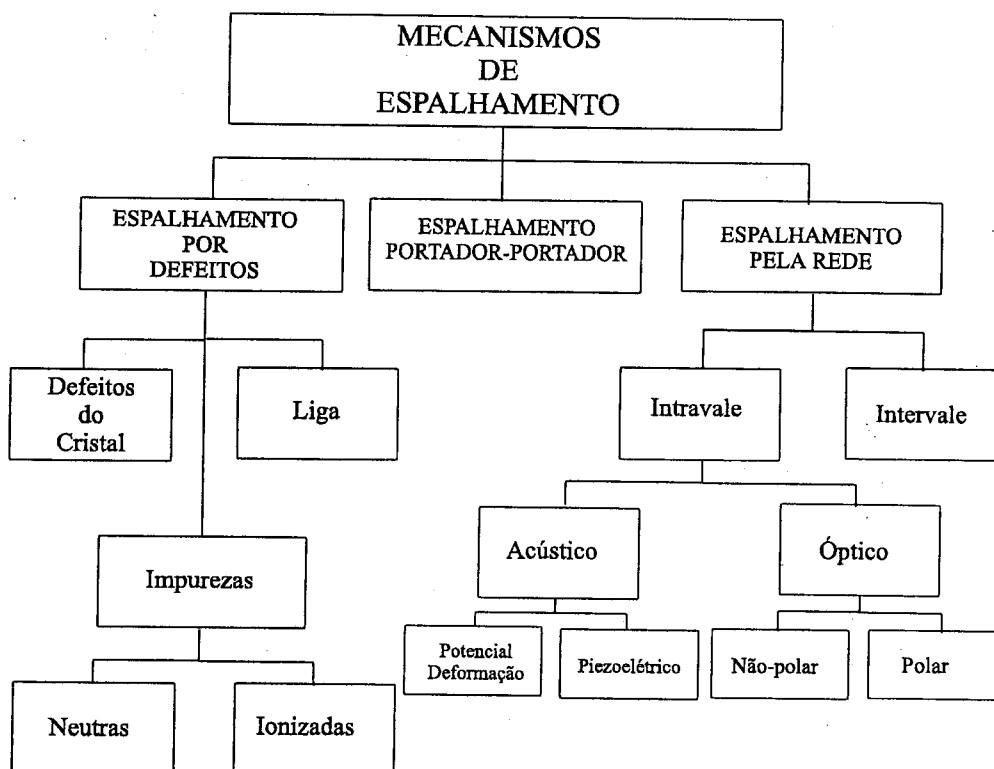


Figura 2.1: Mecanismos de Espalhamento.

é apresentar os mecanismos mais relevantes e verificar qual a frequência destes mecanismos e qual é a influência que estes exercem no transporte de um portador de carga num material semiconductor. Incluiremos também, alguns mecanismos que só serão relevantes em circunstâncias particulares, tais como: baixas temperaturas, altos campos e problemas envolvendo superfície[5, 10]. Apresentamos na figura 2.1 os mecanismos de espalhamento que normalmente ocorrem em um cristal real em 3D, caso o leitor queira aprofundar-se no assunto há boas referências sobre o tema [3, 5, 6, 10].

As interações do elétron com o semiconductor ocorrem basicamente de duas formas: A primeira é a interação entre os elétrons e os fônons. Apesar da relação de dispersão do fônon apresentar uma certa complexidade, podemos tratar a interação elétron-fônon usando algumas simplificações e utilizando a conservação de energia e momento, e como consequência tem-se uma regra de seleção a qual restringe os possíveis estados permitidos

para o elétron. O segundo caso é quando o elétron interage com um átomo em si ou com um defeito, como por exemplo uma impureza ionizada. Neste caso, o elétron irá "sentir" o potencial coulombiano provocado pelo átomo, que resultando num espalhamento.

Em ambos os casos trataremos o espalhamento através da Teoria de Perturbação dependente do tempo considerando apenas o termo de primeira ordem.

Em condições normais, as formas de espalhamento que atuam num portador no material semiconductor são as descritas acima, porém há outros meios de um portador sofrer um espalhamento. Os mecanismo de ionização por impacto e o mecanismo de liberação e captura de portadores não pertencem a nenhuma destas classes. Dentre estes dois mecanismos o de ionização por impacto é o mais relevante sendo inclusive muito importante quando o semiconductor é submetido a campos relativamente altos.

2.2.2 Regra de ouro de Fermi

Em um sólido quando ocorre uma interação entre um fônon e um elétron, esta interação é muito importante e deve ser tratada cuidadosamente. Usualmente a interação entre o fônon e o elétron é tratada através da teoria de perturbação dependente do tempo de primeira ordem. O resultado deste tratamento é conhecido como a regra de ouro de Fermi, que é dada pela seguinte expressão:

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | H_1 | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(\epsilon'_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}} \mp \hbar\omega_{\mathbf{q}}). \quad (2.13)$$

Os mecanismos de espalhamento são calculados a partir desta equação. A regra de ouro de Fermi é obtida solucionando a equação de Schrödinger dependente do tempo através de Teoria de Perturbação de primeira ordem. Quando aplicada a semicondutores, o termo $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ representa a energia do fônon. A função δ expressa a conservação de energia que é:

$$\epsilon'_{\mathbf{k}'} = \epsilon_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega_{\mathbf{q}}, \quad (2.14)$$

onde o sinal positivo refere-se à absorção e o sinal negativo à emissão.

Agora para obtermos a taxa de espalhamento de um determinado mecanismo, devemos integrar $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ em relação ao vetor de onda \mathbf{k}' :

$$W(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') dk' d\theta d\phi, \quad (2.15)$$

definiremos θ como o ângulo polar e ϕ como o ângulo azimutal. No entanto, em um semicondutor a estrutura de banda é tratada como um contínuo, então neste caso a taxa de espalhamento $W(\mathbf{k})$ será independente de ϕ .

2.2.3 Integrais de "Overlap"

As integrais de "overlap" aparecem quando calcula-se o elemento de matriz do potencial perturbativo. Normalmente no caso de bandas parabólicas supõe-se que o elétron é descrito por ondas planas e que $U_{\mathbf{k}} \approx U_{\mathbf{k}'}$, desta forma a integral de "overlap" para bandas parabólicas pode ser expressa pela aproximação: $G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \approx 1$. No entanto, quando trabalharmos com bandas não parabólicas a integral de "overlap" será diferente de um. Aqui apenas daremos um pequeno resumo de como a integral de "overlap" pode ser obtida. Detalhes para o cálculo estão descritos na obra de Nag[10].

Em termos gerais podemos supor que o potencial perturbativo pode ser expandido em séries de Fourier e descrito pela seguinte equação:

$$H_1 = \sum_q U_q \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}). \quad (2.16)$$

Fazendo o cálculo do elemento de matriz para o caso de bandas não parabólicas, desprezando a interação spin-órbita, o fator de "overlap" pode ser escrito com uma boa aproximação pela seguinte equação:

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = |I(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 = (a_k a_{k'} + c_k c_{k'} \cos \theta)^2, \quad (2.17)$$

onde os termos a_k e c_k são dados por:

$$a_k = \left(\frac{1 + \alpha\varepsilon}{1 + 2\alpha\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.18)$$

$$c_k = \left(\frac{\alpha\varepsilon}{1 + 2\alpha\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.19)$$

Para os elétrons em geral considera-se que a integral de "overlap" é aproximadamente igual a 1. Porém quando são calculadas as taxas de espalhamento para buracos, isto não é uma boa aproximação já que a função de onda do buraco é predominantemente

tipo-p. Usualmente para transições intrabanda, tanto na banda de buraco leve quanto na banda de buracos pesados, utiliza-se a seguinte expressão:

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{1}{4} (1 + 3 \cos^2 \theta), \quad (2.20)$$

porém para o cálculo de transições interbandas utiliza-se a seguinte expressão:

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{3}{4} \sin^2 \theta. \quad (2.21)$$

2.2.4 Interação elétron-fônon

O espalhamento por fônons ocorre devido à interação dos elétrons com as vibrações da rede. As vibrações da rede são decorrentes das oscilações coletivas dos íons. Estas oscilações coletivas são tratadas a partir do ponto de vista da mecânica quântica, podendo ser expressas como uma superposição de modos normais:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{\frac{1}{2}} (a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{e}_{\mathbf{q}}. \quad (2.22)$$

Definimos a energia dos fônons como $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ para uma frequência $\omega_{\mathbf{q}}$ e um vetor de onda \mathbf{q} . Devido as suas características, os fônons são considerados Bósons, obedecendo assim à estatística de Bose-Einstein. Desta forma, o número de ocupação de fônons, $n_{\mathbf{q}}$, é expresso para uma dada temperatura T por:

$$n_{\mathbf{q}} = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{k_b T}\right) - 1 \right]^{-1}. \quad (2.23)$$

Nos materiais semicondutores de um modo geral, as relações de dispersão são exemplificadas como mostra a figura 2.2:

Observamos que as relações de dispersão são representadas por quatro curvas, divididas em dois tipos distintos. No primeiro caso, notamos que a frequência aumenta quando $|\mathbf{q}|$ aumenta linearmente e depois próximo da borda da zona de Brillouin tende a um valor limite. As duas curvas que aparecem neste grupo devem-se à propagação longitudinal e transversal. Do ponto de vista físico, os átomos que vibram em fase de modo similar ao comportamento das ondas acústicas, são chamados de fônons acústicos. Para o segundo grupo de vibrações, a frequência diminui com o módulo do vetor de onda. Neste caso, os

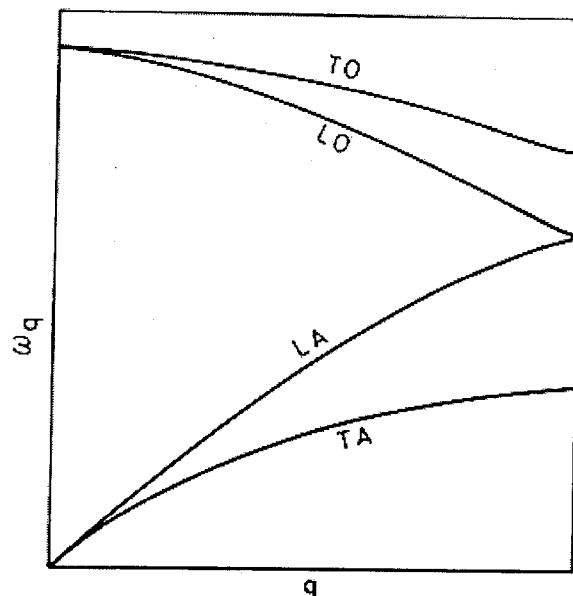


Figura 2.2: Relações de dispersão do fônon num material semiconductor.

átomos vibram em fases opostas e os fônons correspondentes a estas vibrações são chamados de fônons ópticos.

O espalhamento por fônons acústicos pode ser separado em dois casos: espalhamento acústico por potencial deformação e o efeito piezoelétrico. Para fônons ópticos temos o caso polar e o não-polar, sendo que o não-polar é tratado pelo método de potencial deformação. Apresentaremos as taxas de espalhamento apenas para os casos mais simples, caso o leitor queira aprofundar-se no tema as referências [3, 4, 6] podem ser consultadas, inclusive para detalhes de como estas taxas de espalhamento foram obtidas.

Fônons Acústicos: potencial deformação elástico

O espalhamento acústico neste caso se comporta da seguinte maneira: os átomos que formam a rede cristalina deslocam-se na mesma direção, estas vibrações produzem um potencial que perturba tanto a banda de condução quanto a banda de valência. Para descrever este comportamento, os fônons são descritos por um operador com termos que representam a criação e destruição dos fônons quando da interação com os elétrons. O

potencial de interação para fônons acústicos é dado através da seguinte expressão:

$$H' = \sum_{\mathbf{q}} i\mathbf{q}\Xi_d \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}V} \right)^{\frac{1}{2}} (a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^{\dagger}) \exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}), \quad (2.24)$$

onde Ξ_d é o potencial de deformação, ρ é a densidade do material, $\omega_{\mathbf{q}}$ é a frequência angular de oscilação, V o volume, \mathbf{q} é o vetor de onda do fônon, considerando-se que o vetor de onda seja paralelo à direção de polarização e \mathbf{r} é o deslocamento. Os termos $a_{\mathbf{q}}$ e $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ são os operadores de destruição e criação respectivamente. Utilizando este hamiltoniano obtêm-se a seguinte taxa de espalhamento para fônons acústicos (elástico):

$$W(\varepsilon) = \frac{2^{\frac{1}{2}} (m^*)^{\frac{3}{2}} \Xi_d^2}{\pi \hbar^4 v_s^2 \rho} k_b T \varepsilon^{\frac{1}{2}}, \quad (2.25)$$

onde v_s é a velocidade do som e k_b é a constante de Boltzmann e T é a temperatura. Caso o leitor queira estudar um comportamento a baixas temperaturas, onde o espalhamento acústico têm uma maior influência, pode ser aconselhável utilizar o modelo inelástico para o espalhamento acústico.

Fônons acústicos potencial de deformação inelástico

No caso do espalhamento inelástico, e levando-se em consideração os detalhes de uma estrutura de banda elipsoidal, e supondo que a não parabolicidade seja levada em conta, obtêm-se a seguinte probabilidade de espalhamento para absorção:

$$W_{ac,a}(\varepsilon) = \frac{m_d^{1/2} (k_b T)^3 \Xi_{ac}^2}{2^{5/2} \pi \hbar^4 v_s^4 \rho} \gamma^{-1/2}(\varepsilon) F_{ac}, \quad (2.26)$$

$$F_{ac} = (1 + 2\alpha\varepsilon) [F_1(x_{2a}) - F_1(x_{1a})] + 2\alpha k_b T [F_2(x_{2a}) - F_2(x_{1a})],$$

e para emissão:

$$W_{ac,a}(\varepsilon) = \frac{m_d^{1/2} (k_b T)^3 \Xi_{ac}^2}{2^{5/2} \pi \hbar^4 v_s^4 \rho} \gamma^{-1/2}(\varepsilon) G_{ac}, \quad (2.27)$$

$$G_{ac} = (1 + 2\alpha\varepsilon) [G_1(x_{2e}) - G_1(x_{1e})] - 2\alpha k_b T [G_2(x_{2e}) - G_2(x_{1e})],$$

as funções $F_1(x)$, $F_2(x)$, $G_1(x)$ e $G_2(x)$ são obtidas resolvendo as seguintes integrais:

$$F_1(x) = \int_0^x n_{ac}(x') x'^2 dx', \quad (2.28)$$

Bandas Elipsoidais Não-Parabólicas			
Absorção	Emissão		Intervalo
$x_{1,a} = C^*(\alpha)$	-		$\gamma(\epsilon) < \frac{\epsilon_{vs}^*}{1-4\alpha\epsilon_{vs}^*}$
$x_{2,a} = C^*(\alpha) E^*$	-		$\gamma(\epsilon) < \frac{\epsilon_{vs}^*}{1-4\alpha\epsilon_{vs}^*}$
$x_{1,a} = 0$	$x_{1,e} = 0$		$\gamma(\epsilon) > \frac{\epsilon_{vs}^*}{1-4\alpha\epsilon_{vs}^*}$
$x_{2,a} = C^*(\alpha) E^*$	$x_{2,e} = C^*(\alpha)$	$ \sqrt{\gamma(\epsilon)} - \sqrt{\epsilon_{vs}^*}(1+2\alpha\epsilon) $	$\gamma(\epsilon) > \frac{\epsilon_{vs}^*}{1-4\alpha\epsilon_{vs}^*}$
$C^*(\alpha) = \frac{\sqrt{\epsilon_{vs}^*}}{k_b T(1-4\alpha\epsilon_{vs}^*)}$		$D^* = \sqrt{\epsilon_{vs}^*}(1+2\alpha\epsilon) - \sqrt{\gamma(\epsilon)} $	
$E^* = \sqrt{\epsilon_{vs}^*}(1+2\alpha\epsilon) + \sqrt{\gamma(\epsilon)}$			$\epsilon_{vs}^* = \frac{m_d v_s^2}{2}$

Tabela 2.1: Limites de integração para o espalhamento de fônons acústicos.

$$F_2(x) = \int_0^x n_{ac}(x') x'^3 dx', \quad (2.29)$$

$$G_1(x) = \int_0^x (n_{ac}(x') + 1) x'^2 dx', \quad (2.30)$$

$$G_2(x) = \int_0^x (n_{ac}(x') + 1) x'^3 dx'. \quad (2.31)$$

Os limites de integração para fônons acústicos são dados por x_{1a} , x_{2a} , x_{1e} e x_{2e} , e são os limites para os processos de absorção e emissão (tabela 2.1).

A figura 2.3 representa o cálculo para o mecanismo de espalhamento acústico inelástico no vale Γ para o GaAs. A dependência para baixos valores de energia neste mecanismo é grande, porém em altas energias este mecanismo varia suavemente com a energia do elétron.

Fônons acústicos: Piezoelétrico

No caso de fônons que são produzidos devido ao efeito piezoelétrico, fenômeno que ocorre quando os átomos que estão parcialmente ionizados e ao vibrarem produzem potenciais que perturbam o sistema, a magnitude deste potencial será maior quanto menor for a simetria do sistema. No entanto, este mecanismo têm relevância quando investiga-se fenômenos a baixas temperaturas e baixos campos. Devido a sua natureza eletrostática, este mecanismo perde eficiência à medida em que a energia do portador tende a ser considerável. Usando o potencial perturbador para o espalhamento piezoelétrico e fazendo cálculos

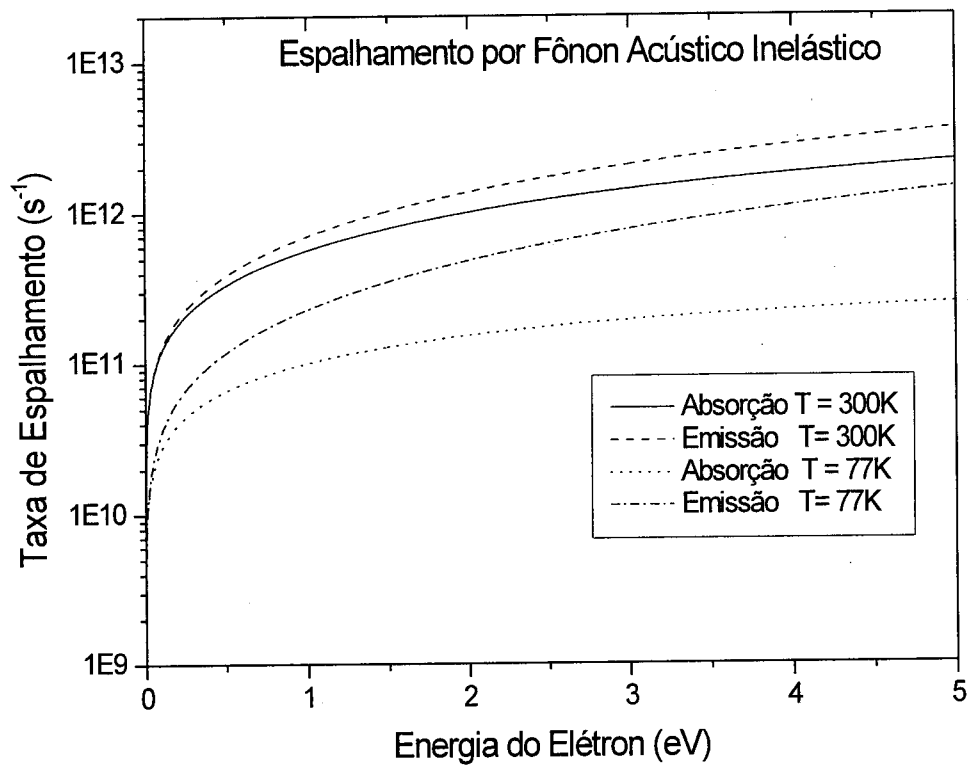


Figura 2.3: Taxa de espalhamento para o processo de fônons acústicos no vale Γ do GaAs.

similares aos do caso anterior, a partir da regra de ouro de Fermi, obtemos [4] :

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = (e\Xi_p)^2 \frac{\pi}{\rho\omega_{\mathbf{pz}}V} \left(n_{pz} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \left(\frac{q^2}{q^2 + \lambda_d^2} \right)^2 \delta(\epsilon' - \epsilon \mp \hbar\omega_{\mathbf{pz}}) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} \mp \mathbf{q}), \quad (2.32)$$

onde Ξ_p representa o valor médio do tensor piezoelétrico sobre todas as direções de polarização do fônon, $\omega_{\mathbf{pz}}$ é a frequência do fônon para este mecanismo de espalhamento e κ é a constante dielétrica. O termo λ_d é dado pela seguinte expressão:

$$\lambda_d = \sqrt{\frac{e^2 n}{\kappa k_b T}}, \quad (2.33)$$

onde n é a concentração de portadores livres. No espalhamento piezoelétrico a temperaturas da ordem 100 K a energia do fônon é muito pequena se comparada à energia do elétron. Portanto, podemos fazer as mesmas aproximações que realizamos no caso do espalhamento por fônons acústicos (potencial deformação). Aplicando a regra de ouro de Fermi, obtêm-se a forma final da expressão para a taxa de espalhamento:

$$W(\epsilon) = \left(\frac{e\Xi_p}{\hbar v_s} \right)^2 \frac{1}{\rho} \frac{k_b T}{8\pi} \sqrt{2m^* \epsilon}^{-\frac{1}{2}} \left(\ln \left(\frac{4\epsilon}{\epsilon_b} + 1 \right) - \frac{1}{\left(1 + \frac{\epsilon_b}{4\epsilon} \right)} \right). \quad (2.34)$$

Na figura 2.4 apresentamos o cálculo da taxa de espalhamento para o mecanismo piezoelétrico no vale Γ do GaAs para duas temperaturas. Este mecanismo decai com o aumento da energia do elétron e sua "força" não é muito grande pois o valor máximo da taxa de espalhamento é da ordem de 10^{11} s^{-1} . Contudo para baixas temperaturas e num material com baixa concentração de impurezas, este mecanismo pode contribuir significativamente no transporte.

Fônons ópticos(não-polar)

Neste mecanismo de espalhamento a energia do fônon é comparável com a energia de excitação térmica, $\hbar\omega_{\text{nop}} \sim k_b T$, e consequentemente não poderemos desprezar este termo nos cálculos, caracterizando um comportamento inelástico para o espalhamento não-polar. Tratando o espalhamento de fônons ópticos pelo método do potencial deformação, e supondo que os átomos oscilem fora de fase, obtêm-se a seguinte taxa de espalhamento

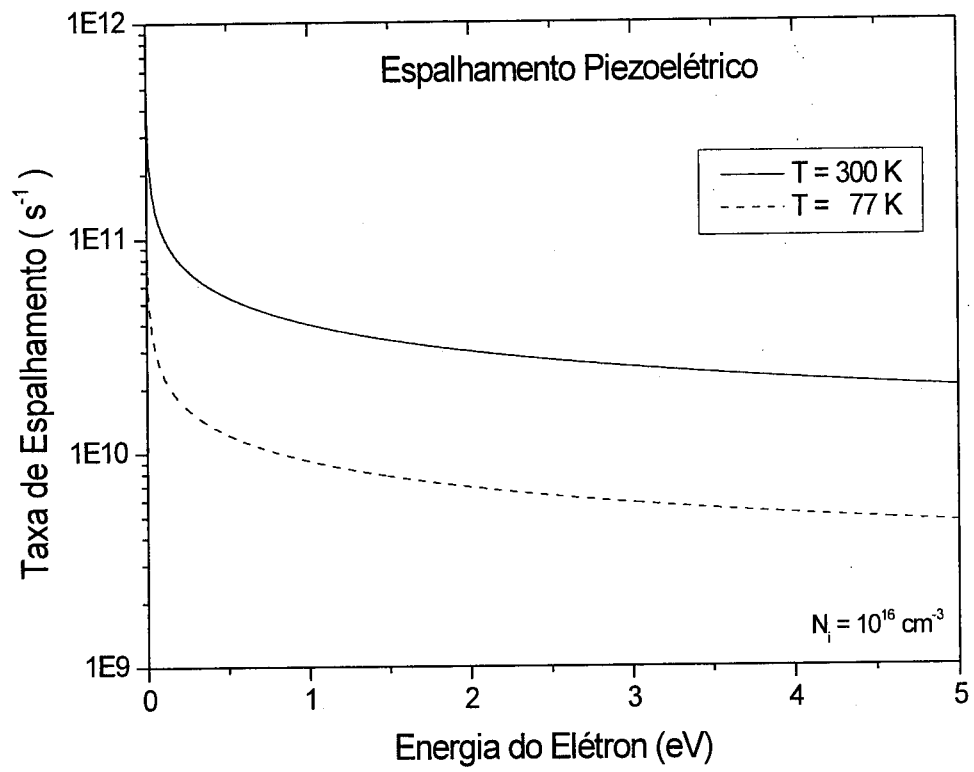


Figura 2.4: Taxa de espalhamento para o processo piezoelétrico no vale Γ do GaAs.

para este processo:

$$W(\mathbf{k}) = \frac{(Z_j - 1) \Xi_{pop}^2}{4\pi\rho\omega_{nop}} \left(n_{nop} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{(2m^*)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\epsilon \pm \hbar\omega_{nop}}}{\hbar^3}, \quad (2.35)$$

onde Z_j é o número de vales equivalentes, Ξ_{pop} é o potencial de deformação, ω_{nop} é a frequência, m^* é a massa efetiva do ponto de simetria. O número de vales equivalentes para os vales Γ , L e X são respectivamente 1, 4 e 3, naturalmente este mecanismo não é levado em consideração para o vale Γ .

Fônons ópticos(polar)

Consideremos dois átomos vibrando longitudinalmente, formando assim um dipolo elétrico oscilante. O potencial gerado por este dipolo interage com o elétron espalhando-o. Este mecanismo à temperatura ambiente é muito forte sendo em geral o processo dominante em semicondutores polares.

O espalhamento por fônons ópticos depende fortemente da amplitude do momento de dipolo, e para conhecermos o potencial de interação para este caso é necessário conhecer o deslocamento relativo entre os dois átomos. Escrevendo a Hamiltoniana e aplicando a regra de ouro de Fermi, obtêm-se a seguinte expressão para este mecanismo de espalhamento:

$$W(\mathbf{k}) = \frac{e^2 k \hbar\omega_{op}}{8\pi\hbar \epsilon_k} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right)^{\frac{1}{2}} \left(n_{op} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \ln \left(\frac{q_{\max}}{q_{\min}} \right). \quad (2.36)$$

onde $\hbar\omega_{op}$ é a energia do fônon polar óptico, ϵ_s é a constante dielétrica estática, ϵ_∞ é a constante dielétrica a alta frequência e q_{\max} e q_{\min} são dados pelas seguintes equações:

$$q_{\max} = k \left[1 + \left(1 \pm \frac{\hbar\omega_{op}}{\epsilon} \right) \right], \quad (2.37)$$

$$q_{\min} = k \left[1 - \left(1 \pm \frac{\hbar\omega_{op}}{\epsilon} \right) \right]. \quad (2.38)$$

Na figura 2.5 estão representadas as curvas para as taxas de espalhamento do fônon polar óptico em função da energia do elétron no vale Γ do GaAs. Pode ser observado que este mecanismo não é fortemente dependente da energia do elétron, nota-se também que há uma energia limite para o início do processo por emissão. A diminuição da temperatura afeta mais pronunciadamente o processo de emissão do que o de absorção.

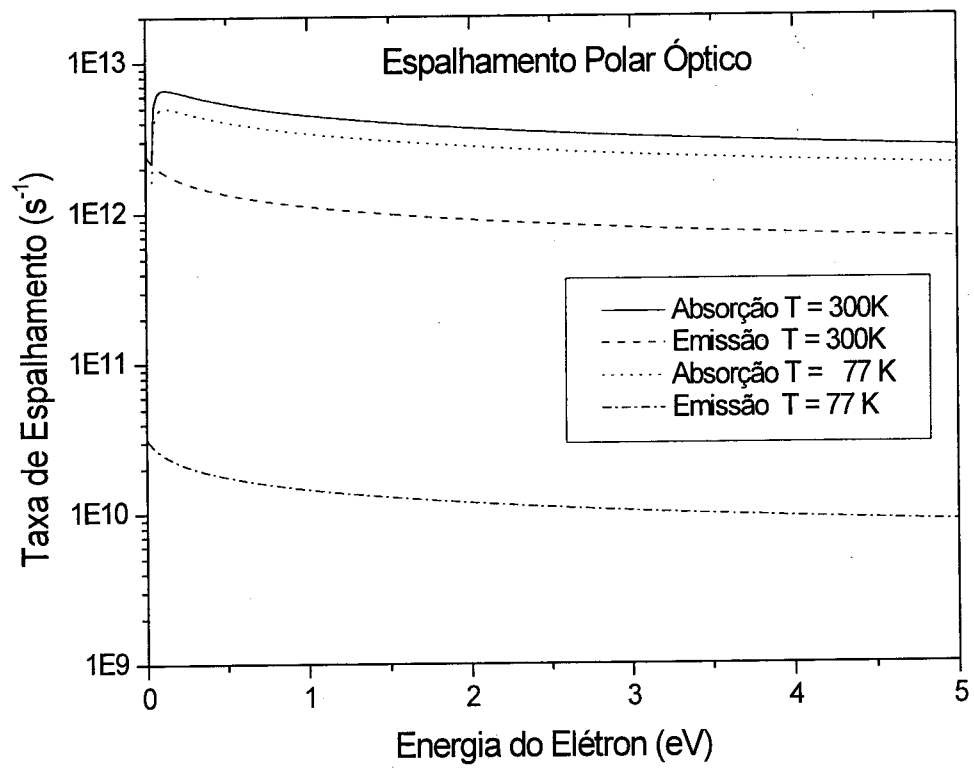


Figura 2.5: Taxa de espalhamento para o mecanismo polar óptico para o elétron no GaAs a $T = 77K$ e $T = 300K$.

Espalhamento Intervale

O espalhamento de fônons entre vales não equivalentes são devidos a fônons ópticos e fônons acústicos. Normalmente este mecanismo é importante a campos relativamente altos, ou seja, este espalhamento torna-se importante quando o campo aplicado fornece energia suficiente para o elétron espalhar de um vale para outro. O campo elétrico necessário para que isto ocorra varia de material para material, pois depende da diferença de energia entre os vales.

Neste espalhamento o vetor de onda do fônion tem um valor muito próximo à diferença entre os estados inicial e final. A energia do fônion neste caso pode ser considerada constante dentro de uma certa aproximação, portanto $\Delta\varepsilon$ tem um valor aproximadamente constante. Vamos considerar que o potencial de interação neste caso é dado por:

$$H' = \Xi_{ij} \cdot u(\mathbf{r}, t), \quad (2.39)$$

onde o potencial deformação intervale é definido pelo símbolo Ξ_{ij} , sendo que i e j são os vales inicial e final, e $u(\mathbf{r}, t)$ é dado pela equação (2.22). Vale salientar que para cada espalhamento intervale o potencial de deformação pode ter um valor diferente. Usando a regra de ouro de Fermi e fazendo os cálculos de modo similar obtemos:

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi \Xi_{ij}^2 Z_j}{\rho \omega_{ij} V} \left(n_{ij} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k \mp \hbar \omega_{ij} + \Delta\varepsilon_{ij}). \quad (2.40)$$

onde Z_j é o número de vales finais disponíveis para o espalhamento, ω_{ij} é a frequência do fônion e $\Delta\varepsilon_{ij}$ é a diferença de energia entre os dois vales. Fazendo um cálculo similar ao caso do espalhamento intravale, obtêm-se a seguinte taxa de espalhamento:

$$W(\varepsilon) = \frac{\Xi_{ij}^2 Z_j}{\rho \omega_{ij}} \frac{m^{*\frac{3}{2}}}{2^{\frac{1}{2}} \pi \hbar^3} \left(n_{ij} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) (\varepsilon_k \pm \hbar \omega_{ij} - \Delta\varepsilon_{ij})^{\frac{1}{2}}. \quad (2.41)$$

Para exemplificar a dependência da taxa de espalhamento com a energia vamos apresentar o cálculo das taxas de espalhamento para as transições ΓL , ΓX no GaAs. Na figura 2.6 apresentamos o espalhamento intervale (ΓL) para duas temperaturas, considerando o vale Γ como inicial. A taxa de espalhamento aumenta com a energia e diminui com a temperatura.

Na figura 2.7 apresentamos o espalhamento intervale (ΓX) para duas temperaturas, considerando o vale Γ como vale inicial. Da mesma forma que o mecanismo ΓL , a taxa

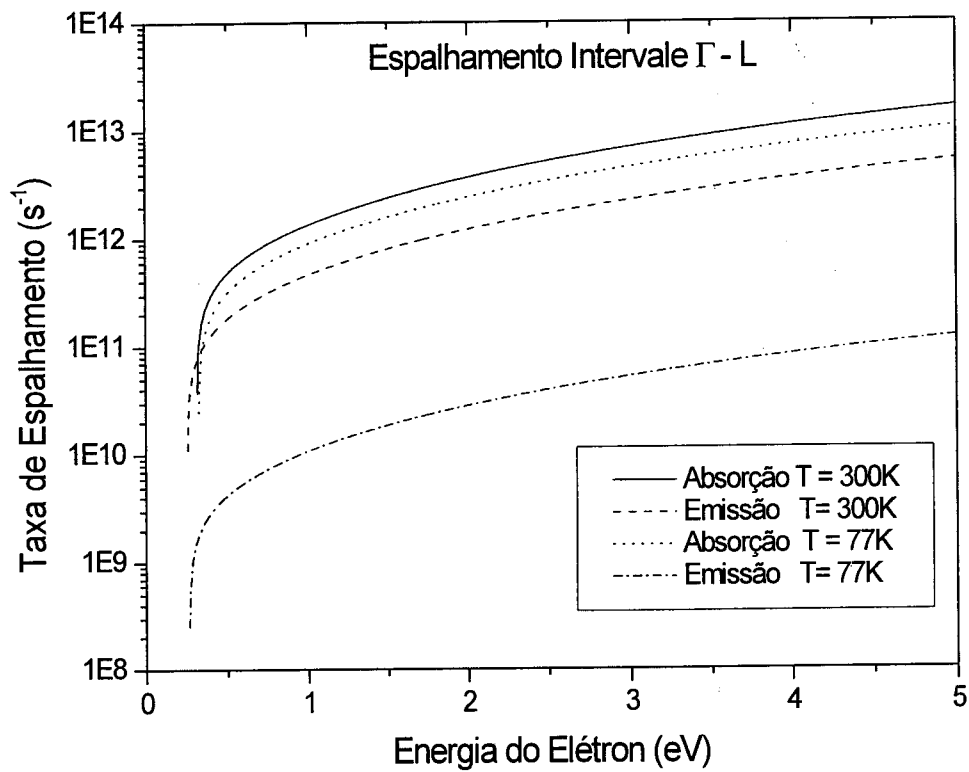


Figura 2.6: Taxa de espalhamento pelo mecanismo intervalo (ΓL) no GaAs para $T = 77K$ e $T = 300K$.

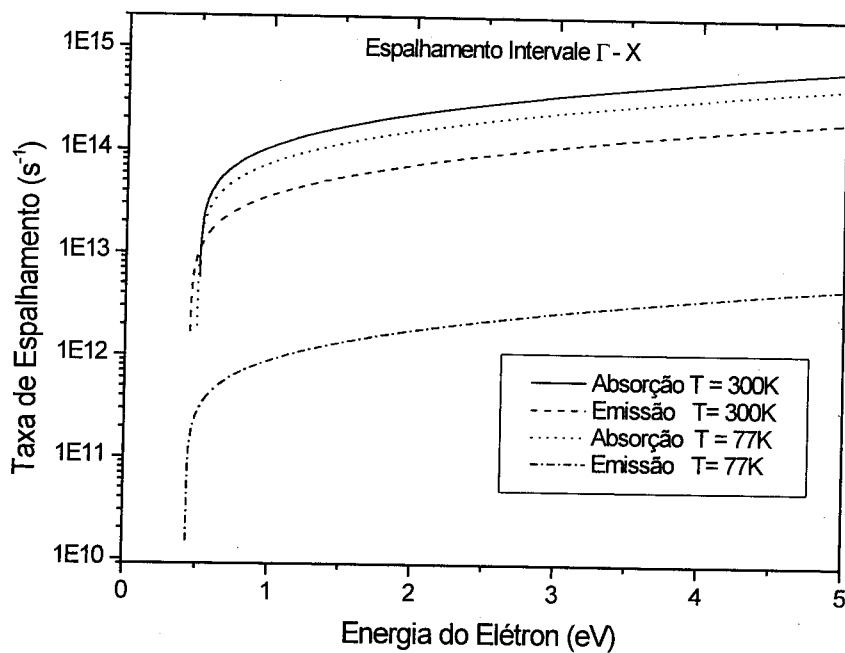


Figura 2.7: Taxa de espalhamento para o mecanismo intervalo (ΓX) no GaAs para $T = 77K$ e $T = 300K$.

de espalhamento aumenta com a energia e diminui com a temperatura, e que neste processo existe uma energia mínima para a ativação do processo, isto porque para o elétron ir do vale Γ para o vale X ele deve ter energia maior ou igual à energia que separa estes dois vales.

2.2.5 Espalhamento por Defeitos

Como mencionamos anteriormente, as imperfeições que a rede apresenta podem ter sua origem de várias formas. O espalhamento por defeitos na rede cristalina é uma das maneiras do elétron sofrer um espalhamento. Nesta categoria se enquadram os seguintes mecanismos: espalhamento por impurezas ionizadas, impurezas neutras, defeitos do cristal e espalhamento de liga. O espalhamento mais relevante dentre estes é o espalhamento por impurezas ionizadas. Os outros mecanismos só serão relevantes em condições muito

especiais.

Espalhamento por Impurezas

O espalhamento por impurezas em regiões densamente dopadas perturba o movimento dos elétrons, estas impurezas estão distribuídas randomicamente no material. O fato de que neste mecanismo a colisão é de natureza elástica impede que ele sozinho controle o processo de transporte, é necessário haver algum outro tipo de mecanismo dissipativo. O motivo para isto é óbvio, em materiais reais não há aumento contínuo de energia, para tanto deve haver um mecanismo que dissipe a energia dos elétrons no interior do cristal.

Na literatura a taxa de espalhamento para este mecanismo têm duas diferentes formulações: a de Conwell e Weisskopf[11] (CW), e a de Brooks e Herring[12](BH). Unificando estas duas formulações obtêm-se a expressão geral para a probabilidade por unidade de tempo que é dada por:

$$W(\varepsilon) = \frac{(2m^*)^{-\frac{1}{2}}}{8\pi} N_I \left(\frac{Ze^2}{\varepsilon_s} \right)^2 \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{2\varepsilon(1 - \cos \theta_m) + \varepsilon_{\lambda_d}} - \frac{1}{4\varepsilon + \varepsilon_{\lambda_d}} \right]. \quad (2.42)$$

onde o termo ε_{λ_d} é dado por:

$$\varepsilon_{\lambda_d} = \frac{\hbar^2 \lambda_d^2}{2m}, \quad (2.43)$$

o termo λ_d é dado pela equação (2.33), N_I é a concentração de impurezas, Z e a carga da impureza

Para o caso BH o cosseno é igual a 1, assim a equação (2.42) ficará com o seguinte formato:

$$W(\varepsilon) = \frac{N_I}{2\pi} \left(\frac{Ze^2}{\varepsilon_s \varepsilon_{\lambda_d}} \right)^2 \left(\frac{\varepsilon}{2m^*} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{4\varepsilon}{\varepsilon_{\lambda_d}} + 1 \right)^{-1}. \quad (2.44)$$

Na abordagem CW, $\varepsilon_{\lambda_d} = 0$, e substituindo esta igualdade na equação (2.42) e usando a expressão[4]:

$$\frac{\varepsilon_b}{\varepsilon} = \tan \frac{\theta_m}{2}. \quad (2.45)$$

Obtemos a seguinte expressão para o modelo CW:

$$W(\varepsilon) = \frac{N_I}{8\pi} (Zb)^2 \left(\frac{\varepsilon}{2m^*} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.46)$$

onde ε_b é dado pela seguinte equação:

$$\varepsilon_b = \frac{e^2}{\kappa b}, \quad (2.47)$$

$$b = \frac{N_i^{-\frac{1}{3}}}{2}. \quad (2.48)$$

onde b é a distância média entre as impurezas.

Em alguns casos é mais conveniente usar a abordagem CW e em outros a BH. Em baixas temperaturas, ou quando temos um alto grau de compensação, poucos portadores livres estão disponíveis para separar as impurezas ionizadas, as quais no entanto estão efetivamente separadas umas das outras, nestas condições a abordagem CW é mais conveniente. No entanto, quando cada impureza ionizada produz um portador livre podemos substituir n por N_i na expressão de λ_d . A taxa de espalhamento por impurezas utilizando o método BH para o vale Γ no GaAs é apresentada na figura 2.8.

Para as outras taxas de espalhamento envolvendo defeitos colocaremos apenas a taxa de espalhamento na forma final.

Espalhamento por Impurezas Neutras

O espalhamento por impurezas neutras é relevante somente à temperaturas muito baixas. O modo com que estas impurezas interagem com o elétron é bem diferente dos considerados anteriormente. A interação ocorre quando um elétron chega a uma distância bem curta de uma impureza neutra de modo que as ligações e os elétrons possam trocar de lugar, neste processo o elétron muda seu momento quebrando a simetria do cristal perfeito. Para este mecanismo Erginsoy e Sclar encontraram expressões para a taxa de espalhamento. A expressão encontrada por Erginsoy é [13]:

$$W(\mathbf{k}) = \frac{20a_0 N_n \hbar}{m^*}, \quad (2.49)$$

e a de Sclar[14] é:

$$W(\mathbf{k}) = \frac{\pi N_n e^4}{\sqrt{2m^*} \varepsilon^{\frac{3}{2}}} \left[\ln \left(1 + \frac{k}{\lambda_d} \right)^2 - \left(1 + \frac{\lambda_d^2}{k^2} \right)^{-1} \right], \quad (2.50)$$

definido N_n como a concentração de impurezas neutras.

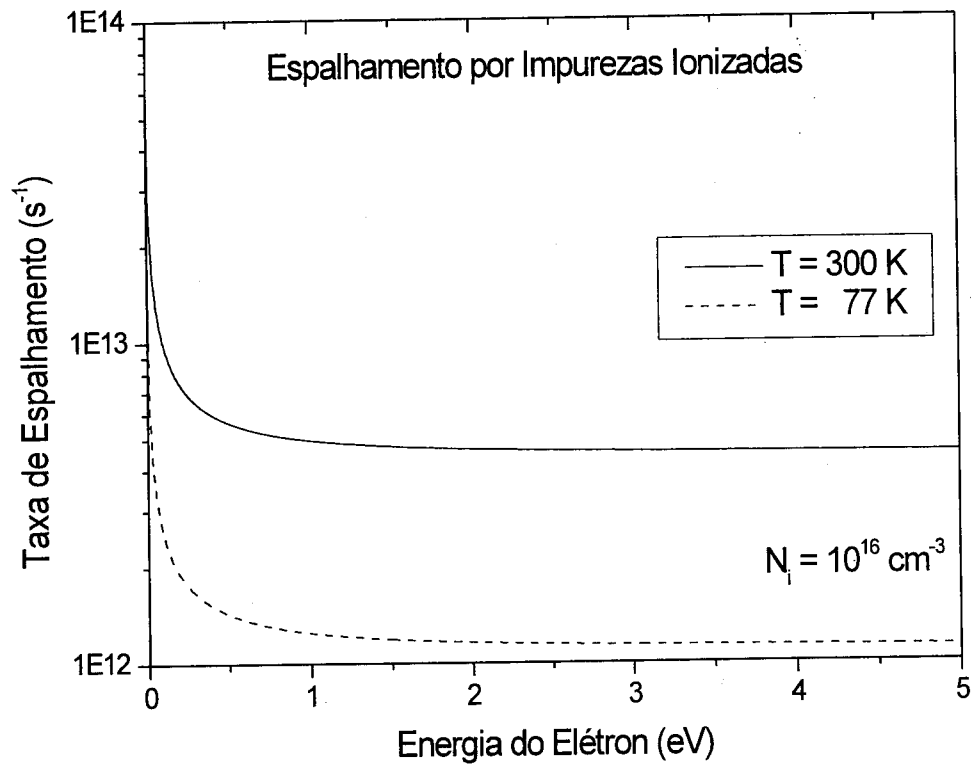


Figura 2.8: Taxa de espalhamento resultante do mecanismo de impurezas ionizadas no vale Γ do GaAs para $T = 77\text{K}$ e $T = 300\text{K}$.

Nota-se claramente que há uma diferença significativa entre as duas expressões. Na proposta por Sclar observamos uma dependência da energia enquanto que a de Erginsoy não depende da energia. A natureza deste mecanismo é ainda pouco estudada e não foram feitos estudos com a profundidade necessária, porém alguns trabalhos parecem favorecer a expressão de Sclar [10].

Espalhamento de liga

Em componentes semicondutores mistos, no caso em que a composição não é inteiramente homogênea, há uma descontinuidade distribuída randomicamente. Estas flutuações atuam como centros espalhadores, de forma semelhante ao potencial de deformação associado às ondas elásticas. A expressão para este mecanismo foi calculada por Harrison e Hauser[15], e sua expressão supondo que a relação de dispersão seja parabólica é dada por:

$$W(\mathbf{k}) = \frac{3\pi}{16\hbar} c_r^3 \frac{U_0^2}{4} x(1-x) D_{de}(\varepsilon), \quad (2.51)$$

onde c_r é a constante de rede, U_0 é o potencial de liga, $D_{de}(\varepsilon)$ é a densidade de estados e x é a porcentagem de um material que compõe a liga. Como os estudos ainda são incipientes a expressão dada por Harrison pode necessitar de algumas correções, mas esta pode ser usada como ponto de partida. Estudos realizados em ligas indicam que a inclusão deste mecanismo seria necessária para corrigir pequenas diferenças entre o resultado experimental e o teórico. Suspeita-se que este mecanismo seja relevante e que seja necessário incluí-lo nos cálculos para a obtenção de valores corretos das quantidades desejadas no estudo de ligas semicondutoras.

Espalhamento de Defeitos

Tensões internas nos átomos do cristal podem produzir deslocamentos e perturbar a rede e assim espalhar os elétrons. Podemos também ter aceitadores que podem ser espalhados por estas cargas. A expressão válida para uma relação de dispersão parabólica é [16]:

$$W(\mathbf{k}) = \frac{N_{def} e^4 f_d(k)^2}{8\lambda_d \kappa^2 a_d^2 m^{*2}} \left[V_t^2 + \frac{\hbar^2}{(4m^{*2} \tau_d^2)} \right]^{-\frac{3}{2}}, \quad (2.52)$$

onde V_t é a componente da velocidade perpendicular do elétron nas linhas de deslocamento, N_{def} é a densidade de centros de deslocamento, $f_d(k)$ é a função distribuição e τ_d é o tempo de relaxação dielétrica.

A contribuição deste mecanismo para o transporte na maioria dos materiais estudados não é importante. O espalhamento por defeitos é desprezível em relação a outros mecanismos. Contudo em alguns casos este mecanismo têm ajudado a explicar alguns fenômenos para certos materiais [10].

2.2.6 Taxas de Espalhamento para Buracos

Para calcularmos adequadamente as propriedades de transporte em semicondutores cujos portadores majoritários são buracos, é necessário obtermos as taxas de espalhamento para buracos, levando-se em conta as peculiaridades da banda de valência. Há uma quantidade menor de material para buracos na literatura, dentre os vários motivos a existência de algumas dificuldades adicionais, tais como: 1) a complicada estrutura de banda dos buracos com duas bandas degeneradas em $k = 0$ para semicondutores de estrutura "zinc-blend", à qual é responsável pelo transporte de dois tipos de portadores (buracos leve e pesado). 2) No cálculo das taxas de espalhamento deve-se considerar que para buracos a função de onda é predominantemente do tipo-p [17]. 3) O modo polar óptico não pode ser adequadamente descrito por métodos simples e diretos [18]. Inicialmente costumava-se tratar o primeiro problema desacoplando as bandas e considerando apenas a banda de buracos pesados, porém atualmente sabe-se que mesmo que percentualmente pequeno a contribuição dos buracos leves na cálculo das propriedades deve ser levada em consideração. Estima-se em cerca de 20% a diferença encontrada quando a banda de buracos leves é incluída. Para solucionar os problemas 2) e 3), Costato e colaboradores [18] calcularam as taxas de espalhamento para buracos leves (BL) e buracos pesados (BP) levando em conta a simetria p.

Taxas de Transição Interbanda

A probabilidade de transição $S(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ para buracos pode ser escrita da seguinte forma:

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} B(q) G(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (2.53)$$

onde o termo $B(q)$ é proporcional à transformada de Fourier do potencial de interação e é dado pelo elemento de matriz de Frölich [19]. O termo $G(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ representa a integral de "overlap" entre o estado final e inicial. Utilizando a regra de ouro de Fermi, obtemos a seguinte expressão analítica para a probabilidade de transição por unidade de tempo para processos de absorção e emissão, representados pelas transições $1 \rightarrow 2$ e $2 \rightarrow 1$, sendo que "1" identifica a banda de buraco pesado e "2" a banda de buraco leve. Usando a regra de ouro de Fermi as seguintes expressões foram obtidas:

$$P_{12}(\mathbf{k}, \cos \theta) = \frac{B_{ib}}{2\pi\hbar^3} m_2 \frac{k'}{k'^2 + k^2 - 2kk' \cos \theta} G_{12} \left(n_{op} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right), \quad (2.54)$$

$$P_{21}(\vec{k}, \cos \theta) = \frac{B_{ib}}{2\pi\hbar^3} m_1 \frac{k'}{k'^2 + k^2 - 2kk' \cos \theta} G_{21} \left(n_{op} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right), \quad (2.55)$$

onde o termo k' pode ser escrito, no caso ($2 \rightarrow 1$), usando a seguinte expressão:

$$k' = \sqrt{\frac{m_1}{m_2} k^2 \pm \frac{2m_1 \omega_{op}}{\hbar}}, \quad (2.56)$$

n_{op} são dados de forma usual. Quando a transição é feita de ($1 \rightarrow 2$) k' pode ser escrito:

$$k' = \sqrt{\frac{m_2}{m_1} k^2 \pm \frac{2m_2 \omega_{op}}{\hbar}}. \quad (2.57)$$

Agora integrando-se sobre todos ângulos finais θ nas equações (2.54) e (2.55), obtêm-se as seguintes taxas de espalhamento [18]:

$$W_{12}(k) = \frac{B_{ib}}{2\pi\hbar^3} \frac{m_2}{k} \ln \left(\left| \frac{k+k'}{k-k'} \right| \right) \left(n_{iv} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) G_{12}(k), \quad (2.58)$$

$$W_{21}(k) = \frac{B_{ib}}{2\pi\hbar^3} \frac{m_1}{k} \ln \left(\left| \frac{k+k'}{k-k'} \right| \right) \left(n_{iv} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) G_{21}(k), \quad (2.59)$$

sendo que os termo $G_{12}(k)$ e $G_{21}(k)$ são dados pelas seguintes expressões:

$$G_{12}(k) = D(k') \left\{ 1 - \frac{k^2 + k'^2}{2kk'} \left[\frac{k^2 + k'^2}{2kk'} - \left(\ln \left(\left| \frac{k+k'}{k-k'} \right| \right) \right)^{-1} \right] \right\}, \quad (2.60)$$

$$\begin{aligned}
D(k') &= \left(\frac{1}{4} [b_{v2}(k') + \sqrt{2}c_{v2}(k')]^2 \right) \\
G_{21}(k) &= Q(k) \left\{ 1 - \frac{k^2 + k'^2}{2kk'} \left[\frac{k^2 + k'^2}{2kk'} - \left(\ln \left(\left| \frac{k+k'}{k-k'} \right| \right) \right)^{-1} \right] \right\}, \\
Q(k) &= \left(\frac{1}{4} [b_{v2}(k) + \sqrt{2}c_{v2}(k)]^2 \right)
\end{aligned} \tag{2.61}$$

onde os termos b_{v2} e c_{v2} foram calculados por Wiley [20], e usados no cálculo da taxa de espalhamento.

Espalhamento Polar Óptico (intrabanda)

Para o espalhamento polar óptico no caso de buracos, adotamos o modelo baseado na abordagem do potencial de deformação. Mesmo considerando a função de onda do buraco e levando-se em conta a estrutura da banda de valência, este mecanismo será considerado como isotrópico [21]. A probabilidade de transição $S(k, k')$ considerando uma banda do tipo "warp", será:

$$S(k, k') = \frac{3\pi\Xi_{opb}^2}{2\rho V\omega_{op}a^2} \left(n_{op} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k \mp \hbar\omega_{op}), \tag{2.62}$$

onde Ξ_{opb} é o potencial de deformação óptico. Destacamos que quando $\varepsilon_k \leq \hbar\omega_{op}$, a probabilidade de emissão é zero. Integrando a equação (2.62) sobre todos os possíveis estados finais de \vec{k}' , obtemos a seguinte probabilidade de espalhamento por unidade de tempo:

$$W(\varepsilon) = \frac{3\Xi_{opb}^2 m_h^{3/2}}{2^{3/2}\pi\rho\hbar^3\omega_{op}} \left(n_{op} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \sqrt{(\varepsilon_k \pm \hbar\omega_{op})}, \tag{2.63}$$

$$m_h^{*3/2} = \frac{m_0^{3/2}}{4\pi|A|^{3/2}} \int_0^{2\pi} d\psi' \int_0^\pi \sin\vartheta' (1 \mp g(\vartheta', \psi'))^{-3/2} d\vartheta', \tag{2.64}$$

considerando que θ é o ângulo entre k e k' , ϑ' e ψ' são os ângulos finais do portador. O sinal de \mp do termo $(n_{op} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2})$ diz respeito a absorção e emissão, por outro lado, o termo \mp do termo $(1 \mp g(\vartheta', \psi'))$ designa a banda de buraco pesado e leve respectivamente.

Fônons Acústicos (espalhamento intrabanda)

Devido à própria característica da banda de valência, com peculiaridades de degenerescência e "warp", é necessário incluir no cálculo um fator de "overlap". Para buracos,

este fator é dado com uma boa aproximação pela equação (2.20). Apesar de que na literatura é mencionado que seria necessário utilizar três parâmetros para o potencial de deformação [21], para evitar dificuldades analíticas e também para se ter uma visualização mais fácil do problema, optamos por uma única constante que engloba as outras três. Considerando a banda de valência "warp" para buracos, a probabilidade de transição $S(k,k')$ torna-se neste caso:

$$S(k, k') = \frac{\pi q \Xi_{acb}^2}{V \rho v_s} \left(n_{ac} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \frac{1}{4} (1 + 3 \cos^2 \theta) \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k \mp \hbar q v_s), \quad (2.65)$$

onde o parâmetro de potencial de deformação é dado pelo símbolo Ξ_{acb} , e $\cos \theta$ pode ser escrito em termos dos ângulos final e inicial, pela seguinte equação:

$$\cos \theta = \cos \vartheta' \cos \vartheta + \sin \vartheta' \sin \vartheta \cos(\psi - \psi'). \quad (2.66)$$

Para integrar a equação (2.65), substitui-se com uma boa aproximação q por $2^{1/2} (1 - \cos \theta)^{1/2}$. Para obter-se a taxa de espalhamento final usamos[4] a "aproximação quase elástica":

$$(\varepsilon \pm \hbar q v_s)^{1/2} \simeq \varepsilon^{1/2} \left(1 \pm \frac{\hbar q v_s}{2\varepsilon} \right), \quad (2.67)$$

e a "aproximação warp suave":

$$a_v (1 \mp g(\vartheta', \psi')) = \frac{\hbar^2}{2m_h^*}.$$

A primeira aproximação é razoável até temperaturas da ordem de 10 K, enquanto a "aproximação warp suave" é razoável em todo o intervalo de temperatura, deve-se substituir a massa efetiva da densidade de estados pela massa efetiva que depende na banda "warp" [22], ou seja, substituir a massa efetiva pela equação (2.64). Utilizando estas aproximações obtemos a seguinte probabilidade de espalhamento para absorção:

$$W(\varepsilon) = \frac{\sqrt{m_h^*} (k_b T)^3 \Xi_{acb}^2}{2^{9/2} \pi \rho v_s^4 \hbar^4} \varepsilon^{-1/2} \left\{ F_3(x) + \frac{k_b T}{\varepsilon} F_4(x) \right\}, \quad (2.68)$$

e para emissão:

$$W(\varepsilon) = \frac{\sqrt{m_h^*} (k_b T)^3 \Xi_{acb}^2}{2^{9/2} \pi \rho v_s^4 \hbar^4} \varepsilon^{-1/2} \left\{ G_3(x) - \frac{k_b T}{\varepsilon} G_4(x) \right\}, \quad (2.69)$$

onde $x = \left(\frac{2\sqrt{m_i^*} v_s \epsilon^{1/2}}{k_b T} \right)$, e as funções $F_3(x)$, $F_4(x)$, $G_3(x)$ e $G_4(x)$ podem ser calculadas a partir das seguintes expressões:

$$F_3(x) = \int_0^{\sqrt{2x}} \frac{z^2 \left(1 + 3 \left(1 - \left(\frac{z}{x} \right)^2 \right)^2 \right)}{\exp(z) - 1} dz, \quad (2.70)$$

$$F_4(x) = \int_0^{\sqrt{2x}} \frac{z^3 \left(1 + 3 \left(1 - \left(\frac{z}{x} \right)^2 \right)^2 \right)}{\exp(z) - 1} dz, \quad (2.71)$$

$$G_3(x) = \int_0^{\sqrt{2x}} \frac{z^2 \left(1 + 3 \left(1 - \left(\frac{z}{x} \right)^2 \right)^2 \right)}{1 - \exp(-z)} dz, \quad (2.72)$$

$$G_4(x) = \int_0^{\sqrt{2x}} \frac{z^3 \left(1 + 3 \left(1 - \left(\frac{z}{x} \right)^2 \right)^2 \right)}{1 - \exp(-z)} dz. \quad (2.73)$$

Estas integrais podem ser resolvidas numericamente, porém uma boa aproximação para o seu cálculo é apresentada no apêndice A.

Impurezas Ionizadas

Usando a abordagem proposta por Jacoboni e Lugli [4] para as taxas de espalhamento para buracos empregando os métodos CW e BH, têm-se:

$$W^{CW}(\epsilon) = F^{CW-BH}(\epsilon) \left[\frac{1}{1 - \cos \theta_m} + \frac{3 \cos \theta_m - 6 \ln(2) + 6 \ln(1 - \cos \theta_m) + 1}{4} \right], \quad (2.74)$$

$$W^{BH}(\epsilon) = F^{CW-BH}(\epsilon) \left[3 + \frac{2\epsilon}{\epsilon_{qd}} - \frac{2}{4 + \left(\frac{\epsilon \lambda_d}{\epsilon} \right)} + \frac{3 \left(2 + \left(\frac{\epsilon \lambda_d}{\epsilon} \right) \right)}{4} \ln \left(\frac{\epsilon \lambda_d}{4 + \left(\frac{\epsilon \lambda_d}{\epsilon} \right)} \right) \right], \quad (2.75)$$

$$F^{CW-BH}(\epsilon) = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\pi Z^2 N_I}{2^{1/2} \kappa_0^2 m_i^{1/2}} \epsilon^{-1/2},$$

onde $\theta_m = 2 \tan^{-1} \left(\frac{\epsilon_{CW}}{\epsilon} \right)$ é o ângulo de espalhamento mínimo, $\epsilon_{CW} = \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 \kappa_0 b} \right)$, e o termo $\epsilon \lambda_d$ é dado pela equação (2.43). Considerou-se apenas o espalhamento intrabanda, mesmo assim há diferenças entre os dois métodos utilizados. No método CW, ângulos menores que θ_m , não são considerados, enquanto na abordagem BH todos os ângulos são permitidos. Briggs [23] e colaboradores utilizaram ambos os métodos em cálculos de transporte no SiGe

e os cálculos demonstram uma diferença significativa entre os dois métodos para valores de concentração acima de 10^{16} cm^{-3} .

2.2.7 Ionização por Impacto

Neste mecanismo, ao contrário dos anteriores, a taxa de espalhamento não foi deduzida pela teoria de perturbação. Keldish obteve um modelo fenomenológico para este tipo de mecanismo. Fisicamente o que ocorre é que um portador com energia suficiente pode liberar um elétron (buraco) da banda de valência (condução) para a banda de condução (valência). Quando isto ocorre, o elétron (buraco) que foi liberado deixa para trás um buraco (elétron) na banda de valência (condução), ou seja, este processo cria um elétron e um buraco adicionais no semiconductor. Usando a conservação de energia para este mecanismo teremos:

$$\varepsilon_k = \varepsilon_{k_e} + \varepsilon_{k_b} + E_G, \quad (2.76)$$

onde ε_{k_e} e ε_{k_b} representam as estruturas da banda de condução e valência respectivamente, e E_G o "gap". Conseqüentemente o portador que for responsável por este mecanismo, deve ter uma energia no mínimo igual ao "gap". A conservação de momento exige que:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_e + \mathbf{k}_b, \quad (2.77)$$

sendo que, \mathbf{k}_e e \mathbf{k}_b são respectivamente o vetor de onda do elétron e do buraco.

A expressão obtida por Keldish é bem simples porém vários autores conseguiram bons resultados utilizando esta abordagem. A taxa de espalhamento formulada por Keldish é [24]:

$$W(\varepsilon) = C_{ii} \left[\frac{(\varepsilon - \varepsilon_{ii})}{\varepsilon_{ii}} \right]^2, \quad (2.78)$$

onde ε_{ii} representa o mínimo de energia necessária para que o processo de ionização por impacto ocorra. O parâmetro C_{ii} é normalmente determinado empiricamente.

Devido a que o processo de ionização por impacto necessitar de uma energia mínima da ordem do "gap" do material para iniciar o fenômeno, este normalmente torna-se efetivo em altos campos elétricos (tipicamente da ordem 10 kV/cm ou mais). Quando este processo é iniciado pode causar uma ruptura do material semiconductor. Conseqüentemente isto limita a aplicação de transistores de alta potência, por outro lado, o mecanismo de ionização por impacto, pode ser explorado em detectores de avalanche [8].

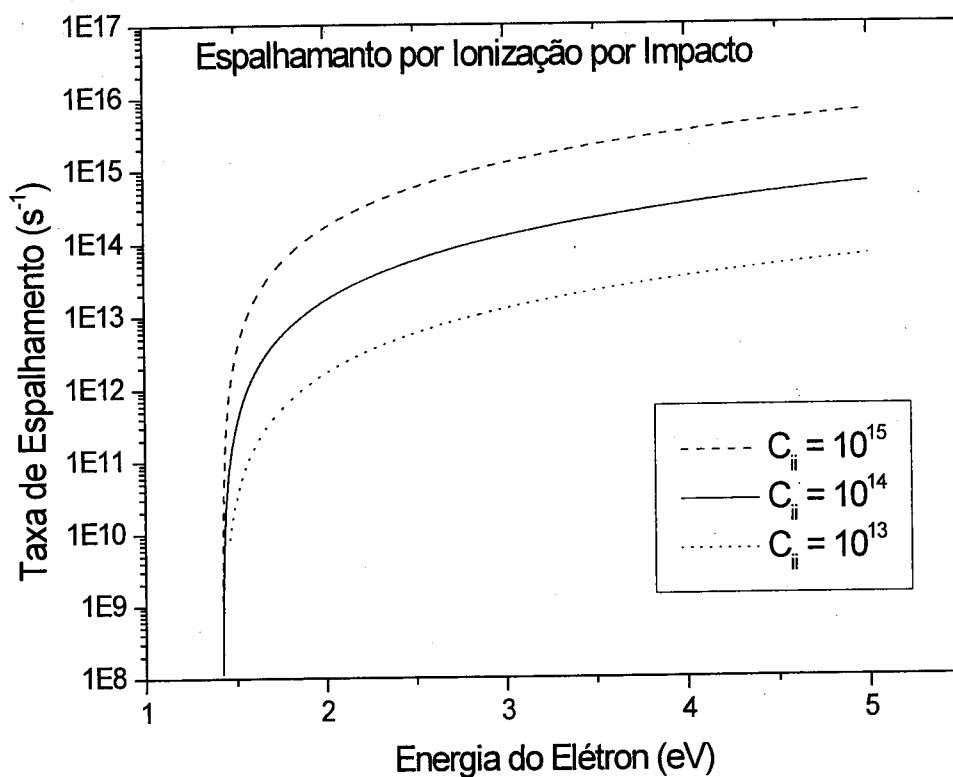


Figura 2.9: Taxa de espalhamento do mecanismo de ionização por impacto para três valores de C_{ii} no GaAs. As taxas foram calculadas usando o modelo de Keldish.

Outro ponto interessante de incluir este mecanismo é a possibilidade de estudar o material em campos mais altos e obter novas quantidades físicas. Quando inclui-se este mecanismo é possível por exemplo calcular o coeficiente de ionização do material.

A taxa de espalhamento do mecanismo de impacto por ionização do GaAs para três diferentes parâmetros C_{ii} está apresentada na figura 2.9. Nota-se que este mecanismo tem uma energia limite a qual, o mecanismo começa a se tornar efetivo, sendo que esta energia é igual ao "gap" do material em questão, pois a partir deste valor, o elétron têm energia suficiente para sair da banda de valência e ser transferido para a banda de condução.

Desde que Keldish apresentou seu modelo para o fenômeno da ionização por impacto, vários autores estudaram este mesmo fenômeno e apresentaram variações da expressão de Keldish [25], ou propuseram seu próprio modelo para este mecanismo [8],[26]. Porém o modelo apresentado por Keldish ainda é popular devido a sua simplicidade aliada

aos bons resultados obtidos.

2.2.8 Taxa de Espalhamento Total

Na figura 2.10 nós apresentaremos a taxa de espalhamento total calculada para o GaAs a temperatura ambiente. Os seguintes mecanismos de espalhamento foram incluídos neste cálculo: fônons polar óptico, fônons acústico (inelástico), piezoelétrico, intervalle, intravale e impurezas ionizadas. Os parâmetros utilizados para calcular estas taxas de espalhamento estão disponíveis no capítulo 3, na tabela 3.1.

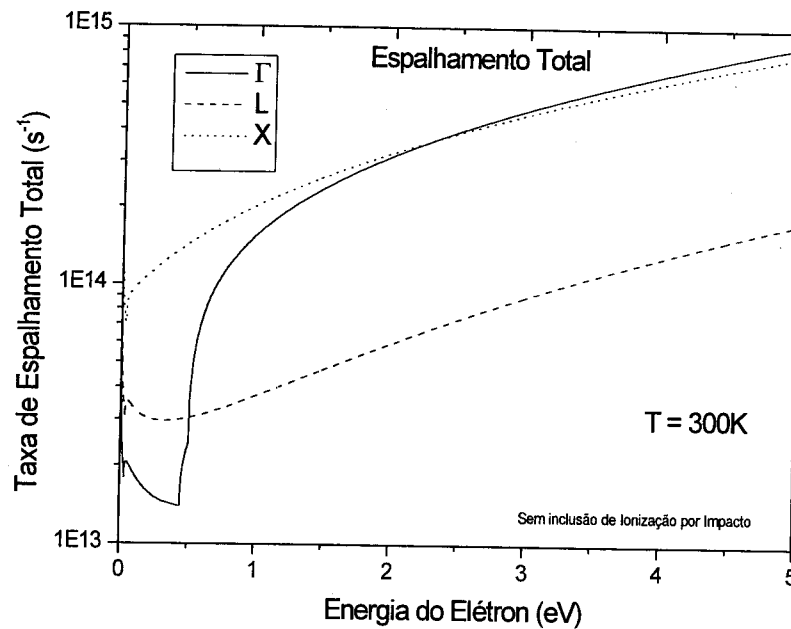


Figura 2.10: Taxa de espalhamento total para o GaAs sem a inclusão do mecanismo de ionização por impacto.

Apresentamos a taxa de espalhamento total calculada para os três pontos de simetria do GaAs a uma temperatura de 300K (figura 2.10). Em baixas energias devido a que algumas taxas aumentam e outras diminuem, a taxa de espalhamento total têm um comportamento um pouco excêntrico, voltando a aumentar a medida com que a energia do elétron aumenta.

2.2.9 Espalhamento por Rugosidade da Interface

A função do espalhamento por rugosidade(ER) em uma super-rede foi proposta por Dharssi e Butcher[27]. Eles usaram a regra de ouro de Fermi para calcular as taxas de espalhamento e a usaram na equação de transporte de Boltzmann para calcular a mobilidade. A partir deste modelo eles observaram que este mecanismo é fundamental para a compreensão das propriedades de transporte de uma super-rede.

A formulação deste mecanismo segundo Dharssi, supõe uma variação na interface, Δ_{ER} , que é definida como a raiz quadrática média da altura da rugosidade. Supondo que este espalhamento varia lentamente e que o modelo gaussiano foi adotado, o elemento de matriz será:

$$|\langle k | H_{ER} | k' \rangle|^2 = 2\pi V_0^2 \frac{d}{V} \Psi_{ER}^4(a) \Delta_{ER}^2 L^2 \exp\left(-\frac{L^2}{4} (\mathbf{k}'_{//} - \mathbf{k}_{//})^2\right), \quad (2.79)$$

onde $\Psi_{ER}(r)$ é a função de onda normalizada, L é a largura da rugosidade e $\mathbf{k}_{//} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$. Usando a regra de ouro de Fermi, obtemos:

$$W(k) = \frac{d}{2\pi\hbar} V_0^2 \Psi_{ER}^4(a) \Delta_{ER}^2 L^2 \int_{-\frac{\pi}{d}}^{\frac{\pi}{d}} dk'_z \int \exp\left(-\frac{L^2}{4} (\mathbf{k}'_{//} - \mathbf{k}_{//})^2\right) \delta(\varepsilon - \varepsilon') d^2 \mathbf{k}'_{//}. \quad (2.80)$$

Este modelo também foi utilizado por Palmier e colaboradores[28], usando a equação de Boltzmann em um modelo mais sofisticado do que de Dharssi.

2.3 Escolha do Estado Final do Portador

Uma vez que um mecanismo de espalhamento foi responsável pelo final do movimento livre do elétron, é necessário determinar o estado final do elétron. Caso o mecanismo escolhido tenha sido o auto-espalhamento [4] (como veremos no capítulo seguinte) o estado final deste elétron será o mesmo que o inicial. Contudo, caso um espalhamento real seja selecionado, as componentes do vetor de onda final devem ser determinadas estocasticamente, levando-se em conta a seção de choque diferencial de cada mecanismo. Discutiremos a seguir as técnicas utilizadas para selecionar estes estados. Os mecanismos de espalhamento não mencionados nesta seção serão considerados como mecanismos isotrópicos.

2.3.1 Espalhamento Isotrópico

Considera-se que um espalhamento é isotrópico quando o centro espalhador não tem nenhuma direção preferencial. Isto significa que qualquer estado \mathbf{k}' no interior da esfera de conservação de energia têm a mesma probabilidade de ser escolhido independente do ângulo entre \mathbf{k} e \mathbf{k}' . Se o espalhamento é isotrópico então todas as direções serão igualmente prováveis, então para calcularmos k'_x , k'_y e k'_z , basta gerar dois números randômicos independentes r_1 e r_2 entre 0 e 1 e obter as quantidades abaixo:

$$\cos \theta' = 1 - 2r_2, \quad (2.81)$$

$$\phi' = 2\pi r_1. \quad (2.82)$$

Calculados os ângulos, as componentes são geradas a partir das expressões:

$$\begin{aligned} k'_x &= k' \sin \theta' \cos \phi', \\ k'_y &= k' \sin \theta' \sin \phi', \\ k'_z &= k' \cos \theta'. \end{aligned} \quad (2.83)$$

No caso do espalhamento isotrópico em bandas elipsoidais, o vetor de onda em termos do sistema de coordenadas fixo é encontrado a partir da transformação de Herring-Vogt[29], que é dada pela equação:

$$\mathbf{k}^* = U\mathbf{k}, \quad (2.84)$$

onde U é a matriz:

$$U = \begin{bmatrix} \left(\frac{m_d}{m_x}\right)^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & \left(\frac{m_d}{m_y}\right)^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{m_d}{m_z}\right)^{1/2} \end{bmatrix}. \quad (2.85)$$

Sendo que a energia neste caso é dada por:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x^*} + \frac{k_y^2}{m_y^*} + \frac{k_z^2}{m_z^*} \right) = \frac{(\hbar k^*)^2}{2m_d}. \quad (2.86)$$

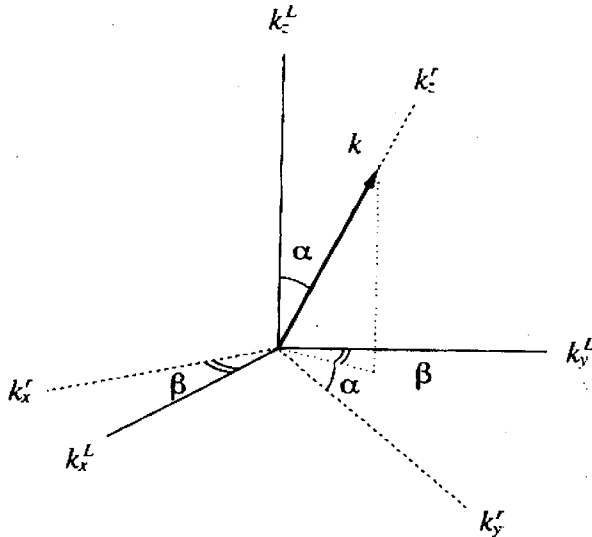


Figura 2.11: Relação entre as coordenadas fixas (k_x^L, k_y^L, k_z^L) e as novas coordenadas (k_x^r, k_y^r, k_z^r).

Estas expressões são válidas somente para o caso isotrópico. Exemplos de espalhamento isotrópico são: Polar Acústico, para o caso de bandas parabólicas e colisões elásticas na aproximação de equipartição de energia; Polar Acústico, para o caso de bandas elipsoidais e colisões elásticas na aproximação de equipartição (é isotrópico no espaço de Herring-Vogt), para citar alguns casos.

2.3.2 Espalhamento anisotrópico

No caso isotrópico encontrar as componentes de k' não é um procedimento trabalhoso. No entanto, ao nos depararmos com espalhamentos anisotrópicos, devemos proceder de maneira diferente. Discutiremos aqui como calcular as componentes k_x', k_y' e k_z' . Inicialmente tomamos um sistema de referencial fixo (k_x^L, k_y^L, k_z^L), e em seguida realizamos os cálculos para um novo sistema de coordenadas (k_x^r, k_y^r, k_z^r). Vamos por conveniência colocar o eixo z paralelo ao vetor de onda inicial \mathbf{k} . Este novo sistema de referência está ilustrado na figura 2.11.

Fazendo a transformação de (k_x^L, k_y^L, k_z^L) para o (k_x^r, k_y^r, k_z^r) , obtemos:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta & -\sin \beta & 0 \\ \sin \beta & \cos \beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = A_{ani}, \quad (2.87)$$

onde a matriz A_{ani} é dada pela seguinte expressão:

$$A_{ani} = \begin{bmatrix} \cos \beta & -\sin \beta & 0 \\ \cos \alpha \sin \beta & \cos \alpha \cos \beta & -\sin \alpha \\ \sin \alpha \sin \beta & \sin \alpha \cos \beta & \cos \alpha \end{bmatrix}. \quad (2.88)$$

As componentes do vetor \mathbf{k} no sistema (k_x^r, k_y^r, k_z^r) são dadas por:

$$k_x = k' \sin \theta \cos \phi, \quad (2.89)$$

$$k_y = k' \sin \theta \sin \phi,$$

$$k_z = k' \cos \theta.$$

Invertendo a matriz da equação (2.88), obtemos as relações de senos e cossenos em função de \mathbf{k} :

$$\begin{aligned} \sin \alpha &= \frac{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k}, & \sin \alpha &= \frac{k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}, \\ \cos \alpha &= \frac{k_z}{k}, & \cos \beta &= \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}. \end{aligned} \quad (2.90)$$

As componentes do vetor de onda \mathbf{k}' em termos do sistema de coordenadas (k_x^L, k_y^L, k_z^L) são:

$$\begin{pmatrix} k_x' \\ k_y' \\ k_z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x k_y}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x}{k} \\ \frac{-k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y}{k} \\ 0 & \frac{-\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k} & \frac{k_z}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k' \sin \theta \cos \phi \\ k' \sin \theta \sin \phi \\ k' \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (2.91)$$

A partir desta expressão as componentes do vetor \mathbf{k}' podem ser calculadas para o caso do espalhamento anisotrópico, como o polar óptico e o por impurezas. O ângulo ϕ é dado pela equação (2.82) e o ângulo θ pode ser obtido de várias formas dependendo do mecanismo a ser selecionado. O método de se obter o ângulo θ será tratado nas seções seguintes.

2.3.3 Escolha do estado final (elétrons)

Espalhamento Polar Óptico: Caso Parabólico - Interação Eletrostática

Neste mecanismo a energia do fônon não é desprezível frente a $k_B T$, sendo portanto um processo inelástico. Desde que este mecanismo não é isotrópico, é necessário encontrar a relação para a qual o ângulo de espalhamento é determinado. Calculando a razão entre as probabilidades de espalhamento entre 0 e θ , obtemos:

$$\frac{W(\theta)}{W(\mathbf{k})} = \frac{\int_{q_{\min}}^{q_{\theta}} \int_{-1}^1 \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta_q \mp \frac{\hbar\omega_{op}}{\varepsilon} \frac{k}{2q}\right) dq d(\cos \theta)}{\int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \int_{-1}^1 \frac{1}{q} \delta\left(\frac{q}{2k} \pm \cos \theta_q \mp \frac{\hbar\omega_{op}}{\varepsilon} \frac{k}{2q}\right) dq d(\cos \theta)} = \frac{\ln\left(\frac{q_{\theta}}{q_{\min}}\right)}{\ln\left(\frac{q_{\max}}{q_{\min}}\right)} = r. \quad (2.92)$$

Como o termo está no intervalo $0 \leq \frac{W(\theta)}{W(\mathbf{k})} \leq 1$ e $\frac{W(\theta)}{W(\mathbf{k})}$ aumenta monotonicamente com o aumento de θ , o ângulo de espalhamento pode ser determinado usando a equação (2.92), a partir da introdução de um número randômico r , no lugar de $\frac{W(\theta)}{W(\mathbf{k})}$. Utilizando as relações:

$$q_{\theta}^2 = k'^2 + k^2 - 2k'k \cos \theta, \quad (2.93)$$

$$q_{\max}^2 = k'^2 + k^2 + 2k'k, \quad (2.94)$$

$$q_{\min}^2 = k'^2 + k^2 - 2k'k. \quad (2.95)$$

Obtemos a seguinte relação para θ :

$$\cos \theta = \frac{1 + f_{op} - (1 + 2f_{op})^r}{f_{op}}, \quad (2.96)$$

onde f_{op} é dado pela seguinte relação:

$$f_{op} = \frac{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon'}}{(\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon'})^2}. \quad (2.97)$$

Espalhamento de fônons Acústicos (piezoelétricos)

Para o mecanismo de espalhamento piezoelétrico, a probabilidade para que um elétron seja espalhado em um ângulo θ é dada por[4]:

$$P(\theta) = C_1 \frac{(1 - \cos \theta) \sin \theta}{[\lambda_d^2 + 2k^2(1 - \cos \theta)]^2}, \quad (2.98)$$

onde C_1 é uma constante de normalização. Para obtermos uma expressão relacionando r e θ escrevemos:

$$r = \frac{\int_0^\theta P(\theta) d\theta}{\int_0^\pi P(\theta) d\theta}. \quad (2.99)$$

Depois de um longo cálculo analítico obtemos a seguinte expressão:

$$r \left[\ln \left(1 + \frac{4k^2}{\lambda_d^2} \right) - \left(\frac{1}{1 + \frac{\lambda_d^2}{4k^2}} \right) \right] = \ln \left(1 + \frac{2k^2}{\lambda_d^2} (1 - \cos \theta) \right) - \frac{1 - \cos \theta}{1 - \cos \theta + \frac{\lambda_d^2}{2k^2}}. \quad (2.100)$$

Mesmo não sendo uma expressão direta, podemos encontrar θ numericamente.

Espalhamento por Impurezas

A probabilidade de espalhamento do mecanismo de impurezas ionizadas pode ser encontrada a partir da regra de ouro de Fermi, e é escrita[4, 6]:

$$P(\theta) d\theta = \frac{N_I}{4\pi} \left(\frac{Ze^2}{\kappa} \right)^2 \left(\frac{\varepsilon}{2m^*} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\sin \theta d\theta}{[2\varepsilon(1 - \cos \theta) + \varepsilon_{\lambda_d}]^2}. \quad (2.101)$$

A probabilidade de espalhamento entre 0 e θ é obtida integrando-se a equação (2.101). Para obtermos a relação entre θ e o número randômico, devemos dividir $W(\theta)$ por $W(\mathbf{k})$, usando o mesmo procedimento realizado anteriormente (espalhamento polar óptico). Obtemos assim:

$$\frac{W(\theta)}{W(\mathbf{k})} = \frac{(-2\varepsilon + 2\varepsilon \cos \theta_m + \varepsilon_{\lambda_d})(4\varepsilon + \varepsilon_{\lambda_d})}{1 + \cos \theta_m} \int_0^\theta \frac{\sin \theta d\theta}{[2\varepsilon(1 - \cos \theta) + \varepsilon_{\lambda_d}]^2}. \quad (2.102)$$

Lembrando que o termo $\frac{W(\theta)}{W(\mathbf{k})}$ têm valor no intervalo entre 0 e 1, quando integrarmos (2.102) e rearranjarmos os termos teremos:

$$r = \frac{(-2\varepsilon + 2\varepsilon \cos \theta_m - \varepsilon_{\lambda_d})(1 + \cos \theta)}{1 + \cos \theta_m (2\varepsilon(1 - \cos \theta) + \varepsilon_{\lambda_d})}. \quad (2.103)$$

Para obtermos a relação do cosseno com o número randômico no modelo CW usamos a expressão (2.45) e como neste caso o termo ε_{λ_d} é igual a zero, obtemos a seguinte expressão:

$$\cos \theta = \frac{\left(\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_b} \right)^2 r - 1 \right)}{\left(\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_b} \right)^2 r + 1 \right)}. \quad (2.104)$$

Na abordagem utilizada por BH, $\cos \theta_m = 1$ é substituído em (2.103), obtendo para o modelo a expressão:

$$\cos \theta = 1 - \frac{2(1-r)}{1 + 4r \frac{\varepsilon}{\varepsilon_\lambda}}. \quad (2.105)$$

O ângulo azimutal ϕ pode ser determinado usando simplesmente a equação (2.82).

2.3.4 Escolha do estado final (buracos)

Transições Intervale (buraco leve \leftrightarrow buraco pesado)

O estado final para transições entre as bandas de buracos leve e pesado são feitas usando a técnica de rejeição, a partir de uma expressão válida para ambos os casos (buraco leve \leftrightarrow buraco pesado). Usa-se a seguinte expressão[18]:

$$P_{ij}(k, \cos \theta) \propto \frac{k'}{k'^2 + k^2 - 2kk' \cos \theta} G_{ij}(k), \quad (2.106)$$

onde ij designa o buraco leve \rightarrow pesado ou buraco leve \leftarrow pesado.

Espalhamento Polar Óptico (potencial deformação)

Este mecanismo é isotrópico e como mencionado anteriormente é tratado como no método anteriormente descrito.

Espalhamento acústico

A determinação do estado final pode ser feita diretamente desde que a transformação de Herring-Vogt tenha sido aplicada. Os ângulos finais são escolhidos através de

uma técnica mista, inicialmente deve-se gerar os ângulos de acordo com as equações (2.81) e (2.82) e o vetor de onda do fônon é calculado como já descrito anteriormente. Finalmente os ângulos finais serão aceitos ou rejeitados usando a expressão[4]:

$$P_{ac} \propto \frac{(\varepsilon \pm \hbar\omega_{op})^{1/2}}{[1 \mp g(\vartheta', \psi')]^{3/2}}. \quad (2.107)$$

O estado final da energia é obtido através da conservação de energia.

Espalhamento por Impurezas

A dependência angular do estado após o espalhamento pode ser obtida para ambos os casos BH e CW, usando[4]:

$$P_{im} \propto \frac{(1 + 3 \cos^2 \theta)}{\left\{ (1 \pm g')^{3/2} \left[1 + \frac{(1 \pm g)}{(1 \pm g')} - 2 \sqrt{\frac{(1 \pm g)}{(1 \pm g')}} \cos \theta + \frac{\lambda_d^2 (1 \pm g)}{\varepsilon} \right]^2 \right\}}, \quad (2.108)$$

onde g refere-se a equação $g(\vartheta, \psi)$ e g' a $g(\vartheta', \psi')$, sendo que (ϑ', ψ') são os ângulos finais e (ϑ, ψ) os iniciais. Ainda " \pm " significa respectivamente as bandas de buraco leve e pesado. A equação acima é válida para ambos os casos, porém ela permite qualquer ângulo e portanto para o caso CW descartamos qualquer ângulo menor que θ_m e consideramos que λ_d é zero. Para o caso BH a equação (2.108) é usada sem correções. Quando vamos calcular o estado final para o buraco no espalhamento por impurezas ionizadas temos que utilizar um pequeno subterfúgio. Como a equação (2.108) na prática não pode ser utilizada na técnica de rejeição, utiliza-se o método sugerido por Jacoboni e Lugli [4] que consiste no seguinte procedimento: gera-se os ângulos com a equação para elétrons e utiliza-se então a equação (2.108) para aceitar ou rejeitar este ângulo. A técnica de rejeição está detalhada no apêndice B.

Capítulo 3

O Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo aplicado ao transporte de portadores de carga em materiais semicondutores, consiste basicamente na simulação de um ou mais portadores que percorrem o espaço dos momentos. Os portadores interagem com a rede e são submetidos a ação de forças externas tais como: campo elétrico e campo magnético. Tanto o tempo de movimento livre quanto o mecanismo que será responsável pelo final do movimento livre do portador são selecionados estocasticamente. O tempo de movimento livre é definido como o tempo entre dois espalhamentos sucessivos, sendo que a cada mecanismo de espalhamento é determinada uma probabilidade deste ser escolhido. Cada mecanismo de espalhamento agirá de uma forma diferente sobre o portador, dependendo basicamente da seção de choque diferencial do mecanismo selecionado. Como vimos no capítulo anterior, na seção da escolha do estado após o espalhamento, cada mecanismo modifica a trajetória do portador de um modo diferente. Os mecanismos de espalhamento e sua seleção em conjunto com as propriedades da estrutura de banda do problema estudado são as bases físicas do método.

Descreveremos o método de Monte Carlo na sua abordagem mais utilizada no estudo do transporte de carga em materiais semicondutores, o "Ensemble" Monte Carlo (EMC). Há outras variantes como, Weight Monte Carlo (WMC) [30], e o Monte Carlo auto-consistente que é acoplado com a equação de Poisson[5, 6, 31, 32]. Contudo estes modelos não serão tratados neste trabalho.

Na segunda seção deste capítulo, faremos um pequeno estudo para o GaAs, com o objetivo de mostrar a confiabilidade da rotina desenvolvida nos estudos posteriores.

3.1 Método Ensemble Monte Carlo (EMC)

O método Ensemble Monte Carlo pode ser ilustrado segundo o fluxograma esquematizado na figura 3.1. A partir deste esquema, comentaremos cada ponto do método separadamente para melhor compreensão e apresentaremos quando for conveniente, detalhes do algoritmo utilizado.

Definição do sistema físico: No caso do método de EMC, é necessário que se defina o tipo de material a ser estudado, os parâmetros físicos conhecidos, quais os parâmetros a serem ajustados e decidir sob que condições de temperatura e campo o material estará sujeito. Definido estes pontos, o programa irá calcular as taxas de espalhamento relevantes do problema abordado. Após calcular as taxas de espalhamento, devemos obter uma quantidade denominada Λ , que representa a taxa de espalhamento total. Seguindo o esquema descrito por Tomizawa[6], Λ é tomado como sendo o maior valor entre $\lambda_T^\Gamma(\epsilon)$, $\lambda_T^L(\epsilon)$, $\lambda_T^X(\epsilon)$ que são os valores máximos das somas das taxas de espalhamento para cada ponto de simetria. Supondo que o material tenha três pontos de simetria (GaAs) Γ , L e X , o fluxograma correspondente a escolha de Λ está apresentado na figura 3.2, onde $\lambda(1, N_1, i)$, $\lambda(2, N_2, i)$ e $\lambda(3, N_3, i)$ são as taxas de espalhamento totais para os pontos de simetria considerados no problema e N_1 , N_2 e N_3 são os números de processos de espalhamento para cada ponto de simetria. Este fluxograma representa basicamente o seguinte: depois de todos os parâmetros iniciais serem determinados, o programa calcula as taxas de espalhamento para cada ponto de simetria, somando a contribuição de cada mecanismo de espalhamento. Procedendo desta forma teremos $\lambda_T^\Gamma(\epsilon)$, $\lambda_T^L(\epsilon)$, $\lambda_T^X(\epsilon)$, para então determina-se Λ . Uma vez determinado Λ a sub-rotina termina e o programa segue para a geração das condições iniciais do problema. Apenas como último comentário, existem outros meios para determinar-se Λ , como o indicado por Lugli e Jacoboni [5].

Ainda nesta etapa do programa todas as quantidades acumulativas serão zeradas e também será introduzida as interações do portador com a rede e com impurezas através das

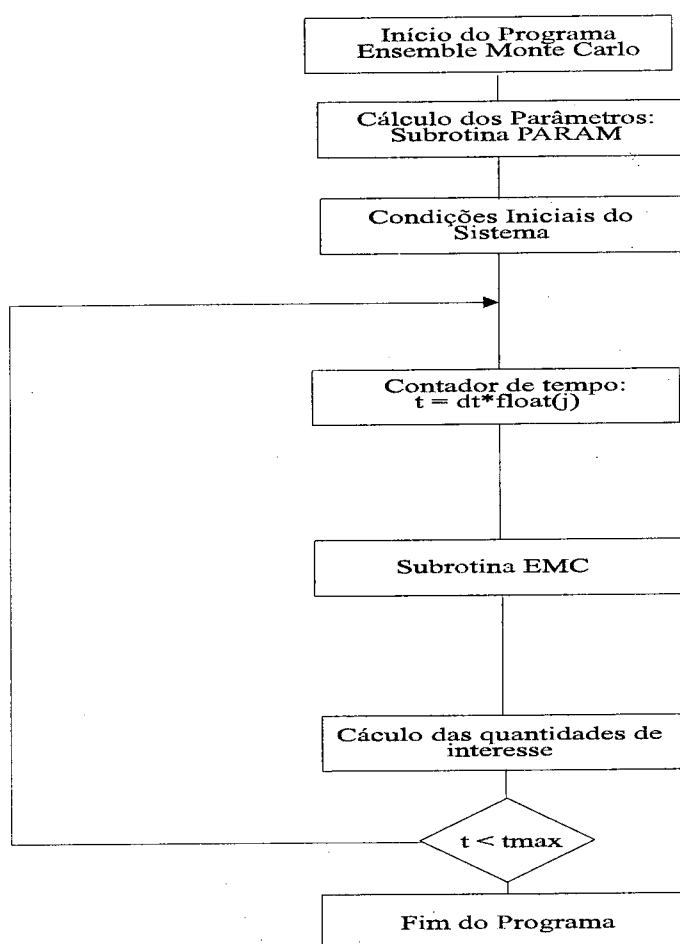


Figura 3.1: Fluxograma do método de Ensemble de Monte Carlo.

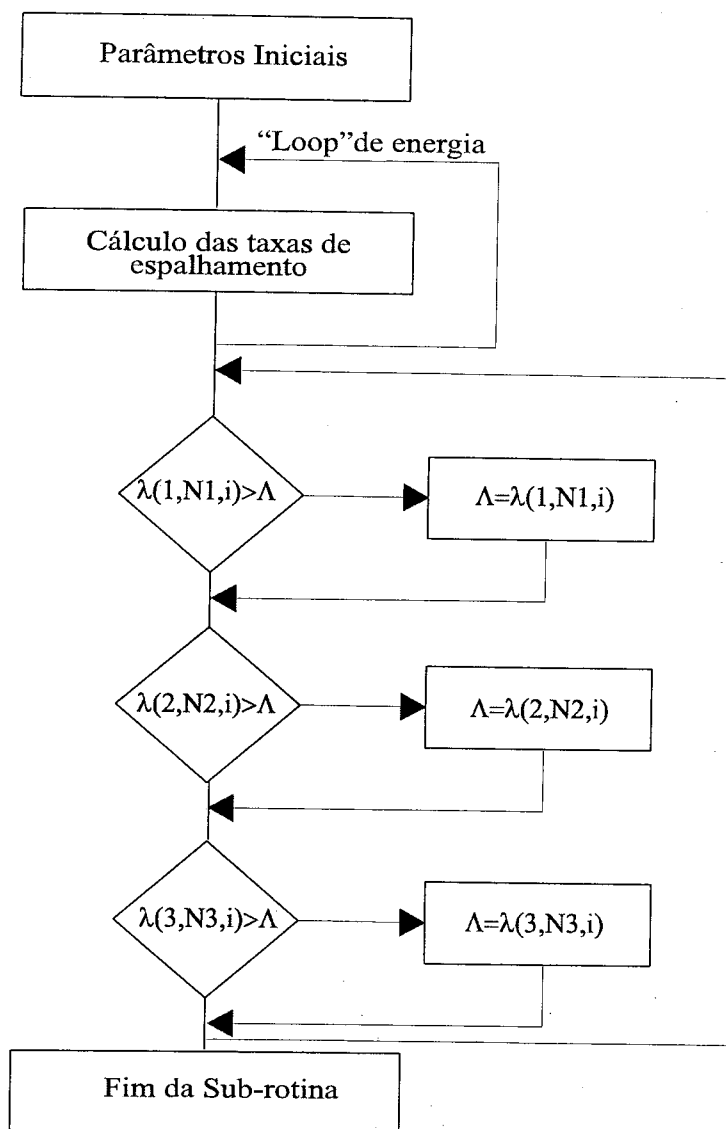


Figura 3.2: Fluxograma da sub-rotina responsável pelo cálculo da taxa de espalhamento.

taxas de espalhamento. A escolha do tempo total de simulação (t_{max}) é empírica, devendo haver um compromisso entre a necessidade de ergodicidade ($t \rightarrow \infty$) e o tempo real de simulação. Basicamente há duas formas de se cumprir esta condição: i) fixar um número de passos conveniente; ii) comparar com um número pré-estabelecido de passos o valor atual da velocidade do elétron (v_d) e o valor antigo que foi armazenado a n passos. Estipulando-se uma certa tolerância, o programa considerará que o cálculo atingiu o estado estacionário quando o erro for menor que este valor.

Condições iniciais do sistema: No método de EMC as condições iniciais não devem afetar o resultado final. Para que isto ocorra, a simulação deve percorrer o espaço de fase por um tempo "suficientemente longo". Neste ponto da simulação deve-se tomar o cuidado para que as condições iniciais não difiram fortemente das condições reais do problema. Isto poderia gerar uma forte oscilação no cálculo dos valores médios das quantidades desejadas. Um modo de se diminuir este problema é gerar aleatoriamente uma condição inicial, tomando apenas o cuidado de no caso de campos muito altos, da ordem de 10^5 V/cm, que o estado inicial do elétron esteja na banda L ou X (isto no caso do GaAs). Para este fim vamos apresentar um exemplo, baseado na distribuição de Maxwell. Neste exemplo gera-se a energia do sistema através da seguinte equação:

$$\varepsilon = -\frac{3}{2} \frac{k_b T}{q} \ln(r_1), \quad (3.1)$$

onde ε é a energia, k_b é a constante de Boltzmann, T é a temperatura, r_1 é um número rômico entre 0 e 1 e q a carga do elétron. O tempo τ é gerado a partir da seguinte equação:

$$\tau = -\frac{\ln(r_2)}{\Lambda}, \quad (3.2)$$

onde r_2 é um número rômico entre 0 e 1 e Λ é a taxa de espalhamento máxima. A figura 3.3 ilustra esta parte da rotina através de um fluxograma.

A geração aleatória dos ângulos é feita a partir das equações (2.82) e (2.81) e o subsequente cálculo das componentes dos vetores de onda é feito a partir das equações (2.83). A geração aleatória é feita para cada partícula e armazenada em uma matriz para futuras consultas.

Núcleo do programa: A parte central do programa engloba, o movimento livre, a seleção do mecanismo de espalhamento e a determinação do estado final do portador.

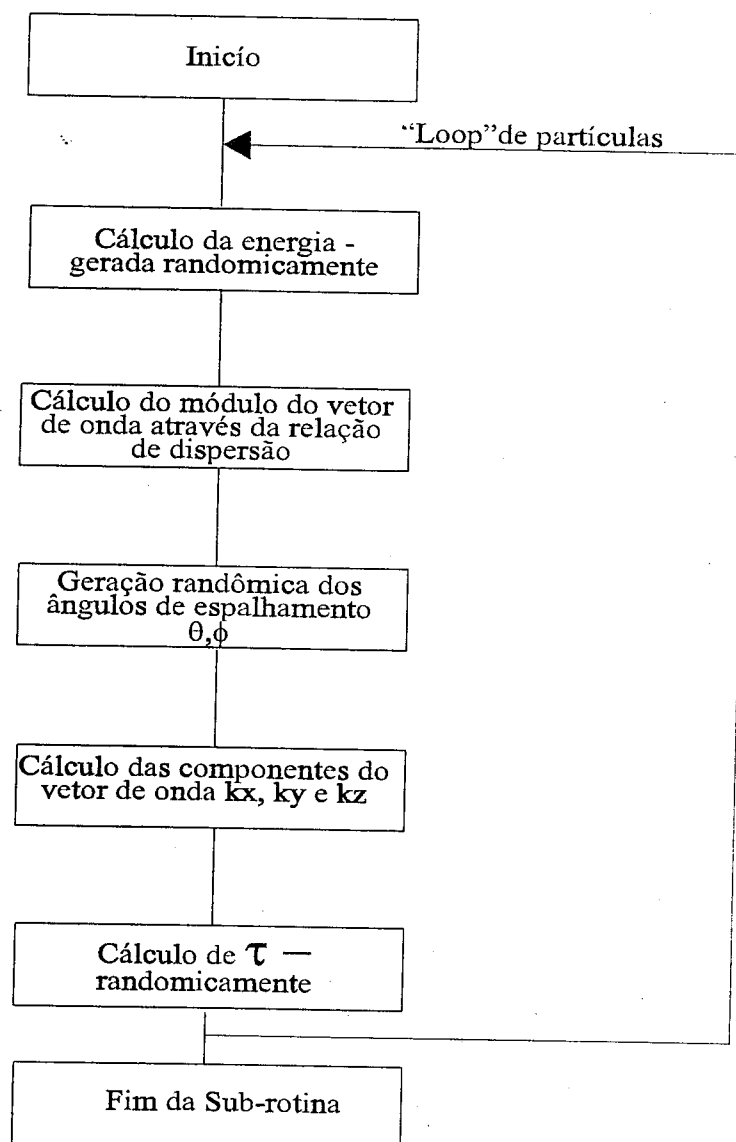


Figura 3.3: Fluxograma da subrotina responsável pela geração das condições iniciais do sistema.

Agora nós detalharemos o movimento da partícula em um intervalo dt . Uma partícula em um intervalo de tempo entre t e $t + dt$, sofrerá um dado número de espalhamentos que serão determinados randomicamente. Conseqüentemente, não é possível determinar o número de vezes que o portador será espalhado em um intervalo dt . Desta forma, para simular o movimento de um portador em um intervalo dt , vamos considerar que as componentes do vetor de onda e da posição são conhecidos em um tempo t_1 e que o espalhamento se dará em um tempo t_2 . Caso t_2 seja maior que $t + dt$, então o portador meramente desloca-se no intervalo dt , sendo que o tempo de movimento livre do portador será dado por $\tau = t + dt - t_1$. Determinam-se os valores das componentes do vetor de onda e da posição no final do intervalo dt . Por outro lado, se t_2 for menor que $t + dt$, o portador é espalhado de forma que o tempo de movimento livre do portador será dado por $\tau = t_2 - t_1$, determinando-se então as novas componentes do vetor de onda e da posição e posteriormente (estocasticamente) qual foi o mecanismo de espalhamento responsável pelo final do movimento livre do portador e então determina-se o estado final do portador. Após este procedimento um novo t_2 será determinado randomicamente e o programa irá conferir novamente se o tempo t_2 é maior que $t + dt$ ou não e prosseguirá até o fim da sub-rotina. Antes do final da sub-rotina os valores das componentes do vetor posição, do vetor de onda e do tempo t_2 são armazenados para aquele portador. Este procedimento se repetirá para cada portador, e supondo que o programa faça uma amostragem com 5000 portadores, este procedimento se repetirá 5000 vezes para cada intervalo dt . O núcleo do programa é dado pela sub-rotina *emc*, representado na figura 3.4.

Movimento livre: A duração do movimento livre do elétron depende da taxa de espalhamento total, que é a soma de todas as taxas de espalhamento. Para calcularmos o tempo de movimento livre do elétron devemos relacioná-lo com as taxas de espalhamento. Neste caso, cada taxa de espalhamento é uma função da energia, sendo que cada mecanismo de espalhamento é designado por $\lambda_i(\varepsilon)$. Assim, a probabilidade por unidade de tempo, $P(\tau)$, para um elétron viajando por um tempo τ e sendo espalhado no final do seu movimento livre será:

$$P(\tau) = \lambda_T(\varepsilon) \exp \left[- \int_0^\tau \lambda_T(\varepsilon) dt \right], \quad (3.3)$$

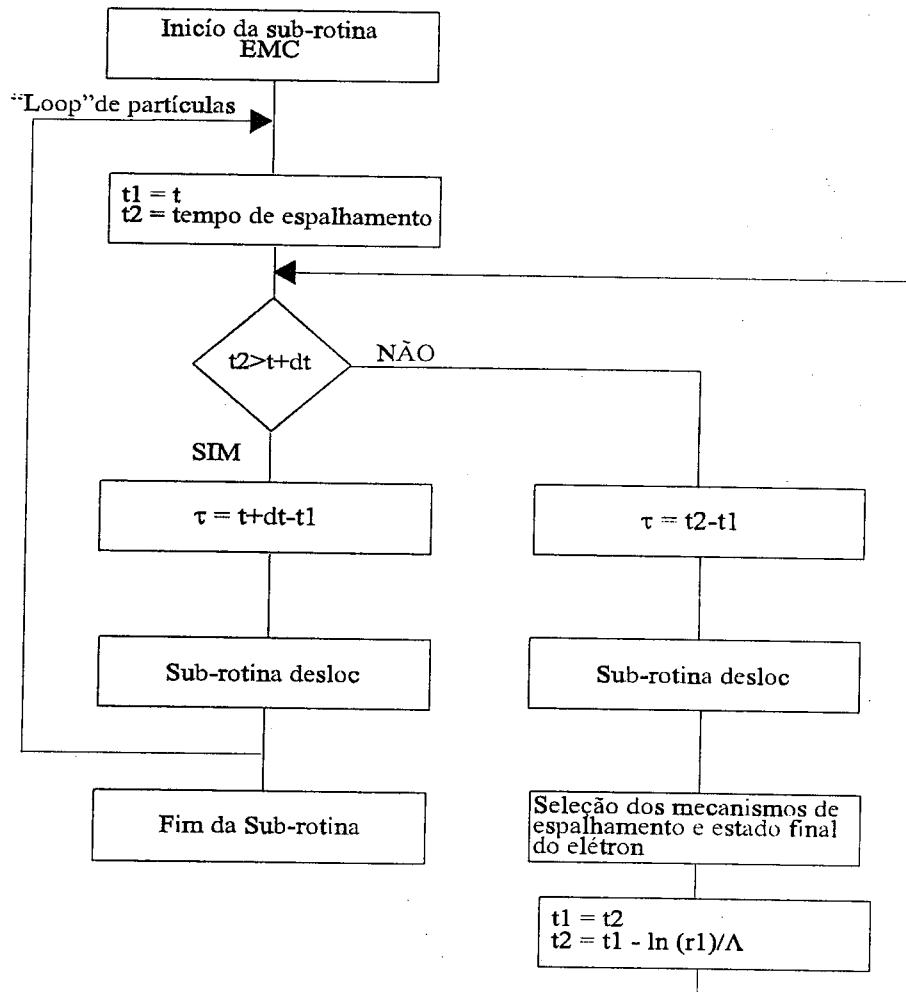


Figura 3.4: Fluxograma da sub-rotina emc.

onde $\lambda_T(\varepsilon)$ é a taxa de espalhamento total que é dada por:

$$\lambda_T(\varepsilon) = \sum_{i=1}^N \lambda_i(\varepsilon). \quad (3.4)$$

No entanto, a avaliação de τ a partir da equação (3.3) é impraticável, e devido a complexidade de $\lambda_i(\varepsilon)$, não é possível obter-se resultados analíticos, e ainda, a resolução numérica desta equação elevaria muito o tempo total do programa. Para superar este problema, Rees [33] desenvolveu uma técnica simples que consiste em introduzir um espalhamento fictício, denominando-o de auto-espalhamento. Quando o processo de auto-espalhamento é selecionado o vetor de onda não sofrerá qualquer mudança seja em módulo ou direção, conseqüentemente a energia do sistema também não será alterada. Usando este procedimento, a taxa do auto-espalhamento ($\lambda_0(\varepsilon)$) é escolhida de forma que a taxa de espalhamento total seja agora uma constante:

$$\Lambda = \lambda_0(\varepsilon) + \lambda_T(\varepsilon). \quad (3.5)$$

Utilizando este artifício, podemos reescrever a equação (3.3) na seguinte forma:

$$P(\tau) = \Lambda \exp[-\Lambda\tau]. \quad (3.6)$$

Integrando a equação (3.6) em termos de τ obtemos a seguinte forma analítica para τ_r :

$$\tau_r = -\frac{\ln r_1}{\Lambda}. \quad (3.7)$$

A simulação do movimento do portador no método MC é feita a partir da aproximação semi-clássica da equação de movimento, cuja forma geral é dada por[34]:

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = |e| \left(\mathbf{F} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) - \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}. \quad (3.8)$$

O primeiro termo de (3.8) é a força devido a ação dos campos elétricos e magnéticos, o segundo termo é considerado no caso do sistema ter um gradiente de tensão ou inhomogeneidade espacial. Por simplicidade vamos considerar que o material está sob ação de um campo elétrico e que não haja nenhuma inhomogeneidade espacial. Assim a equação (3.8), para cada componente do vetor de onda, ficará na forma[6]:

$$k_{xf} = k_{xi} + \frac{|e| F_x}{\hbar} \tau. \quad (3.9)$$

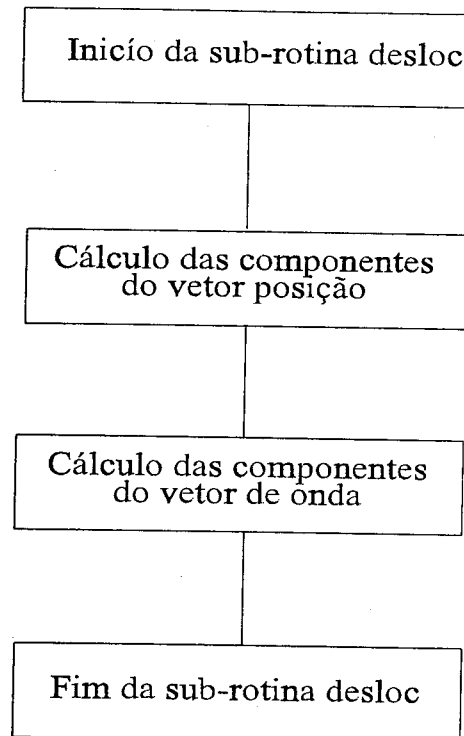


Figura 3.5: Fluxograma da sub-rotina responsável pelo cálculo das componentes do vetor de onda e do vetor posição.

$$k_{yf} = k_{yi} + \frac{|e| F_y \tau}{\hbar}, \quad (3.10)$$

$$k_{zf} = k_{zi} + \frac{|e| F_z \tau}{\hbar}. \quad (3.11)$$

De modo similar as componentes do vetor posição ficarão na seguinte forma[6]:

$$x_f = x_i + \frac{\hbar \tau}{m^*} \frac{\left(k_{xi} + \frac{qF_x \tau}{2\hbar} \right)}{\sqrt{1 + 4\alpha\gamma(\varepsilon)}}, \quad (3.12)$$

$$y_f = y_i + \frac{\hbar \tau}{m^*} \frac{\left(k_{yi} + \frac{qF_y \tau}{2\hbar} \right)}{\sqrt{1 + 4\alpha\gamma(\varepsilon)}}, \quad (3.13)$$

$$z_f = z_i + \frac{\hbar \tau}{m^*} \frac{\left(k_{zi} + \frac{qF_z \tau}{2\hbar} \right)}{\sqrt{1 + 4\alpha\gamma(\varepsilon)}}. \quad (3.14)$$

O fluxograma da sub-rotina responsável pelo cálculo das componentes do vetor posição e do vetor de onda é dada pela figura 3.5.

Depois do cálculo dos novos valores das componentes do vetor de onda e da posição, a energia é calculada através da relação de dispersão e o programa irá selecionar qual o mecanismo de espalhamento responsável pelo final do movimento livre do elétron.

Seleção do mecanismo de espalhamento: Depois de calculado o novo vetor de onda, antes do espalhamento, selecionaremos o mecanismo de espalhamento responsável pelo final do movimento livre, mediante uma certa probabilidade. A seleção é feita gerando um número randômico r_1 , entre 0 e 1, e comparando-o com a n -ésima taxa de espalhamento, então $\lambda(\xi, n, i)$ será selecionado se satisfizer a seguinte condição:

$$\lambda(\xi, n - 1, i) < r_1 \Lambda \leq \lambda(\xi, n, i) \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad (3.15)$$

onde ξ designa os pontos de simetria relevantes do material. Como nós adotamos a técnica de Rees do auto-espalhamento na hora de selecionar o mecanismo de espalhamento que foi responsável pelo final do movimento livre do elétron, há uma grande probabilidade do auto-espalhamento ser selecionado. Aqui apresentamos neste fluxograma um exemplo de como selecionar qual taxa de espalhamento foi responsável pelo final do movimento livre do elétron satisfazendo a relação (3.15).

No fluxograma $\Lambda_1(\varepsilon), \Lambda_2(\varepsilon) \dots \Lambda_n(\varepsilon)$ são as taxas de espalhamento para um determinado ponto de simetria normalizada pela constante Λ . Caso nenhum dos mecanismos reais satisfaça a relação 3.15 o auto-espalhamento é selecionado. Neste caso as componentes do vetor de onda e a energia não mudam, ou seja, seria equivalente a dizer que o portador não espalhou. Caso um mecanismo de espalhamento real seja selecionado, a energia do portador depois do espalhamento será obtida pela conservação de energia e o módulo do vetor de onda pela relação de dispersão. Para obtermos as componentes do vetor de onda do portador, o programa irá selecionar o estado final do portador.

Seleção do estado após o espalhamento: Uma vez definido qual processo de espalhamento que foi responsável pelo final do movimento livre, devemos calcular o vetor de onda \mathbf{k}' , que é o vetor de onda após o espalhamento. Se o auto-espalhamento foi selecionado, o novo vetor de onda \mathbf{k}' será igual a \mathbf{k} . Caso contrário, um espalhamento real é selecionado e um novo vetor de onda deve ser calculado. Por conservação de energia conhecemos qual é o valor do módulo de \mathbf{k}' . A direção de \mathbf{k}' é determinada a partir das componentes cartesianas $(k'_x, k'_y$ e $k'_z)$, de acordo com a particular seção de choque do mecanismo. Detalhes foram

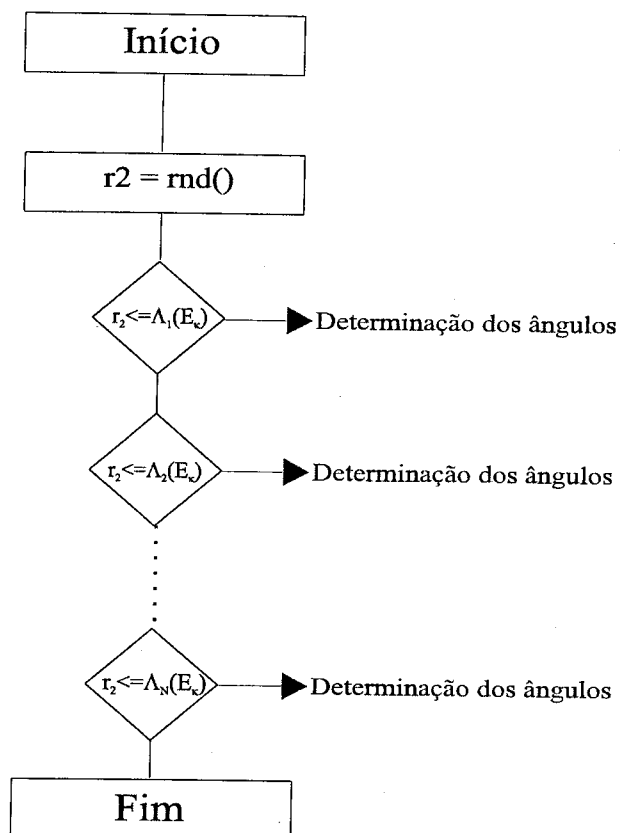


Figura 3.6: Fluxograma representando a escolha de qual mecanismo de espalhamento foi responsável pelo final do movimento livre do elétron.

apresentados na seção 2.3.

Cálculo das quantidades de interesse: Depois que o elétron tenha percorrido o espaço de fase pelo tempo especificado, é necessário calcular as quantidades físicas de interesse. O método aqui apresentado, supõe a aplicação de um campo elétrico constante. Descreveremos a seguir como calcular a velocidade, energia e a população dos elétrons neste caso.

A velocidade instantânea pode ser calculada numericamente através de três métodos diferentes. Os dois primeiros métodos utilizam-se de uma relação válida para um material semiconductor que relaciona a velocidade com a estrutura de banda, e é dada por:

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \varepsilon(k). \quad (3.16)$$

Discretizando a equação (3.16) e usando a equação (3.9) obtemos:

$$\langle \mathbf{v} \rangle_T = \frac{1}{eFT_s} \sum_{i=1}^{tmc} (\varepsilon_f - \varepsilon_i), \quad (3.17)$$

onde ε_f é a energia no final do movimento livre e ε_i é a energia no início do movimento livre. O termo tmc representa o número total de passos que foi realizado pelo programa, ou seja, a soma será efetuada sobre todos os tempos de movimento livre da partícula e o termo T_s é o tempo total de simulação. O segundo método basea-se na derivação explícita da relação de dispersão. Tomando como exemplo a relação de dispersão não-parabólica, a expressão para a velocidade será escrita na seguinte forma:

$$\langle \mathbf{v} \rangle_T = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*} \frac{1}{\sqrt{1 + 4\alpha\varepsilon}}. \quad (3.18)$$

O terceiro método utiliza a expressão:

$$\langle \mathbf{v} \rangle_T = \frac{\langle x \rangle}{t}, \quad (3.19)$$

onde $\langle x \rangle$ é o valor médio da posição e t é o tempo.

Para o cálculo da energia podemos armazenar os vetores de onda em cada direção e usar a relação de dispersão para calcular a energia média do sistema. Apenas como exemplo, supondo o caso não-parabólico, a expressão da energia será dada por:

$$E_k = \frac{\sqrt{1 + 4\alpha\gamma(\mathbf{k})} - 1}{2\alpha}, \quad (3.20)$$

onde $\gamma(\mathbf{k})$ é dado por:

$$\gamma(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*}. \quad (3.21)$$

A população de cada vale é calculada da seguinte maneira: ao final de cada intervalo de tempo dt , o programa conta quais são os portadores que estão em cada uma das bandas. Esta contagem é normalizada pelo número de portadores total usados na simulação (da ordem de 10000). Estes valores são armazenados e no final é feito uma média geral. Usualmente inicia-se a contagem a partir de um número n de passos depois do início da simulação. Isto é feito para evitar que se colete valores físicos fora do equilíbrio, ou também a monitoração da velocidade, iniciando a contagem a partir de um determinado erro.

A difusão também pode ser calculada através do método de Monte Carlo. Em geral, costuma-se calcular a difusão longitudinal D_t , sendo que esta quantidade pode ser calculada através da seguinte equação:

$$D_t = \frac{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}{2t}. \quad (3.22)$$

3.2 Transporte Eletrônico em GaAs

Para exemplificarmos o método descrito no item 3.1, faremos um breve estudo do Arseneto de Gálio. O Arseneto de Gálio foi o primeiro material a ser estudado através do método EMC. Desde então, ele têm sido alvo de extensas investigações, tais como: estudo de suas propriedades em função da temperatura[35], estudos a altos campos elétricos[36] e a influência do mecanismo de ionização por impacto[37]. Devido ao grande número de trabalhos à disposição, os parâmetros utilizados são bem estabelecidos. O modelo utilizado aqui é similar ao empregado no caso do GaSb (que será estudado no capítulo seguinte), devido à semelhança entre os dois materiais. A concordância dos nossos resultados em relação a cálculos de outros autores é muito boa, o que viabiliza a utilização do método desenvolvido.

3.2.1 Descrição do Modelo

Para o GaAs, consideramos os pontos de simetria Γ , L e X, para representar a estrutura de banda. A relação de dispersão é representada por um modelo analítico não parabólico. O modelo inclui os seguintes mecanismos: Fônons acústicos, Fônons ópticos, impurezas, efeito piezoelétrico, ionização por impacto e espalhamento intervale equivalente e não-equivalente. Ao contrário do que será feito no GaSb (no caso as impurezas são duplamente ionizadas) para o cálculo das impurezas ionizadas não foi necessário utilizar o mesmo procedimento, pois em geral, as impurezas que existem no GaAs são unicamente ionizadas. Os parâmetros foram retirados da literatura[6],[36]. A relação do "gap" com a diferença de energia é dada por:

$$E_g = E_o - \frac{\alpha_{vs}T^2}{(\beta_{vs} + T)}, \quad (3.23)$$

onde E_o é o valor do gap a $T = 0$, α_{vs} e β_{vs} são parâmetros extraídos de curvas experimentais. Expressões similares foram utilizadas para as diferenças de energia entre os vales Γ -L, Γ -X e L-X cada um com seus próprios valores de α_{vs} e β_{vs} . Os parâmetros usados em nosso modelo são apresentados na tabela 3.1.

3.2.2 Resultados

No gráfico da figura 3.7 é apresentado a dependência da velocidade de deriva em função do campo elétrico para duas temperaturas no GaAs.

Comparamos o nosso resultado com o resultado experimental de Houston e Evans [38] e com o cálculo teórico de Pozela e Reklaiatis[36] à temperatura ambiente. A concordância do nosso resultado com ambos é muito boa. A principal diferença entre o modelo utilizado por Pozela e o nosso é a inclusão do mecanismo piezoelétrico e consideração do espalhamento acústico como sendo inelástico. O pico na velocidade de deriva está em torno de 3 kV/cm, decaindo a medida em que o campo cresce. O fenômeno da condutividade diferencial negativa no GaAs deve-se a inversão de população entre os vales Γ e L.

A figura 3.8 mostra o comportamento da velocidade de deriva em função do campo elétrico para amostras de 2000 a 10000 partículas (NTP). Este estudo foi realizado para verificar o tamanho da amostra no qual os resultados seriam acurados, e para observar o

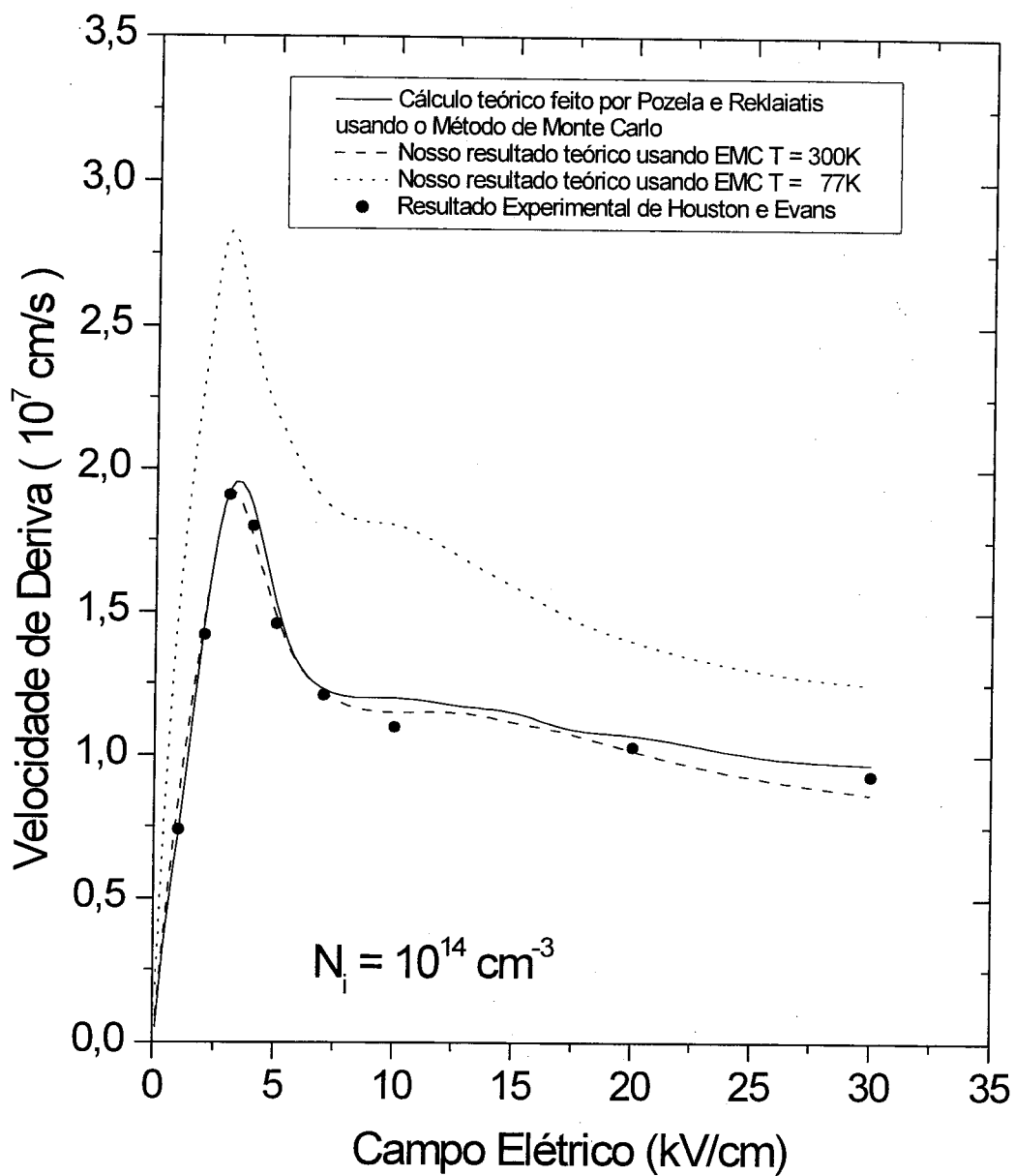


Figura 3.7: Velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico para o GaAs com uma concentração de impurezas de 10^{14} cm^{-3} . O resultado obtido com o método desenvolvido é comparado com o resultado teórico de Pozela e Reklaitis[36] e com o resultado experimental de Houston e Evans[38] a $T = 300\text{K}$.

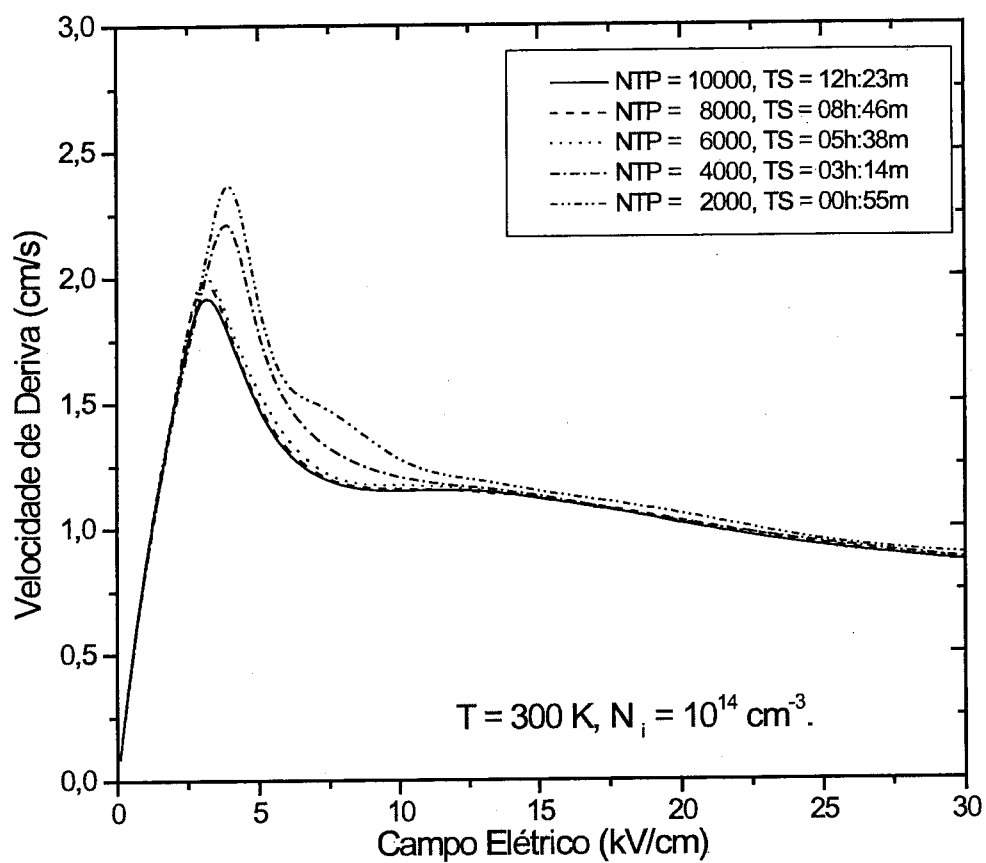


Figura 3.8: A velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico para uma concentração de 10^{14} cm^{-3} . Comparamos o efeito do número total de partículas no resultado final.

Parâmetros usados na simulação de Monte Carlo	Valores
massa efetiva do vale Γ	0.063
massa efetiva do vale L	0.17
massa efetiva do vale X	0.58
Potencial de Deformação Acústico (eV)	7.0
Potencial de Deformação Intervale $\Gamma - L$ (eV/cm)	0.18×10^9
Potencial de Deformação Intervale $\Gamma - X$ (eV/cm)	1.0×10^9
Potencial de Deformação Intervale $L - L$ (eV/cm)	0.5×10^9
Potencial de Deformação Intervale $L - X$ (eV/cm)	0.1×10^9
Potencial de Deformação Intervale $X - X$ (eV/cm)	1.0×10^9
Separação entre vales $\Gamma - L$ a $T = 0K$ (meV)	296.0
Separação entre vales $\Gamma - X$ a $T = 0K$ (meV)	462.0
Densidade (g/cm^3)	5.36
Velocidade Média do Som (cm/s)	5.2×10^5
Permitividade Relativa (alta frequência)	10.92
Permitividade Relativa (baixa frequência)	12.90
Energia do fônon (intervale) (eV)	0.0299
Energia do fônon (óptico) (eV)	0.0362

Tabela 3.1: Parâmetros utilizados na simulação de transporte de elétrons no GaAs.

tempo médio para cada NTP. O tempo total de simulação (TS), indicado na figura, foi obtido para 15 valores de campo elétrico. Os resultados desta simulação foram calculados numa estação Digital 255/300 128 RAM, com sistema UNIX e o programa gerado em fortran 90. Observamos que de 8000 para 10000 não há qualquer diferença significativa, contudo para 6000, na região do pico há uma pequena discrepância entre os resultados de 10000. Para as amostras de 4000 e 2000 as diferenças são significativas no intervalo de campo elétrico de 3 a 13 kV/cm. Vale a pena salientar, que em geral, para simulações de Monte Carlo utiliza-se um NTP de 8000 a 10000, contudo isto pode variar de material para material. Nas simulações seguintes usamos uma amostragem de 10000 partículas.

Na figura 3.9, apresentamos a população dos elétrons para os pontos de simetria Γ , L e X a temperatura ambiente, e com uma concentração de impurezas de 10^{14} cm^{-3} . O ponto em que as populações se invertem é próximo da posição da velocidade de pico neste material, corroborando assim a nossa afirmação inicial.

Observamos que a contribuição do vale Γ é majoritária até quase 5 kV/cm, onde o vale L começa a ter uma influência majoritária na velocidade. Quando altos campos

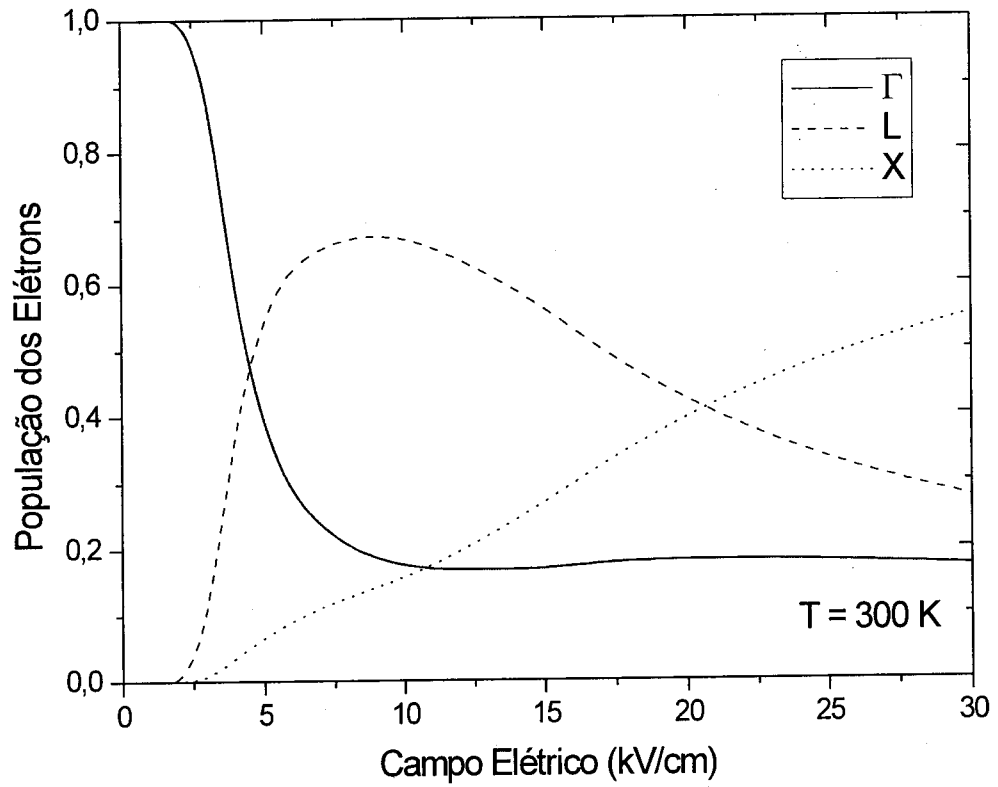


Figura 3.9: Ocupação do elétron nos Vales Γ , L e X em função do campo elétrico para o GaAs a 300 K. A concentração de impurezas é 10^{14} cm^{-3} .

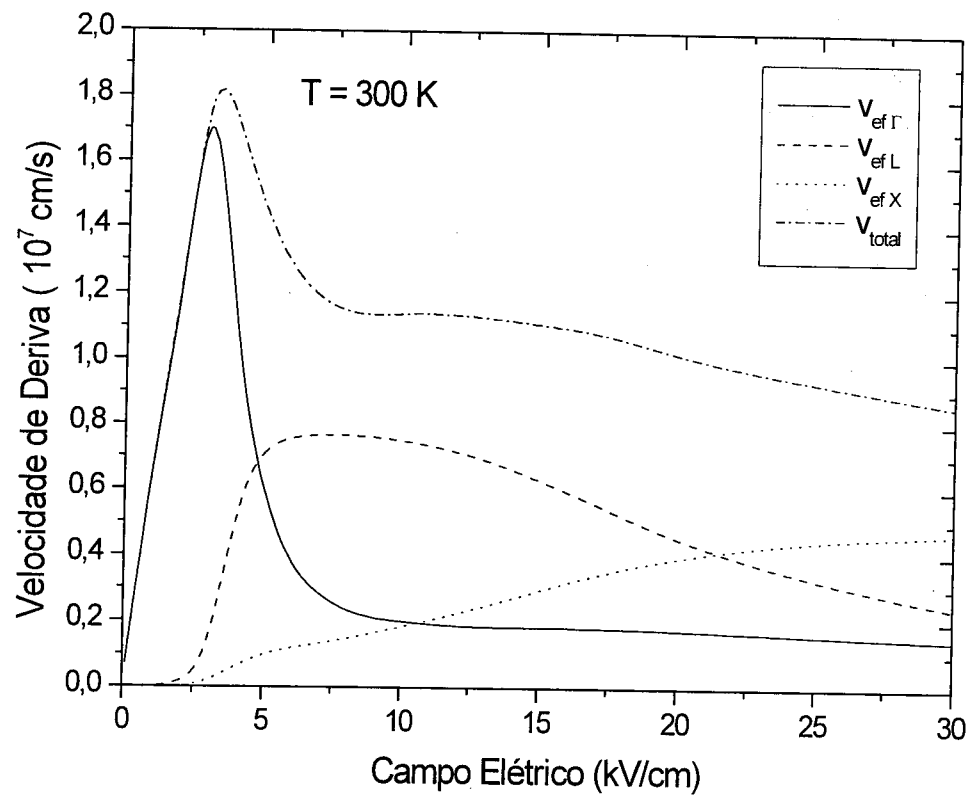


Figura 3.10: Velocidade de deriva em função do o campo elétrico para o GaAs. É mostrada a contribuição da cada um dos Vales para a velocidade.

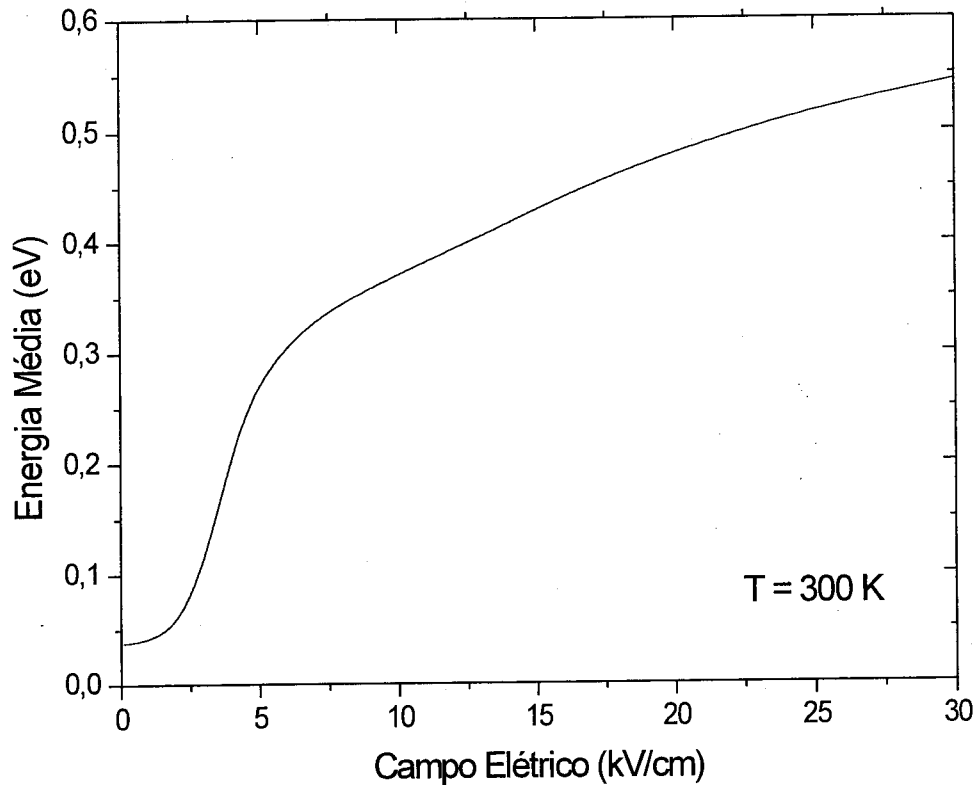


Figura 3.11: Energia média do elétron em função do campo elétrico no GaAs a 300 K. A concentração de impurezas é 10^{14} cm^{-3} .

são aplicados, o vale X passa a ser mais importante no processo de transporte. Vale a pena acrescentar que a baixos campos, o vale Γ é praticamente o único responsável pelo processo de transporte no GaAs, isto nem sempre ocorre em todos os materiais. Este é um dos motivos que o GaAs é facilmente estudado em baixos campos, pois a dependência das propriedades de transporte é devido a apenas um único vale.

Na figura 3.11 mostramos o cálculo da energia média do elétron a 300 K para uma concentração de 10^{14} cm^{-3} . A energia do elétron inicialmente apresenta um rápido aumento até alcançar uma energia de 0,3 eV. Além deste ponto a energia vai aumentando lentamente à medida em que o campo elétrico vai crescendo. Este comportamento é também resultante da transferência eletrônica do vale Γ para o vale L devido a uma maior relaxação de energia no vale L.

Na figura 3.12 apresentamos a velocidade do elétron em função do tempo, obser-

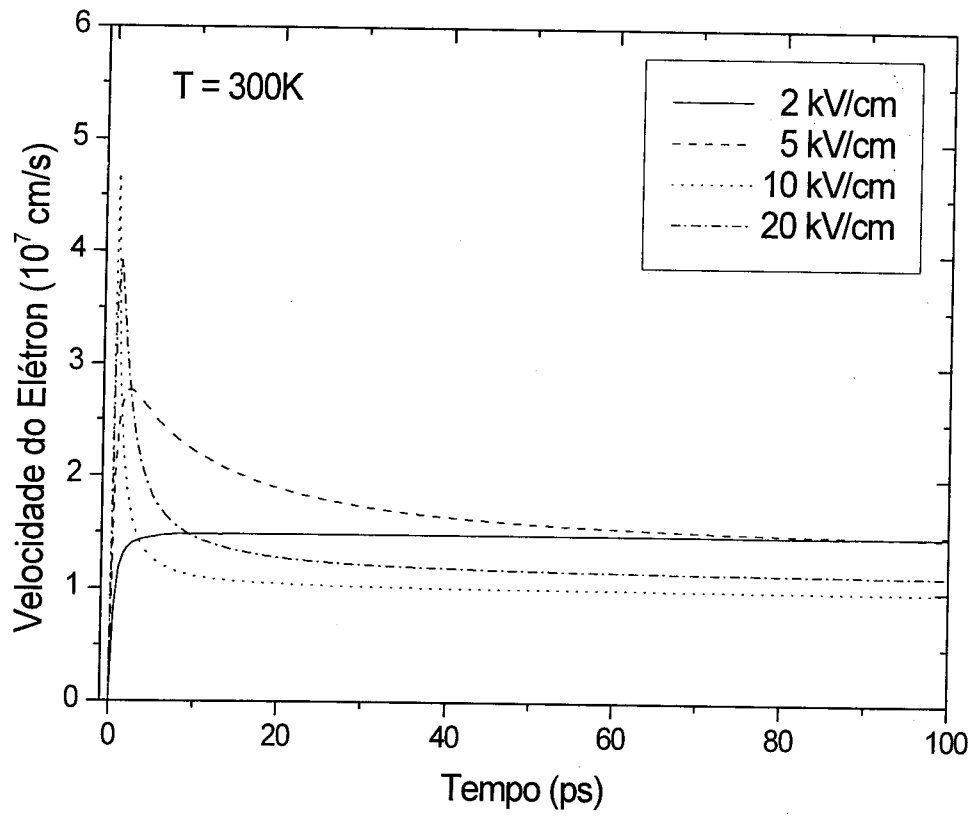


Figura 3.12: Velocidade do elétron em função do tempo para o GaAs. A concentração de impurezas é 10^{14} cm^{-3} .

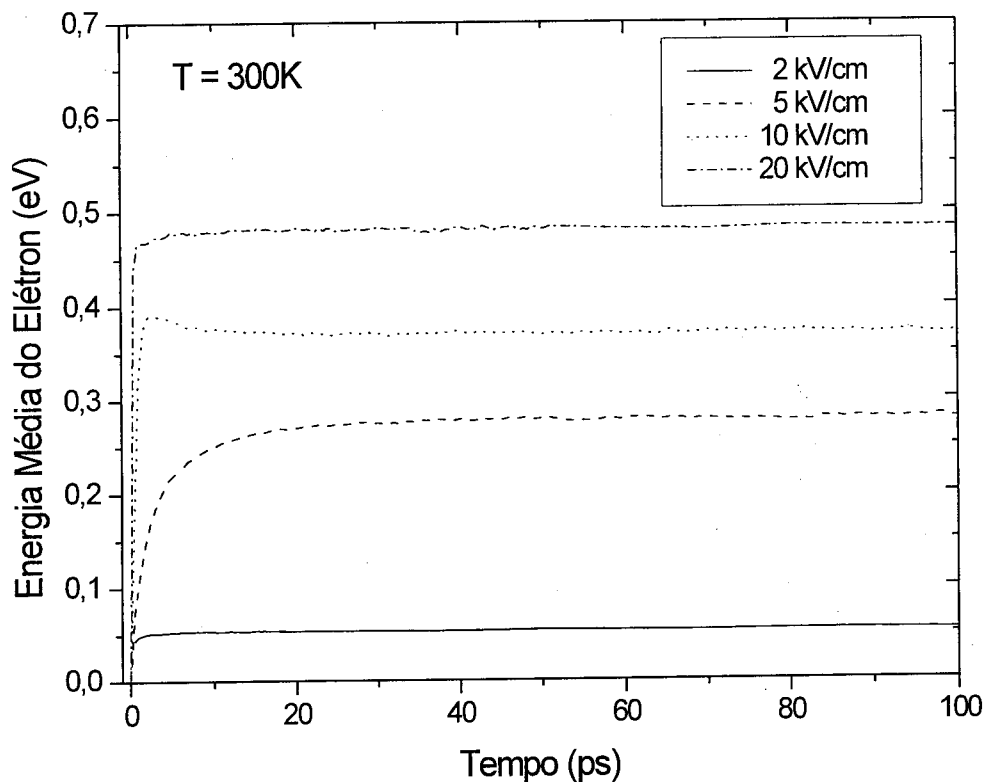


Figura 3.13: Energia média do elétron em função do tempo para o GaAs. A concentração de impurezas é 10^{14} cm^{-3} . Estudo em função do campo.

vamos que para altos campos o GaAs apresenta uma alta velocidade de pico. Isto ocorre, pois o campo elétrico fornece uma quantidade de energia ao elétron, que está inicialmente no vale Γ , fazendo com que o elétron aumente conseqüentemente a sua velocidade de deriva. Contudo, com o tempo estes elétrons altamente energéticos, que têm energia suficiente para transicionar, são transferidos para um outro ponto de simetria. À medida em que os elétrons mais energéticos são transferidos do vale principal para um vale satélite a velocidade vai decaindo progressivamente até se estabilizar.

No gráfico 3.13 mostramos a evolução temporal da energia média do elétron no GaAs à temperatura ambiente. À medida que o campo elétrico se torna mais intenso a energia média do elétron também aumenta. Como já foi dito anteriormente, o propósito deste capítulo foi de descrever o método EMC, que será utilizado nos capítulos subsequentes. Os resultados obtidos com o GaAs mostram que o método desenvolvido é confiável, além

de possuir uma boa estabilidade computacional.

3.2.3 Inclusão da Blindagem no método EMC

A inclusão da efeito da blindagem deve ser incluída, para concentrações acima de 10^{17} cm^{-3} . Existem diversos modelos para a inclusão da blindagem em EMC[39]-[42], nós adotamos o modelo de Borowik[42] devido a simplicidade e baixo custo computacional. O modelo leva em conta a blindagem escrevendo a taxa da espalhamento na seguinte forma:

$$W^b(k, k') = W^{nb}(k, k') \left(\frac{q^2}{q^2 + \lambda_d^2} \right)^2, \quad (3.24)$$

onde $W^{nb}(k, k')$ é a taxa de espalhamento sem incluir a blindagem, e q é o vetor de onda do fônon dado por $|\vec{q}| = |\vec{k}' - \vec{k}|$, e λ_d é o inverso do comprimento de blindagem dado pela equação (2.33). O programa inicialmente apenas coleta os valores do vetor de onda do fônon para cada partícula. Após 2000 passos (dt), utilizamos o fator $\left(\frac{q^2}{q^2 + \lambda_d^2} \right)^2$, para recalculer a taxa de espalhamento do fônon óptico. Quando o programa for selecionar qual mecanismo será responsável pelo final do movimento livre do elétron, o programa utilizará a taxa $W^b(k, k')$, ou seja, a taxa incluindo a blindagem. Este procedimento é feito auto-consistentemente até que o programa alcance a convergência. Para testar o modelo utilizamos os resultados de Pantoja [43] para o GaAs.

A ligeira discrepância entre os dois modelos pode ser atribuída a diferentes modelos de blindagem e também a inclusão do efeito do acoplamento fônon-plasmon no cálculo de Pantoja[43]. Utilizamos neste caso o modelo Conwell e Weisskopf[11] (CW).

3.3 Transporte de Buracos para GaAs

O transporte de buracos é colocado aqui de forma ilustrativa, para apresentar a técnica de MC aplicada a buracos. As taxas de espalhamento para buracos são diferentes do que para elétron, devido a forma de interação com a rede. O modelo apresentado aqui inclui as bandas de buracos leve e pesados, excluindo-se a banda de "split-off". O modelo empregado neste cálculo é bem similar ao usado no GaSb, com apenas algumas modificações devido a certas peculiaridades do GaSb.

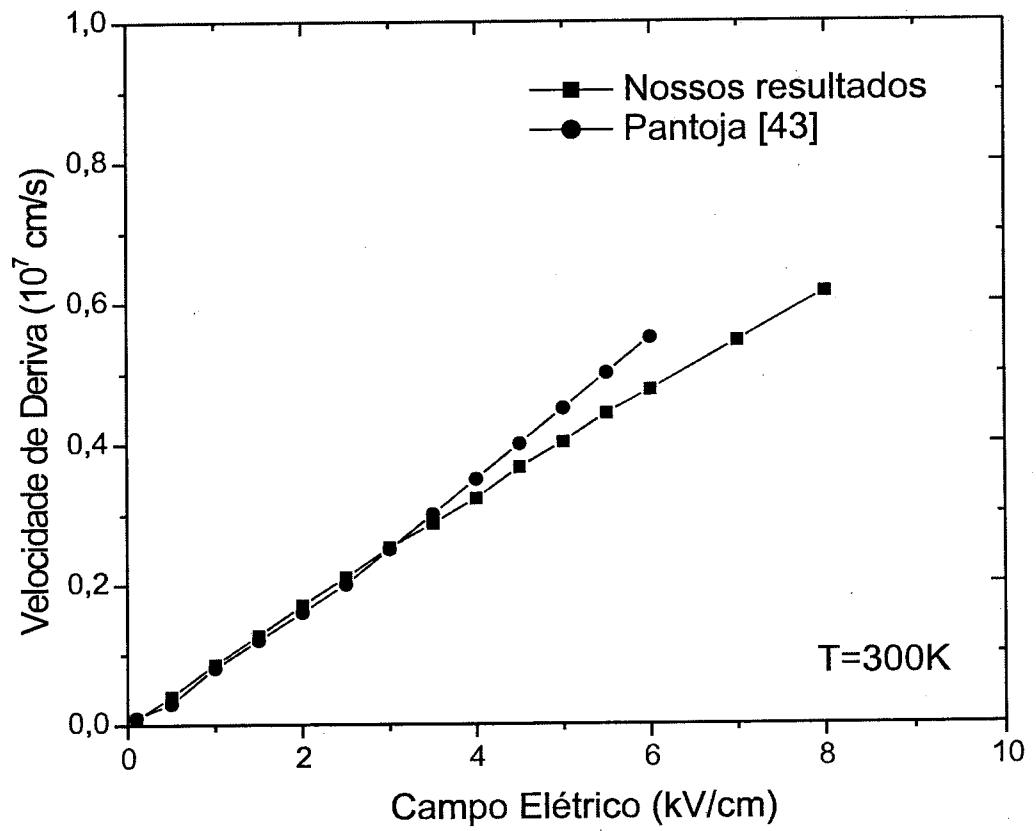


Figura 3.14: Comparação entre os resultados de Pantoja[43] e os nossos resultados para validar o modelo de blindagem. Concentração usada de $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

3.3.1 Descrição do Modelo para Buracos

Devido às diferenças entre a banda de valência e a banda de condução, o modelo analítico utilizado para a banda de valência é sensivelmente diferente. O modelo analítico mais aceito para descrever a banda de valência é dado pela seguinte equação [4],[6]:

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left\{ Ak^2 \pm [B^2k^4 + C^2 (k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_x^2k_z^2)]^{1/2} \right\}. \quad (3.25)$$

Na equação acima o sinal positivo é usado no cálculo de buracos leves e o negativo para o de buracos pesados. As constantes A, B e C têm sido determinadas e os valores que usamos em nosso trabalho para o GaAs foram $A = 7.65$, $B = 4.82$, $C = 7.71$ [6]. A influência destes parâmetros nas propriedades de transporte já foram estudadas [44], sendo que as diferenças quantitativas ficam no máximo entre 20% e não foi observado qualquer diferença qualitativa [44].

Neste modelo incluímos as bandas de buracos leve e pesado e os mecanismos considerados no modelo foram: 1 - o espalhamento intervala [18]; 2 - impurezas ionizadas CW; 3 - fônons acústicos; 4 - fônons ópticos. Para ajustar os valores do potencial de deformação utilizamos os resultados experimentais de Hill [45]. Blakemore [46] sugere que a mobilidade Hall para buracos é 20% maior que a mobilidade de deriva, e ajustando desta forma os valores da mobilidade Hall a 300K, para que pudéssemos compara-la com os nossos resultados. Para que o nosso resultado concordasse com o resultado de Hill a 300K, os potenciais de deformação acústico e óptico foram modificados. Quando o resultado da mobilidade coincidiu com o experimental simulamos a velocidade de deriva para o buraco a 77K e a 300K. Os parâmetros utilizados em nossa simulação encontram-se na tabela 3.2.

Em nosso estudo sobre a acurácia do modelo, determinamos que o Δt ótimo é de 0.5 fs, este valor foi determinado através de um estudo variando progressivamente o valor de Δt até obtermos um valor de Δt que não apresentava variações significativas com relação ao anterior. Para melhorar ainda mais a acurácia do nosso resultado usamos o esquema de "sub-histórias" para este fim.

Na figura 3.15, apresentamos a velocidade de deriva para o buraco em função do campo elétrico aplicado. Observamos que o comportamento da velocidade de deriva a 300K é linear com o campo, ao passo que a 77K o comportamento é diferente. A 77K a

Parâmetros usados na simulação de Monte Carlo	Valores
massa efetiva do buraco pesado	0.05
massa efetiva do buraco leve	0.5
Parâmetros Warp(A,B,C)	7.65, 4.82, 7.71
Potencial de Deformação Acústico (eV)	2.0
Potencial de Deformação Óptico (eV/cm)	0.5×10^9
Densidade (g/cm ³)	5.36
Energia do fônon interbanda (meV)	36.2
Energia do fônon Óptico (meV)	36.2
Permitividade Relativa (alta frequência)	12.90
Permitividade Relativa (estática)	10.92

Tabela 3.2: Parâmetros usados na simulação do transporte de buracos no GaAs.

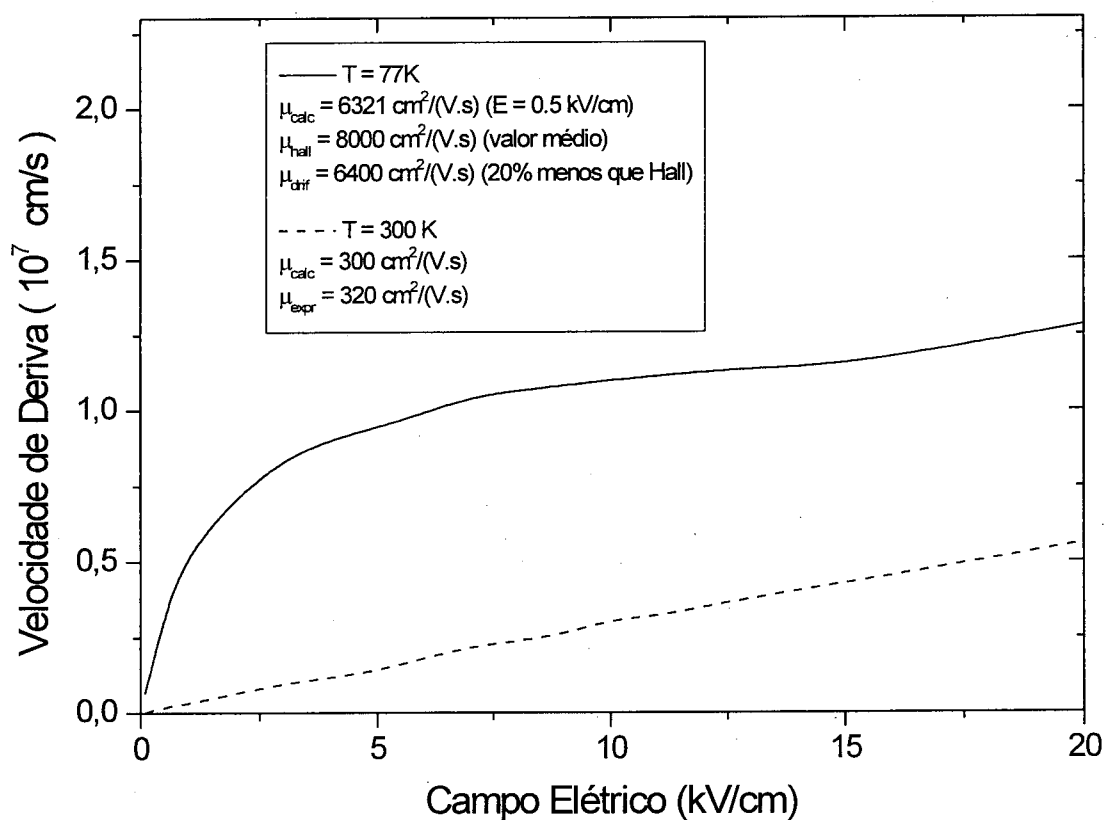


Figura 3.15: Velocidade de Deriva para buracos em função do campo elétrico aplicado no GaAs. Para uma concentração de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

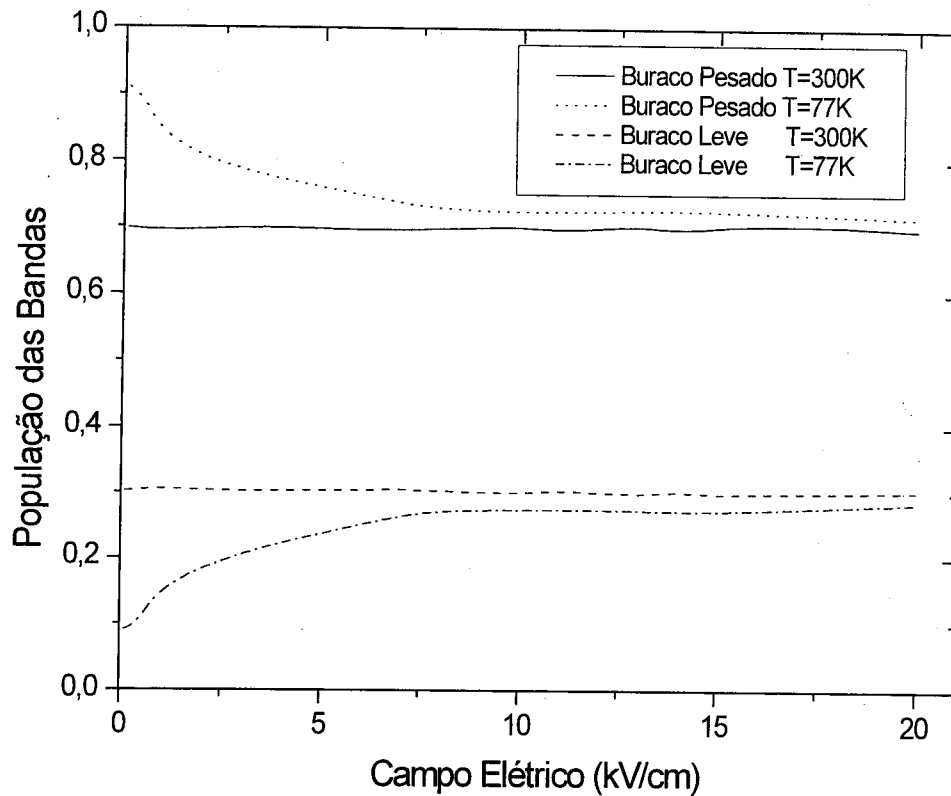


Figura 3.16: População dos vales de buracos leve e pesado em função do campo elétrico aplicado.

velocidade se comporta como se fosse estabilizar em 15 kV/cm, porém a partir deste ponto, a velocidade começa a aumentar novamente. O comportamento da velocidade a 300K é similar (no intervalo considerado) ao calculado por Moglestue[3] usando o método de Monte Carlo, porém o resultado de Moglestue foi baseado no resultado Dalal[47] e a mobilidade obtida por ele a 300K é cerca de $180 \text{ cm}^2/(\text{V.s})$.

Na figura 3.16, calculamos a população das bandas de buraco pesado e buraco leve, para duas temperaturas. Observa-se que a 300K a população das bandas de buraco leve e pesado permanecem constantes, sendo que a população da banda de buraco pesado é de cerca de 70%, enquanto que a de buraco leve é cerca de 30%. Resultado similar foi obtido por Moglestue a 300K, porém em sua simulação a porcentagem de buracos pesados era maior. A 77K e a baixos campos, a população de buracos pesados é quase de 90%, com o crescimento do campo elétrico a população de buracos pesados decai e estabiliza-se entre

75 % e 70%.

Os resultados para o GaAs estão em boa concordância com os resultados experimentais, e coerentes com resultados teóricos obtidos por outros autores. Ao contrário do que será feito para o GaSb, nós não incluímos no modelo a correção da massa efetiva com a temperatura, isto porque até onde sabemos no GaAs este efeito não foi observado. Um ponto a se destacar é que o espalhamento a 77K deve ser bem menos efetivo que a 300K, pois mesmo tendo uma maior população de buracos pesados a velocidade a 77K é maior que a 300K. O único fato que pode explicar este comportamento é que o espalhamento a 300K é bem mais efetivo que a 77K.

Capítulo 4

Transporte de Portadores em Semicondutores de Pequeno Gap - o caso do GaSb

4.1 Transporte de elétrons em GaSb

Historicamente, a pesquisa e o desenvolvimento de materiais semicondutores do grupo III-V estão associados ao desenvolvimento de dispositivos. Atualmente os sistemas de comunicações ópticas operam na faixa de $1,55 \mu\text{m}$, eventualmente a próxima geração deverá operar acima deste valor[48]. Dispositivos acima de $1,55 \mu\text{m}$ podem ser obtidos através de recentes desenvolvimentos em materiais, não baseados em silício, que têm uma perda mínima no intervalo de $2 - 4 \mu\text{m}$. Devido a estes fatores, há uma grande procura por novos materiais que possam operar nesta faixa. Do ponto de vista de dispositivos, o Antimoneto de Gálio (GaSb) têm se mostrado um candidato potencial para aplicações em diodos laser (com baixa voltagem limite)[49], fotodetetores com alta eficiência quântica[50] e super-redes[51]. Dispositivos baseados no GaSb são bons candidatos a uma série de

aplicações [48]: Sensores de imagens para mísseis, sistemas de vigilância e monitoramento de gases.

Tanto no aspecto tecnológico quanto no do material, o GaSb têm sido pouco estudado até então, quando comparado com outros materiais do grupo III-V. O GaSb não dopado é sempre um material do tipo p, independente da técnica de crescimento. Aceitadores residuais têm sido encontrados e foram relacionados com vacâncias de Gálio-Gálio em sítios de Antimônio com natureza duplamente ionizável[52]. Desenvolvimentos recentes em técnicas de crescimento, têm mostrado uma redução substancial no nível de aceitadores naturais, aumentando assim a mobilidade de buracos[48]. Do ponto de vista tecnológico este material ainda está na infância, porém as pesquisas têm aumentando significativamente, sendo que as áreas de maior interesse são as de crescimento de materiais de alta qualidade, compreensão das propriedades eletrônica e fotônica e no seu emprego em dispositivos.

Pelas razões discutidas anteriormente, houve recentemente um grande aumento nas pesquisas envolvendo GaSb, incluindo também seus ternários e quaternários. Porém, ainda há poucos estudos sobre propriedades de transporte eletrônico com vista ao GaSb dopado com portadores do tipo n. Além disso, boa parte dos trabalhos que existem usam modelos simplificados, como por exemplo, considerando-se apenas um ponto de simetria, ou usando o método de relaxação temporal [53], ou o modelo desenvolvido por Fletcher e Butcher[54]. Neste material, mesmo a 77 K, o vale L têm uma influência considerável e conseqüentemente os resultados obtidos através destes métodos não correspondem aos resultados experimentais da literatura [55]-[59]. Mesmo levando-se em consideração o recente trabalho de Damayanthi e colaboradores[59], que utiliza o método de Monte Carlo para a determinação de propriedades de transporte no GaSb, seus resultados estão em desacordo qualitativa e quantitativamente com os resultados experimentais de W. Jantsch e H. Heinrich [55]. Um dos motivos para esta discrepância é que o GaSb não é um material bem caracterizado, principalmente com relação ao vale X e por isso há sérias divergências sobre a importância deste ponto de simetria no transporte eletrônico no GaSb.

Usando o método de Monte Carlo estudamos as características de transporte do GaSb, a partir de expressões analíticas não-parabólicas para a banda de condução nos pontos de simetria Γ , L e X. A mobilidade a baixo campo é calculada no intervalo de temperatura de

50 a 300K e concentração de impurezas entre 10^{16}cm^{-3} - 10^{18}cm^{-3} . Efeitos da compensação sobre a mobilidade também são examinados. A velocidade de deslocamento é calculada para campos elétricos de até 20 kV/cm, feita em conjunto com uma análise da população dos respectivos pontos de simetria, donde discutiremos o porque da não apresentação da condutividade diferencial negativa no GaSb. É feito também um estudo do transporte de buracos.

4.1.1 Descrição do Modelo

As propriedades de transporte do GaSb foram determinadas a partir do método Ensemble de Monte Carlo. O transporte no GaSb é feito considerando-se os pontos de simetria Γ , L e X para a representação da sua estrutura de banda. A relação de dispersão é representada por um modelo analítico não parabólico[6]. No modelo para o GaSb foram incluídos os seguintes mecanismos de espalhamento: 1- fônons acústicos; 2 - fônons ópticos; 3 - impurezas; 4 - piezoelétrico; 5 - ionização por impacto e 6 - espalhamento intervale equivalente e não-equivalente. Os cálculos do espalhamento por impurezas, foram baseados no trabalho de Basinsky e colaboradores [60], onde a concentração de impurezas total é dada por $N_i = n + 6N_a^{-2}$, e para impurezas duplamente ionizadas usamos $N_a = 4N_a^{-2}$. Utilizamos também resultados recentes de Arimoto e colaboradores[61] para as massas efetivas nos vales Γ e L. O resultado obtido no trabalho de Arimoto foi apresentado em termos da massa efetiva longitudinal(m_l^*) e transversal(m_t^*). Porém, como não estamos levando em conta a anisotropia da banda de condução, usamos uma relação bem conhecida[6] para calcular a massa efetiva do vale L, expressa por:

$$m_L^* = \frac{3}{\frac{1}{m_l^*} + \frac{2}{m_t^*}}. \quad (4.1)$$

Incluimos o efeito da temperatura para calcular o "gap" e a diferença de energia entre os vales. A relação que foi utilizada é dada pela relação empírica de Varshni[62]:

$$E_g = E_0 - \frac{\alpha_{vs}T^2}{(\beta_{vs} + T)},$$

onde E_0 é o valor do gap a $T = 0$, e α_{vs} e β_{vs} são parâmetros extraídos de curvas experimentais. Expressões similares foram utilizadas para as diferenças de energia entre os vales Γ -L, Γ -X e L-X, cada um com seus próprios valores de α_{vs} e β_{vs} .

A simulação foi realizada inicialmente com parâmetros obtidos na literatura, sendo que os parâmetros bem estabelecidos foram mantidos fixos. No caso de quantidades que ainda não foram bem estabelecidas, usamos os resultados experimentais de W. Jantsch e H. Heinrich [55] para a sua determinação.

Parâmetros utilizados na simulação de Monte Carlo	Valores
massa efetiva do vale Γ	0.039
massa efetiva do vale L	0.136
massa efetiva do vale X	0.3
Potencial de Deformação Acústico (eV)	3.0
Potencial de Deformação Intervale $\Gamma - L$ (eV/cm)	1.7×10^9
Potencial de Deformação Intervale $\Gamma - X$ (eV/cm)	0.1×10^9
Potencial de Deformação Intervale $L - L$ (eV/cm)	0.6×10^9
Potencial de Deformação Intervale $L - X$ (eV/cm)	0.08×10^9
Potencial de Deformação Intervale $X - X$ (eV/cm)	0.08×10^9
Separação entre vales $\Gamma - L$ a $T = 0K$ (meV)	65.0
Separação entre vales $\Gamma - X$ a $T = 0K$ (meV)	329.0
Densidade (g/cm^3)	5.613
Velocidade Média do Som (cm/s)	4.69×10^5
Permitividade Relativa (alta frequência)	14.44
Permitividade Relativa (baixa frequência)	15.69
Energia do Fônon (intervale) (eV)	0.02384
Energia do Fônon (polar óptico)	0.0298

Tabela 4.1: Parâmetros usados na simulação do transporte de elétrons no GaSb.

Os parâmetros de ajuste foram os potenciais de deformação, que na literatura, $\Xi_{\Gamma L}$ varia em geral de 1×10^8 eV/cm a 1.5×10^9 eV/cm [35] [56] [63]. Contudo, há um resultado recente de Smith [58] e colaboradores interpretando resultados experimentais obtêm 6×10^{10} eV/cm, o qual acreditamos seja muito elevado e bem acima dos valores anteriormente encontrados na literatura. Para Ξ_{LL} os valores estão entre 1×10^8 eV/cm e 5.7×10^8 eV/cm [59] [63]. Para o potencial de deformação acústico, os valores vão de 4 eV [48], 6.7 eV [63] a 9.3 eV [59]. Os parâmetros relacionados com o vale X, ainda são pouco estudados e também há uma variação significativa de seus valores.

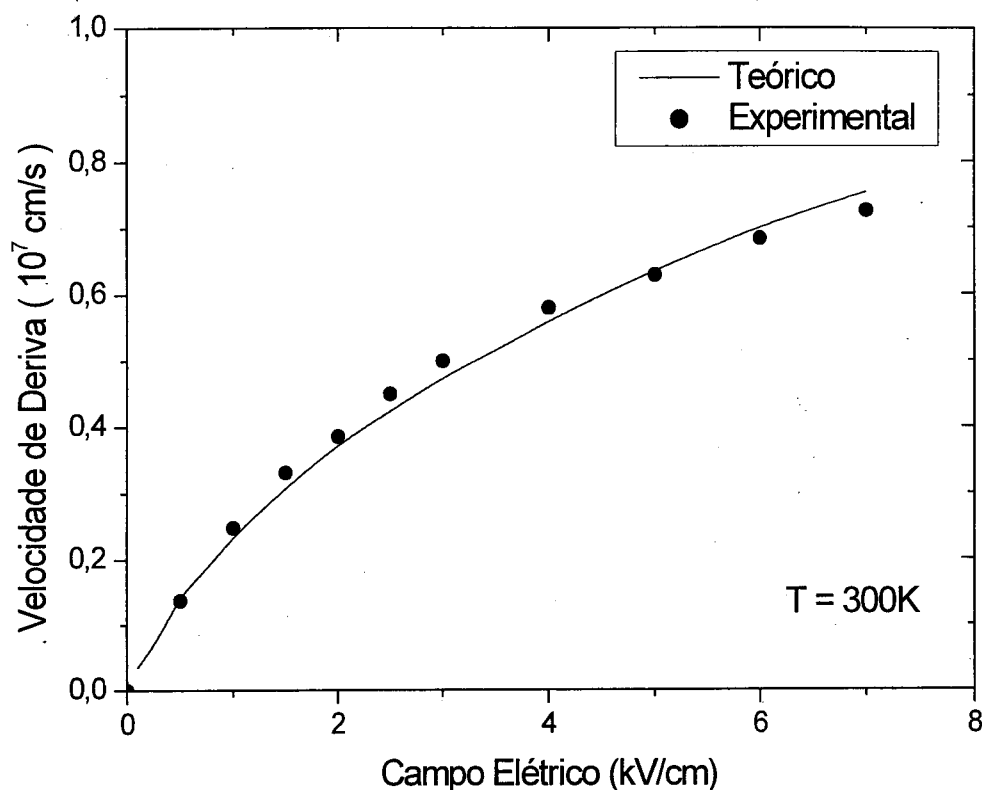


Figura 4.1: Velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico para o GaSb. Comparação entre o cálculo teórico obtido através do método de Monte Carlo e resultado experimental, realizado à temperatura ambiente com $N_i = 6.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

4.1.2 Resultados

Apresentamos inicialmente na figura 4.1 o resultado obtido para a velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico, comparando-o com o resultado experimental de W. Jantsch e H. Heinrich [55]. O resultado teórico está em boa concordância com o resultado experimental. Os parâmetros usados na nossa simulação estão apresentados na tabela 4.1 e servirão de base para o estudo realizado neste capítulo.

O gráfico apresentado na figura 4.2 representa um estudo da velocidade de deriva para o elétron como função do campo elétrico para um intervalo de temperaturas de 77K a 300K, obtidas a partir da simulação MC. Neste cálculo foi utilizada uma concentração de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, sem a inclusão do espalhamento por Ionização por Impacto. Para temperaturas no intervalo de 150K a 300K não foi observado o efeito da CDN. Este resultado

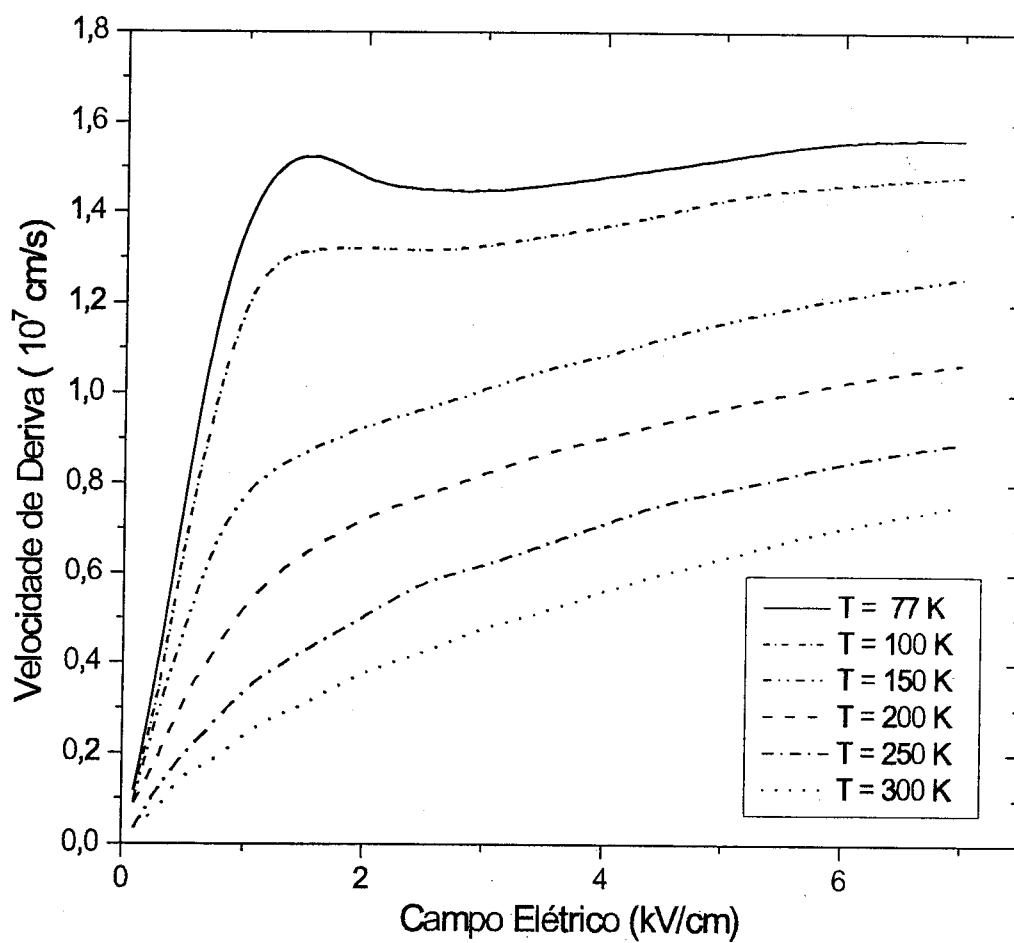


Figura 4.2: Velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico para diversas temperaturas usando o modelo BH no GaSb. A concentração de impurezas é $N_i = 10^{16}$ cm^{-3} , não sendo incluído o efeito de compensação neste cálculo.

já era esperado para o GaSb pois admite-se que não haverá CDN [64], quando a separação de energia $\Delta_{\Gamma L}$ for menor ou comparável à $4k_bT$. Esta condição é satisfeita no intervalo de temperaturas compreendidas entre 150K a 300K, porém a 100K, $\Delta_{\Gamma L}$ é maior que $4k_bT$ e mesmo assim o efeito CDN ainda não se manifesta (este efeito será explicado mais adiante). Ainda na mesma figura, observamos que para a curva que corresponde à temperatura de 77K, o efeito de CDN é observado. A população de elétrons nos vales Γ , L e X para as temperaturas de 77K e 300K estão apresentadas na figura 4.3. Nota-se que para 300 K a população do vale L é predominante em todo o intervalo observado e o vale Γ permanece estável em baixo campo e posteriormente tende a decair. O vale X não têm uma população apreciável no intervalo considerado. Apesar do comportamento observado a tendência é que para altos campos, o vale L comece a decair, sendo que o vale Γ começará a ter uma população desprezível e o vale X tenderá a crescer. No entanto, a 77K o vale Γ é predominante em baixos campos e o vale L é o segundo mais populado. À medida que o campo vai aumentando, o vale L aumenta e o vale Γ diminui até em torno de 2 kV/cm, valor para o qual o vale L torna-se mais populoso. Esta diferença de comportamento no GaSb, entre as duas temperaturas nestas condições, ajuda a explicar o porque que a 77K há CDN e a 300K o efeito não é observado. Pois quando o vale L é mais populoso que o vale Γ , em baixos campos, é impossível pelo efeito da transferência de população entre vales, haver a condutividade diferencial negativa CDN, porém o inverso não é verdadeiro.

A figura 4.4 apresenta a energia média do elétron em função do campo elétrico para várias temperaturas. A 77 K pode ser visto que a energia aumenta rapidamente até alcançar 0.06 eV, evidenciando a alta taxa de transferência de elétrons do vale Γ para o vale L. A partir de 2 kV/cm, a energia passa a aumentar mais lentamente pois grande parte da população de elétrons está no vale L, sendo que a taxa de relaxação da energia do espalhamento intervale é maior que a do espalhamento polar óptico no vale Γ . Nota-se que para 300 K o comportamento da energia é quase linear pois no GaSb à temperatura ambiente grande parte dos elétrons já encontram-se no vale L, e a medida em que a temperatura vai diminuindo, o aumento inicial da energia fica cada vez mais pronunciado.

O efeito da concentração de impurezas no transporte eletrônico é apresentado na figura 4.5 para três diferentes valores de concentrações de impurezas. Observando o com-

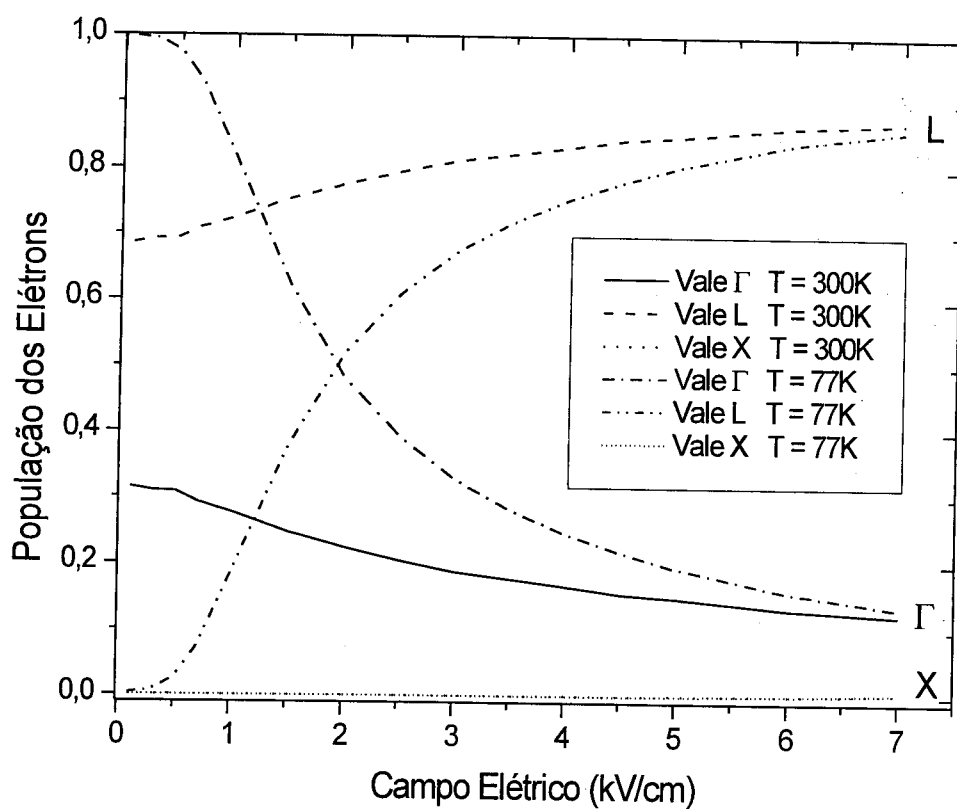


Figura 4.3: População para elétrons nos vales Γ , L e X em função do campo elétrico para duas temperaturas. O modelo utilizado no espalhamento por impurezas foi o BH e a concentração de impurezas é $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (não foi incluído compensação neste cálculo).

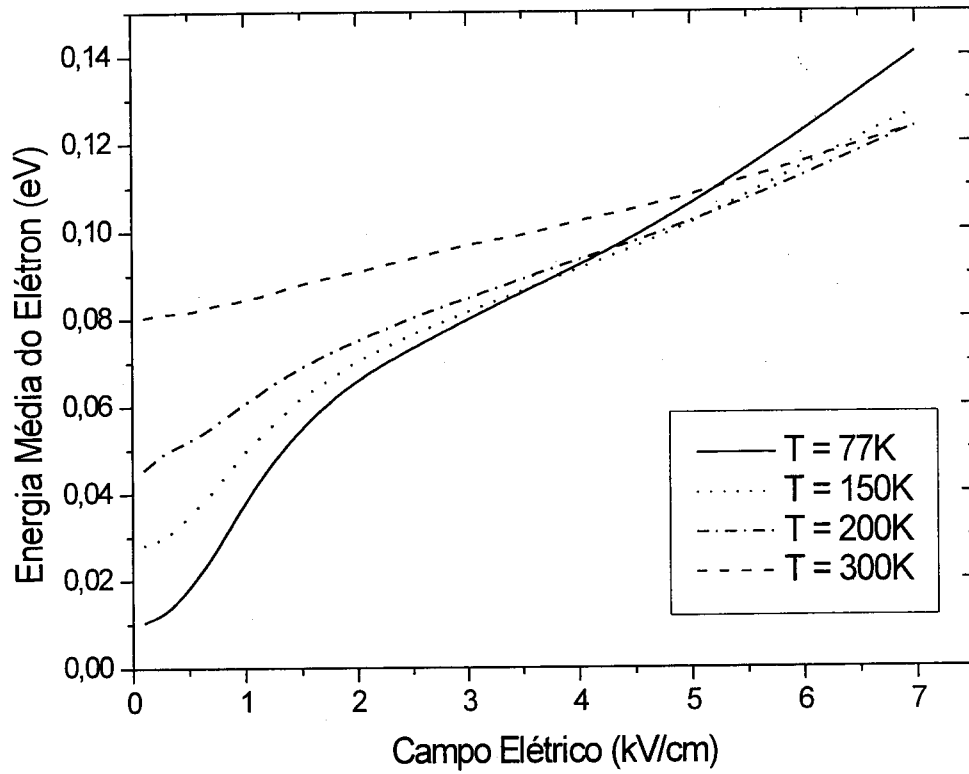


Figura 4.4: Energia média calculada através do método de Monte Carlo para diferentes temperaturas. O modelo de impurezas utilizado foi o BH. (Não considerando o efeito de compensação). A concentração de impurezas é 10^{16} cm^{-3} .

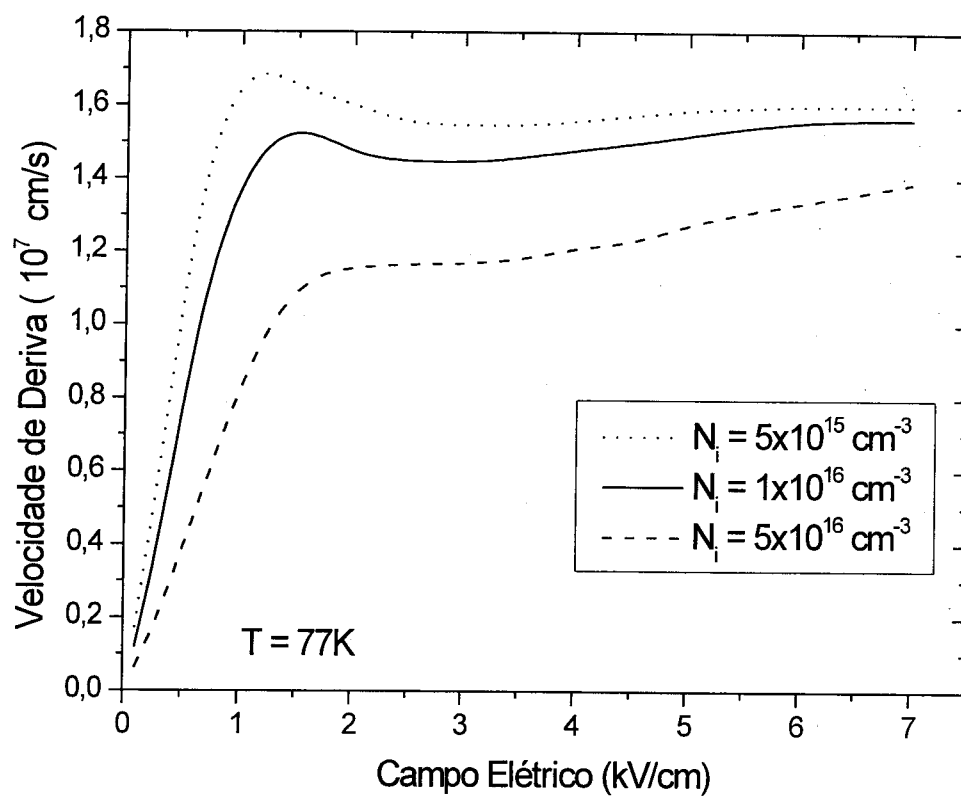


Figura 4.5: A velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico no GaSb para várias concentrações de impurezas e sem compensação. O modelo de impurezas utilizado foi o de BH.

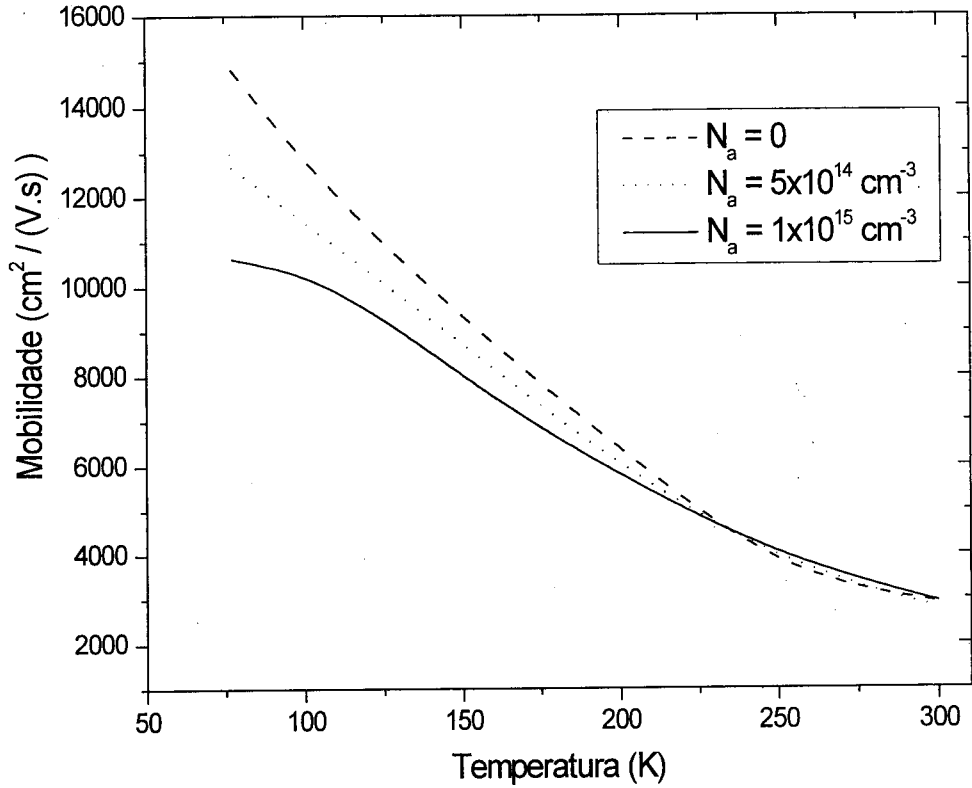


Figura 4.6: Mobilidade em função da temperatura para várias concentrações de aceitadores e para concentração de impurezas de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ usando o modelo BH.

portamento da velocidade em função do campo elétrico, nota-se que para as concentrações de $N_i = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ e $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ocorre o efeito da CDN, porém a partir de $N_i = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ o efeito não é mais observado, mesmo a 77K, que satisfaz plenamente a condição $\Delta_{\Gamma L} > 4k_b T$. O efeito da condutividade diferencial negativa é destruído devido a um aumento da concentração de impurezas, que causa uma diminuição na velocidade de pico do elétron. Comportamento similar foi observado por Ikoma et. al.[63] no $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{Sb}$, efeito este que pode explicar o comportamento observado a 100K na figura 4.2. Pois assim como o aumento da concentração a 77 K foi suficiente para destruir o efeito da CDN, a 100K uma concentração menor de impurezas pode também ter destruído o CDN a 100K.

Na figura 4.6, apresentamos a mobilidade em função da temperatura para diferentes concentrações de aceitadores para uma concentração de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Neste cálculo incluímos o efeito da compensação, como descrito anteriormente. Para $N_a=0$ esperávamos

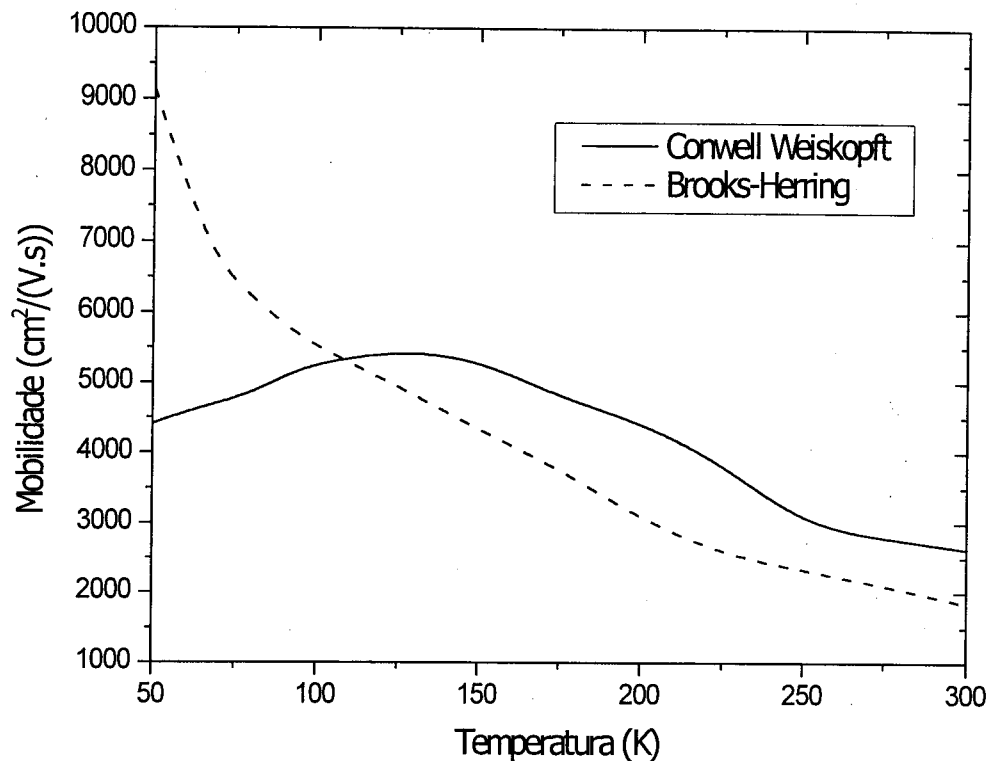


Figura 4.7: Comparação entre os modelos Brooks-Herring e Cowell-Weiskopf para o cálculo da mobilidade em função da temperatura. A concentração de impurezas é de $N_i = 6.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. (não foi utilizado compensação neste cálculo)

que a mobilidade decrescesse com a temperatura no intervalo considerado [65]. Quando a concentração de aceitadores aumenta a mobilidade decresce no intervalo de temperatura de 77K a 300K. A razão para este comportamento consiste no fato de que quando a concentração de aceitadores aumenta, para uma concentração fixa de impurezas, o espalhamento por impurezas aumenta. Para temperaturas acima de 200K o espalhamento por fônons ópticos é dominante e a influência do espalhamento por impurezas é relativamente pequena.

Na figura 4.7 apresentamos uma comparação entre os modelos de Conwell e Weiskopf [11], e o modelo de Brooks e Herring[12] para o espalhamento por impurezas. Para realizar estas simulações, utilizamos o mesmo procedimento adotado quando fizemos a simulação com o modelo de BH. Simulamos a velocidade do elétron à temperatura ambiente de modo a ajustar os parâmetros, para que estes concordassem com o experimental (figura 4.1). Os parâmetros são os mesmos da tabela 4.1, com exceção dos valores para os poten-

ciais de deformação intervale: i) $\Xi_{\Gamma X} = 0.3 \times 10^9$ eV/cm; ii) $\Xi_{LL} = 0.7 \times 10^9$ eV/cm; iii) $\Xi_{LX} = 0.1 \times 10^9$ eV/cm; iv) $\Xi_{XX} = 0.5 \times 10^9$ eV/cm. Nesta figura, apresentamos a mobilidade em função da temperatura comparando ambos os modelos. Observamos que à medida com que a temperatura vai decaindo de 300 K para 50 K, no modelo CW há um aumento da mobilidade até uma temperatura em torno de 125 K e posteriormente há uma queda da mobilidade. O aumento da mobilidade com a queda da temperatura deve-se a que o espalhamento polar óptico, que é dominante, começa a perder sua importância com a temperatura, já que as vibrações da rede tornam-se menos intensas. Com o decréscimo da importância do mecanismo polar óptico, o espalhamento por impurezas em baixas temperaturas torna-se dominante e a mobilidade decai. Por outro lado, no modelo BH a mobilidade aumenta continuamente, apesar do mecanismo de impurezas ionizadas tornar-se dominante, ainda que a influência deste mecanismo no transporte é cerca de duas vezes menor em relação ao modelo CW. Contudo, o que pode explicar o comportamento da mobilidade neste modelo é a observação de que o número de vezes com que o elétron interage com este mecanismo não varia muito à medida em que a temperatura vai decaindo. Apesar de na literatura, a maior parte dos trabalhos serem feitas baseando-se no modelo BH, há trabalhos discutindo quando é mais conveniente utilizar o método BH ou o de CW [23] [66]. Ridley[66] estabeleceu uma ponte entre os dois métodos: em geral para concentrações baixas ou em condições de forte compensação, o método CW é mais adequado, em caso contrário, o BH é o indicado [4] [23]. Além disto, Ridley estabeleceu um critério para a utilização do método CW ou BH que inclui a contribuição da temperatura. Baseando-se neste critério, podemos dizer que em quase todo intervalo de temperatura o modelo de Conwell-Weisskopf é o mais indicado, porém ainda este assunto merece um estudo mais aprofundado. Esta diferença apreciável entre estes dois modelos já foi reportada anteriormente por Briggs e colaboradores [23], que observaram uma diferença considerável entre os dois modelos para concentrações acima 10^{16} cm^{-3} .

No gráfico representado pela figura 4.8 apresentamos a mobilidade em função da temperatura para diversos graus de compensações, usando o modelo CW. Observamos que à medida que a compensação aumenta a mobilidade diminui e o valor máximo desloca-se para valores de temperatura maiores. O efeito do deslocamento do pico da mobilidade, deve-se

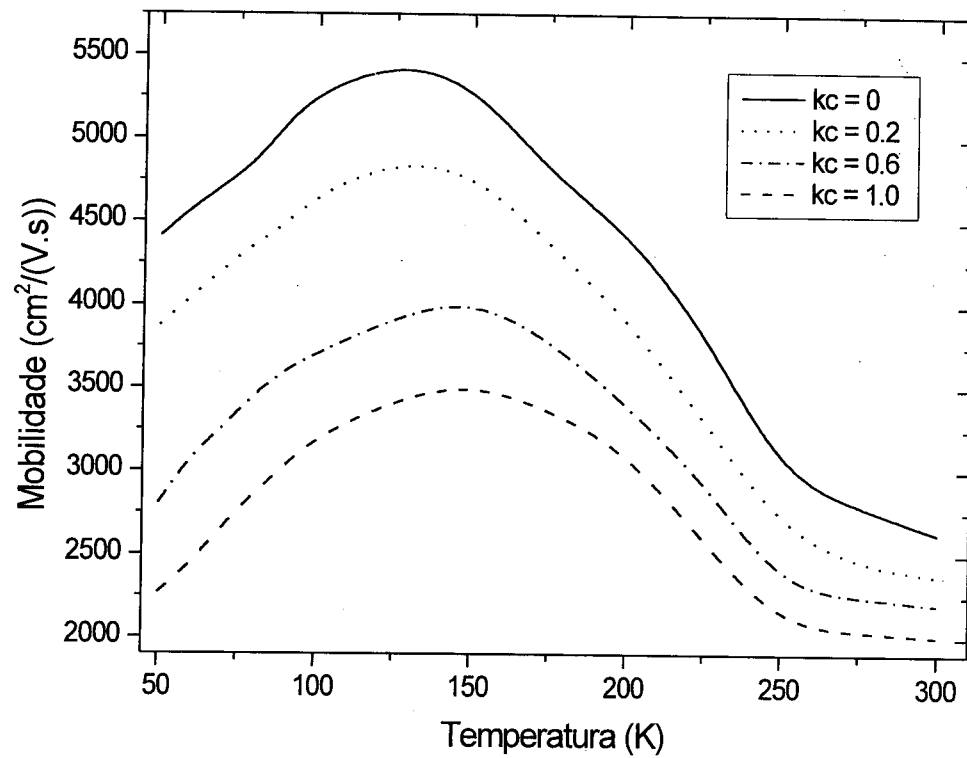


Figura 4.8: Mobilidade em função da temperatura para vários graus de compensação ($kc=N_a/N_d$) usando o modelo de CW. A concentração de impurezas foi de $N_i = 6.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

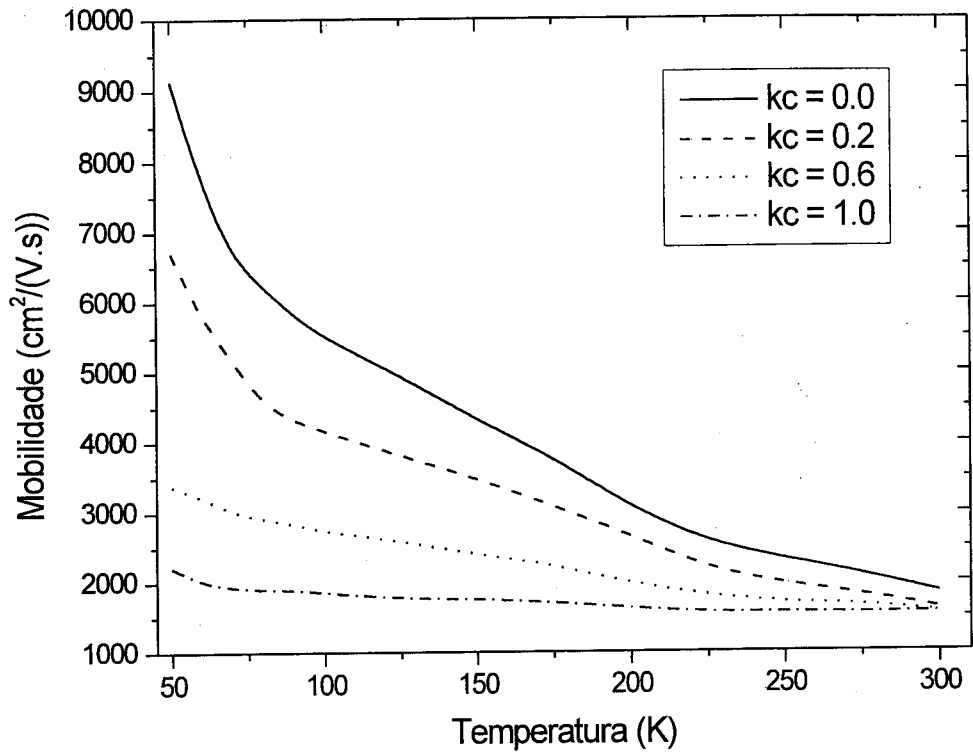


Figura 4.9: Mobilidade em função da temperatura para vários graus de compensação ($kc=N_a/N_d$) usando o modelo BH. A concentração de impurezas foi de $N_i = 6.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

ao fato de que quanto maior a compensação maior será a importância do mecanismo de impurezas ionizadas, ou seja, quanto maior a compensação maior será a temperatura em que este mecanismo começará a dominar, fazendo assim com que o pico da mobilidade seja deslocado.

O mesmo estudo feito para o modelo CW foi realizado para o de BH, sendo apresentado na figura 4.9. O comportamento da mobilidade em função da temperatura para vários graus de compensação é similar ao do modelo de CW somente em altas temperaturas. A medida em que a compensação vai aumentando, a mobilidade vai decaindo como era esperado, sendo que para $kc = 1$ a mobilidade varia muito pouco com a temperatura.

Finalmente na figura 4.10 faremos uma comparação da mobilidade para o caso em que o mecanismo de espalhamento piezoelétrico é incluído no modelo. Faremos isto para estudar o efeito deste mecanismo nos resultados anteriores. O efeito deste espalhamento é

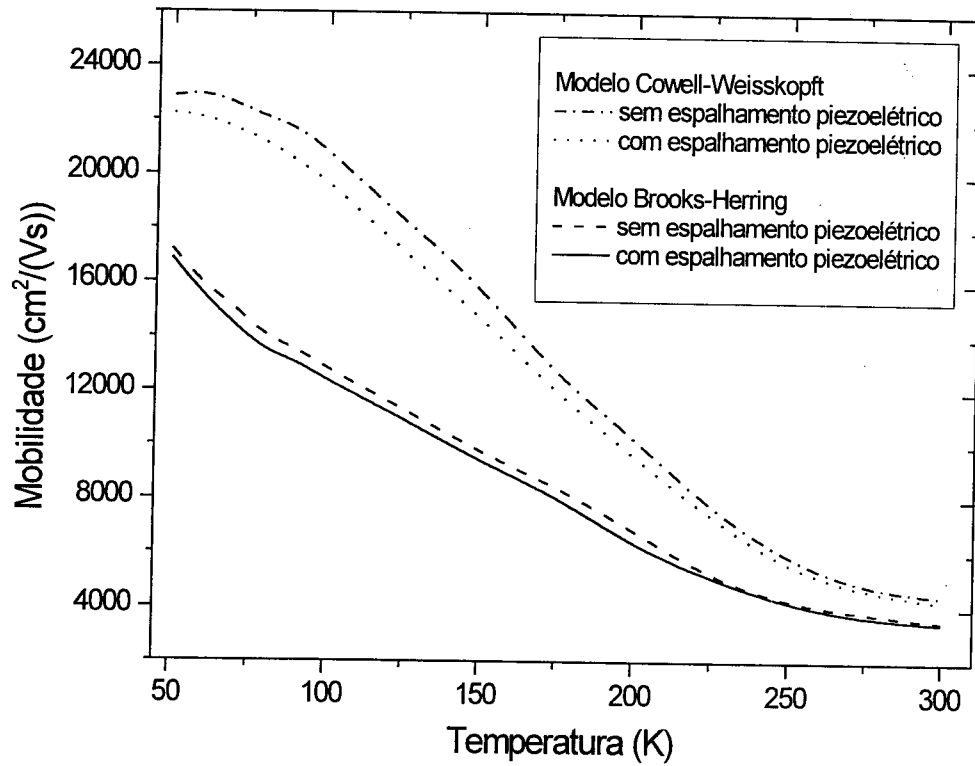


Figura 4.10: Mobilidade em função da temperatura para o GaSb no caso em que o mecanismo de piezoelétrico é ou não considerado. Esta análise foi realizada com ambos os modelos Brooks-Herring (BH) e Cowell-Weisskopf (CW) para uma concentração de $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

estudado considerando ambos os modelos de espalhamento por impurezas para uma concentração de 10^{16} cm^{-3} . Nossa motivação para esta comparação foi o trabalho de Rode [65], que apresenta uma diferença significativa na mobilidade quando da inclusão do espalhamento piezoelétrico. Utilizando o modelo BH observamos que há uma diferença, porém ela é pequena e da ordem de 2%, insignificante para temperaturas acima de 200 K. Por outro lado no caso do modelo de CW a diferença é da mesma ordem, entre 3% a 4%, em baixas temperaturas mas assim como no modelo BH acima de 200 K a influência do espalhamento piezoelétrico é muito pequena. Em ambos os casos apesar de haver uma pequena diferença mesmo em baixas temperaturas, esta diferença é consistente em todo o intervalo considerado. Apesar de nosso resultado concordar com o resultado de Rode[65], a diferença obtida pelo trabalho deste autor é maior do que a obtida em nossos cálculos. Esta diferença pode ser atribuída ao fato de que o modelo de Rode utilizou como base a técnica iterativa [2]. Usando esta técnica, baseada na equação de Boltzmann, calcula-se a função distribuição como uma função isotrópica $f_0(k)$ a $F = 0$ mais a função distribuição perturbada $g(k)$, expressa por:

$$f(k) = f_0(k) + \cos \Phi g(k),$$

onde Φ é o ângulo entre \mathbf{k} e \mathbf{F} . Para obter a função distribuição perturbada, ele calculou as taxas de espalhamento através da regra de ouro de Fermi considerando os seguintes mecanismos: 1 - fônons ópticos, 2 - fônons acústicos e 3 - piezoelétrico, e posteriormente somando-as (regra de Matthiessen) para incluí-las no cálculo. Encontrando-se a função distribuição a mobilidade pode ser calculada. Neste modelo Rode não incluiu o espalhamento por impurezas ionizadas, o qual é fundamental no GaSb.

4.2 Transporte de buracos em GaSb

Os resultados experimentais obtidos por Dutta e colaboradores[67], para a mobilidade de buracos no GaSb deram um grande avanço para a compreensão dos mecanismos de transporte no GaSb com dopagem p. No trabalho experimental de Dutta, há um modelo simplificado, onde a mobilidade é calculada através da regra de Matthiessen levando-se em conta as bandas de buraco leve e pesado. No trabalho de Damayanthi e colaboradores[68], a

partir do método MC, não foi levado em consideração o mecanismo de impurezas ionizadas, e o resultado obtido não está em acordo com os resultados de Dutta. Este fato nos motivou à realização deste trabalho.

4.2.1 Descrição do Modelo

Apresentamos neste item os cálculos da velocidade do buraco no estado estacionário para o GaSb tipo-p usando o método Ensemble Monte Carlo. As diferenças fundamentais entre o transporte de elétrons e o de buracos em termos do método de Monte Carlo, são a estrutura de banda e as taxas de espalhamento. A banda de valência "warp" é incluída considerando que é o modelo analítico mais aceito [4] [6]. Neste modelo a relação entre a energia e o vetor de onda k é dada pela equação:

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left\{ Ak^2 \pm [B^2k^4 + C^2 (k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_x^2k_z^2)]^{1/2} \right\}. \quad (4.2)$$

As constantes A, B e C foram retiradas da literatura, e os valores utilizados no cálculo para o GaSb foram: $A = 11.80$, $B = 8.06$, $C = 11.71$ [6].

No transporte de buracos, assim como no transporte de elétrons, o espalhamento polar óptico é um mecanismo fundamental [4], sendo um dos mecanismos dominantes no transporte. O espalhamento acústico [4] também é incluído na versão inelástica. A principal razão é que realizamos cálculos a baixa temperatura onde a aproximação ($k_b T \gg \hbar\omega_{ac}$) não é mais válida. Em nosso modelo incluímos as bandas de buracos leve e pesado, portanto também é necessário incluir o mecanismo de espalhamento intervale [18], além disto, como pretendemos estudar o efeito das impurezas no transporte, incluímos o mecanismo de impurezas ionizadas adotando o modelo CW, representado pela equação (2.74). A maioria dos parâmetros foram retirados da literatura e apenas os parâmetros que ainda não estão bem estabelecidos, como o potencial de deformação acústico e o óptico é que foram ajustados para que nossos resultados concordassem com os resultados experimentais recentes para a mobilidade em função da temperatura [67]. Fixados estes parâmetros foi feito um estudo da velocidade de deslocamento do buraco em função do campo elétrico para duas temperaturas. Os parâmetros usados em nossa simulação estão apresentados na tabela 4.2

Parâmetros usados na simulação de Monte Carlo	Valores
massa efetiva do buraco pesado	0.05
massa efetiva do buraco leve	0.22
Parâmetros Warp ($ A , B , C $)	11.80, 8.06, 11.71
Potencial de Deformação Acústico (eV)	3.0
Potencial de Deformação Óptico (eV/cm)	0.6×10^9
Densidade (g/cm ³)	5.613
Energia do fônon interbanda (meV)	32.90
Energia do fônon Óptico (meV)	32.90
Permitividade Relativa (alta frequência)	14.44
Permitividade Relativa (estática)	15.69

Tabela 4.2: Parâmetros usados na simulação para o transporte de buracos no GaSb.

4.2.2 Resultados

Inicialmente comparamos na figura 4.11 o resultado da simulação da mobilidade em função da temperatura com o resultado experimental da Dutta e colaboradores [67]. A concordância do nosso resultado com o resultado experimental é boa no intervalo de 90K a 300K. Apesar de termos incluído o efeito da variação da massa efetiva com a temperatura, na tentativa de se obter um resultado mais acurado, ainda há fatores que influenciam o transporte e que não foram levados em consideração, e com origem em fenômenos distintos. O primeiro foi identificado por Dresselhaus [69], e surge de um efeito da falta de simetria de inversão em estruturas "zinc-blend", que faz com que a expressão dada pela equação (4.2) não seja precisa em baixas temperaturas, o qual foi demonstrada por Robert e colaboradores [70]. Este fenômeno desloca a banda de valência de modo que o mínimo não se localiza mais no ponto Γ . Segundo Robert [70] este efeito, a partir de 77 K, é grande o suficiente para afetar as propriedades de transporte. Outro ponto é que não estamos levando em consideração uma mudança na estrutura da banda de valência devido a temperatura, ou seja, estamos considerando que as constantes A, B, e C não variam com a temperatura. Isto não foi implementado porque, até o momento, não há na literatura nada que represente a variação da banda de valência com a temperatura.

Na figura 4.12, mostramos a velocidade de deriva do buraco em função do campo elétrico aplicado para duas temperaturas. Observamos que a temperatura ambiente, a

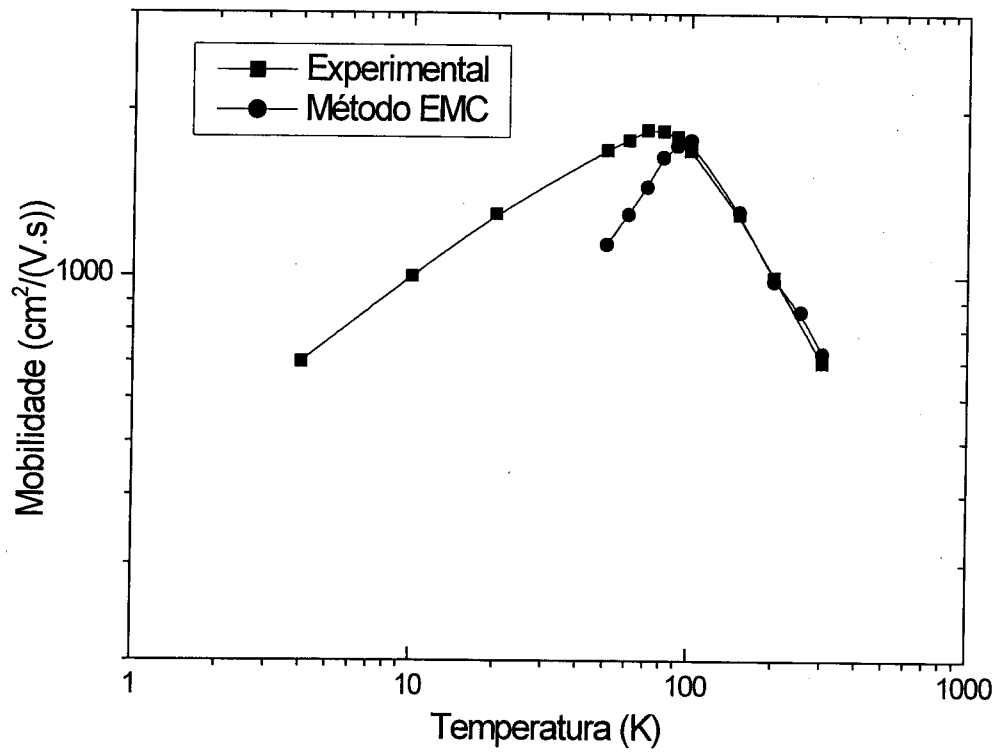


Figura 4.11: Mobilidade de buracos em função da temperatura. Compara-se o resultado experimental[67] com o obtido pelo método de EMC.

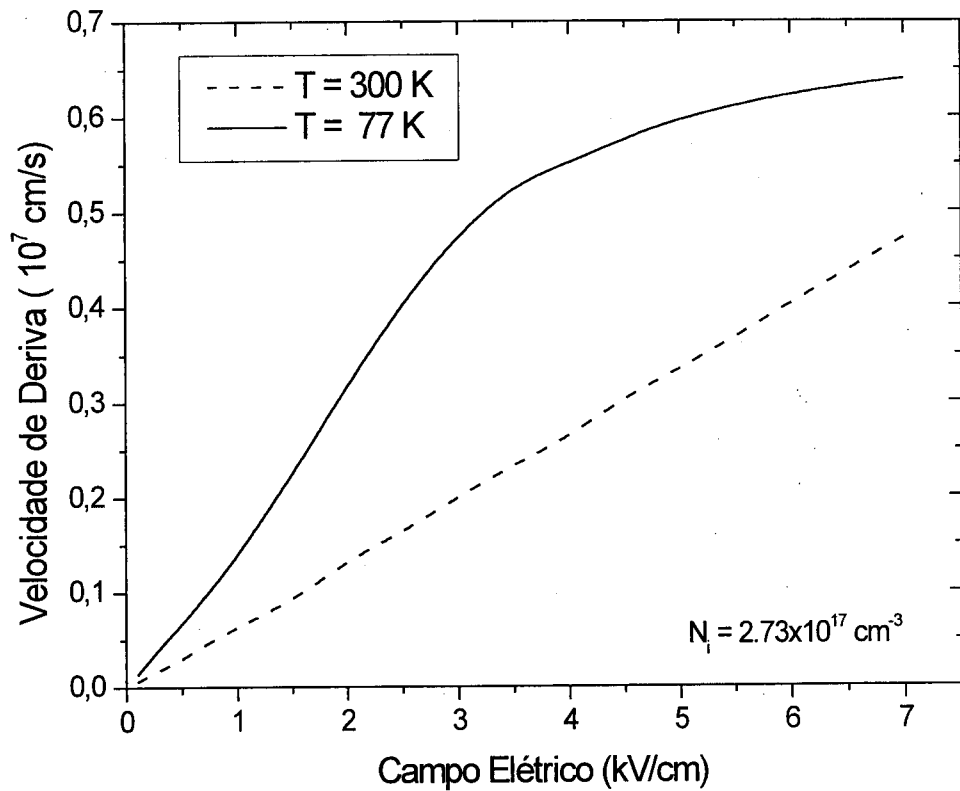


Figura 4.12: Velocidade de deriva do buraco em função do campo elétrico para duas temperaturas, e para uma concentração de $2.73 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

velocidade do buraco aumenta linearmente no intervalo observado, ou seja, a relação $v_e = \mu F$ ainda é válida, isto significa que os mecanismos dissipativos ainda não começaram a atuar em campos abaixo de 7 kV/cm. Por outro lado, o comportamento da velocidade a 77 K têm um aumento linear apenas até 3 kV/cm, sendo que acima deste campo, a velocidade começa a saturar e estimamos que a velocidade de saturação esteja em torno de $0.7 \times 10^7 \text{ cm/s}$.

Na figura 4.13, apresentamos a população de buracos em função do campo elétrico para duas temperaturas. A 300K a população de buracos comporta-se usualmente ficando praticamente constante em todo o intervalo considerado. Porém a 77K, em torno de 3.5 kV/cm, acontece uma inversão da população entre os vales de buraco pesado e buraco leve. A inversão de população está associada com o espalhamento intervale que é um mecanismo dissipativo, a desaceleração da velocidade dos buracos deve-se ao mecanismo de

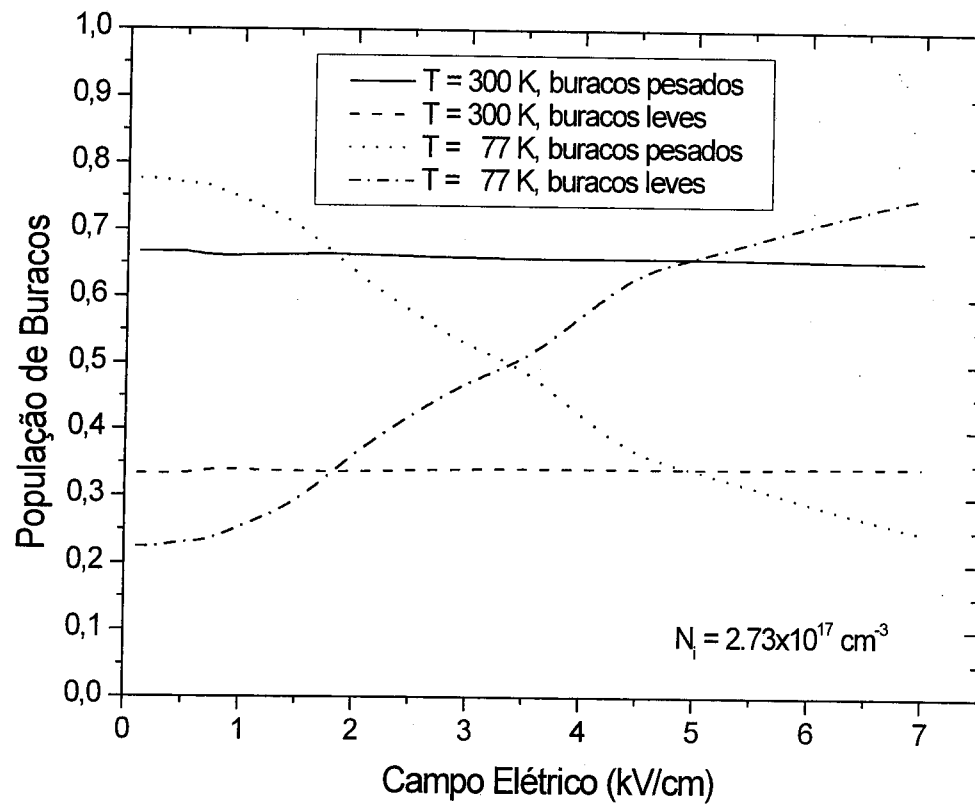


Figura 4.13: População de buracos calculada para o GaSb a $T = 300 \text{ K}$ e $T = 77 \text{ K}$. A concentração de impurezas é $2.73 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

espalhamento intervale que se torna efetivo a esta temperatura.

4.3 Conclusões

4.3.1 Conclusões para o transporte no GaSb tipo-n

Neste capítulo apresentamos um estudo do transporte eletrônico no GaSb a partir do método de MC. Consideramos os casos compensado e não compensado, e seus efeitos no transporte eletrônico. Observamos que o fenômeno da CDN ocorre a 77K mas pode ser suprimido devido ao aumento da concentração de impurezas. Para uma concentração fixa de impurezas, porém variando-se a concentração de aceitadores, vimos que no intervalo de temperatura de 77K a 200K, que quanto maior a concentração de aceitadores menor a mobilidade, mas para temperaturas próximas da ambiente, o espalhamento por fônons é dominante e o aumento na concentração de aceitadores não provoca nenhuma variação considerável. Observamos que a temperatura ambiente a população dos elétrons é majoritariamente localizada no vale L (mesmo em baixos campos). Por outro lado, a 77K o vale Γ é mais populado em baixos campos, porém a medida que o campo aumenta o vale L torna-se o vale mais populado. Isto explica porque a $T = 300K$ o GaSb não apresenta o fenômeno da CDN. Acreditamos que o modelo de Conwell-Weisskopf é o mais adequado para descrever o GaSb, primeiro por que neste material quando não é incluída nenhuma impureza intencional, os portadores majoritários são do tipo-p e segundo que num material do tipo-n sempre haverá alguma compensação e quanto maior a compensação mais favorecido será o modelo CW.

Estudamos também a influência do espalhamento piezoelétrico no GaSb e observamos que apesar de pequena esta influência é consistente, porém para altos campos este espalhamento não acarretará nenhuma mudança sensível nas propriedades de transporte.

Nosso modelo inclui alguns efeitos não usuais, como o efeito piezoelétrico e o espalhamento acústico inelástico. O espalhamento acústico torna-se mais presente em baixas temperaturas, principalmente pelo fato de que o mecanismo de espalhamento intervale não atua tão eficientemente quanto na temperatura ambiente. Apesar do mecanismo por fônons ópticos ainda ser mais importante que o por fônons acústicos em baixas temperaturas, sua

participação no transporte diminuiu proporcionalmente mais do que o por fônons acústicos. Para aumentar ainda mais o grau de sofisticação do modelo, o próximo passo seria incluir a anisotropia da banda de condução. Para o GaSb o efeito da anisotropia pode ter uma influência mais profunda que no GaAs, já que no GaSb a diferença entre o vale Γ e o vale L é muito pequena e conseqüentemente o vale L domina o transporte para campos relativamente baixos. A exata relevância do efeito da anisotropia no GaSb é desconhecida porém em trabalhos similares em outros materiais onde a anisotropia é relevante, estima-se uma variação de 10% a 20% conforme o campo elétrico aumenta [48].

4.3.2 Conclusões para o transporte no GaSb tipo p

Estudamos as propriedades de transporte de buracos no GaSb, comparando os nossos resultados com resultados experimentais, sendo que a concordância para valores de temperatura entre 90 K a 300 K é boa. O único trabalho nesta direção[67] não têm seus resultados amparados por resultados experimentais e supõe que não há impurezas envolvidas no processo. O modelo inclui os mecanismos de espalhamento mais relevantes e o efeito de "warp". O efeito que a temperatura têm, sobre certos parâmetros, no GaSb também foi levado em consideração e provou ser essencial na obtenção de um resultado mais acurado. Acreditamos que a falha do modelo em reproduzir os resultados para baixas temperaturas, deve-se a efeitos da estrutura de banda do GaSb que tornam a expressão analítica (4.2) inapropriada. Um outro efeito que eventualmente tenha importância, seria a variação da massa efetiva do buraco leve e a blindagem. Este efeito não foi incluído em nossos cálculos porque não encontramos na literatura, como a massa efetiva se comporta em função da temperatura. Estes efeitos poderiam explicar a queda da mobilidade, pois se houvesse um comportamento similar para buracos leves como têm para os buracos pesados, isto implicaria em um aumento deste parâmetro.

Capítulo 5

Elétrons quentes em CdTe e

Cd_{1-x}Mn_xTe

5.1 Introdução

O telureto de cádmio é considerado um dos mais importantes compostos semicondutores do grupo II-VI, em consequência de sua ampla aplicação em dispositivos eletrônicos. Porém, recentemente o CdTe está tendo um interesse maior, devido às aplicações de seu terciário o Cd_{1-x}Mn_xTe. Diversos estudos teóricos e experimentais têm demonstrado que este composto abre uma área fértil de pesquisa devido a interação de troca entre os portadores e os íons magnéticos Mn²⁺[71]. Este material é conhecido como semicondutor magnético diluído (SMD), apresentando uma variedade de tipos de polarôns[72]-[73], resultantes do aparecimento de uma polarização ocasionada pela interação de troca entre seus "spins". Este tipo de fenômeno afeta as propriedades de um semicondutor magnético e semi-magnético. Este material têm sido estudado tanto experimentalmente [74]-[75] quanto teoricamente[71] [76]. Estudos envolvendo propriedades eletrônicas de super-redes[76], estrutura de banda [71], e também na confecção de fotodetetores, mostram o grande potencial deste material. Outro ponto fundamental é que não existe na literatura cálculos

sobre a influência do efeito piezoelétrico nas propriedades de transporte. Existem evidências experimentais da formação de vidros de spin, porém há ainda uma grande dificuldade experimental em se preparar amostras de boa qualidade do $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ com $x \geq 0.7$ [77]. Neste capítulo estudaremos o transporte eletrônico no Telureto de Cádmio através da técnica de MC, utilizando nos cálculos o modelo de três bandas. Na literatura os cálculos para o CdTe são feitos a partir do modelo de duas bandas levando em consideração apenas os vales Γ e L. Este procedimento é devido à grande separação entre os vales Γ e X e à falta de parâmetros relacionados ao vale X. Todavia ao estudar o CdTe é comum alcançar campos da ordem de 50 kV/cm a 100kV/cm, e para um campo tão alto, pode-se observar a influência do vale X no transporte eletrônico. Além do estudo do CdTe, será estudada a influência da concentração de Mn nas suas propriedades de transporte, ainda sem relatos na literatura.

5.2 Descrição do Modelo

Os cálculos do transporte eletrônico foram realizados através do método EMC. O transporte no CdTe é feito considerando os pontos de simetria Γ , L e X. A relação de dispersão é representada por um modelo analítico não parabólico[4] [6] [8]. O modelo para o CdTe e para o $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ levam em consideração os seguintes mecanismos de espalhamento: Fônons acústicos; fônons ópticos; impurezas ionizadas (modelo Brooks-Herring); piezoelétrico; ionização por impacto e espalhamento intervalente e não-equivalente. Para calcular adequadamente as propriedades de transporte do $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ é necessário levar em consideração a porcentagem do Manganês no material. As propriedades de transporte mudam sensivelmente quando varia-se a porcentagem de Manganês no material e alguns parâmetros, como o "gap", necessitam ser adequadamente descritos. Para descrever adequadamente o "gap", alterado pela variação do Manganês, usamos a expressão proposta por Long e colaboradores [71]:

$$E_{gap}^{\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}} = (1 - x)E_{gap}^{\text{CdTe}} + xE_{gap}^{\text{MnTe}} - bx(1 - x), \quad (5.1)$$

onde o fator b é 0.45 eV, $E_{gap}^{\text{CdTe}} = 1.606$ eV e $E_{gap}^{\text{MnTe}} = 3.193$ eV e o parâmetro x é a concentração de Mn no material. Da mesma forma, o valor de energia dos vales L e X, em

função da concentração de Mn, foram retirados da literatura e representados pelas seguintes relações[71] [78]:

$$\Delta_{\Gamma L} = 1.23 - 0.694x, \quad (5.2)$$

$$\Delta_{\Gamma X} = 1.89 - 0.02x. \quad (5.3)$$

A variação da massa efetiva do ponto Γ em função da concentração foi calculada por Long e colaboradores [71], e é obtida através da seguinte equação:

$$m_{\Gamma} = 0.11 + 0.067x, \quad (5.4)$$

porém a variação da massa efetiva em função da concentração para o vale L não foi encontrada na literatura e inferimos uma variação, a qual será usada em nosso trabalho, que está representada na seguinte relação:

$$m_L = 0.30 + 0.020x. \quad (5.5)$$

A massa efetiva no vale X foi arbitrada para um valor de $m_X = 0.9$, devido a baixa participação deste vale no transporte eletrônico no CdTe. Devido a falta destes resultados, faremos um estudo de como esta variação pode afetar as propriedades de transporte.

Fizemos um estudo simular ao efetuado para o GaAs de como o tamanho da amostra afeta o resultado e o tempo de simulação. Como o CdTe espalha mais que o GaAs para um mesmo dt , espera-se que ele necessite de uma amostragem menor que a do GaAs. Apesar de termos usado 10000 partículas em nossos cálculos, 8000 partículas seria amostragem razoável. O tempo de simulação, para o CdTe a $T = 77K$, pode variar de aproximadamente 22hs para 10000 partículas e 2hs para 2000 partículas, podendo também variar com a concentração de impurezas adotada e da temperatura da rede em que a simulação foi calculada. Os cálculos foram realizados numa estação Digital 233/400 128 RAM, em fortran 90 para uma média de 15 valores do campo elétrico por curva.

5.3 Resultados

Os resultados obtidos nestes cálculos, foram calculados com parâmetros extraídos da literatura, excetuando-se os potenciais de deformação $\Xi_{\Gamma X}$ e $\Xi_{ac\Gamma}$, sendo estes apresentados na tabela 5.1. Inicialmente apresentamos na figura 5.1 uma comparação entre o

Parâmetros usados na simulação de Monte Carlo	Valores
Potencial de Deformação Acústico (Γ) (eV)	3.0
Potencial de Deformação Acústico (L) (eV)	9.5
Potencial de Deformação Acústico (X) (eV)	9.5
Potencial de Deformação Intervale $\Gamma - L$ (eV/cm)	1.0×10^9
Potencial de Deformação Intervale $\Gamma - X$ (eV/cm)	0.5×10^9
Potencial de Deformação Intervale $L - L$ (eV/cm)	1.0×10^9
Potencial de Deformação Intervale $L - X$ (eV/cm)	1.5×10^9
Potencial de Deformação Intervale $X - X$ (eV/cm)	2.0×10^9
Separação entre vales $\Gamma - L$ a $T = 300K$ (eV)	1.23
Separação entre vales $\Gamma - X$ a $T = 300K$ (eV)	1.89
Densidade (g/cm^3)	6.06
Velocidade Média do Som (cm/s)	3.39×10^5
Permitividade Relativa (alta frequência)	10.60
Permitividade Relativa (estático)	7.21
Energia do fônon (intervale) (eV)	0.019
Energia do fônon (óptico) (eV)	0.0214

Tabela 5.1: Parâmetros usados na simulação do transporte eletrônico no CdTe.

resultado obtido pelo nosso modelo usando o Método de EMC, o resultado teórico de Borsari e Jacoboni [79] usando EMC e o resultado experimental de Canali[80] e colaboradores. Comparamos a velocidade de deriva do elétron a 300 K para uma concentração de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (sem a inclusão de compensação).

Observa-se que o nosso resultado está em boa concordância em relação aos resultados experimentais de Canali e colaboradores e com o resultado teórico de Borsari-Jacoboni[79]. As diferenças observadas entre o nosso resultado e o de Borsari, devem-se principalmente a uma diferença em alguns parâmetros e pelo fato da inclusão do vale X. Nosso modelo representa melhor o resultado experimental de 0 a 25 kV/cm enquanto o modelo de Borsari representa-o melhor em campos muito altos. As diferenças entre o nosso resultado e o resultado experimental podem ser atribuídas à presença de processos de captura-liberação nas amostras analisadas [81].

A população dos elétrons nos vales Γ , L e X, em função do campo elétrico aplicado a 300K e a 77K, estão representadas na figura 5.2. Analisando este gráfico vemos que quando o CdTe apresenta CDN, em torno de 14 kV/cm, a população do vale secundário ainda é

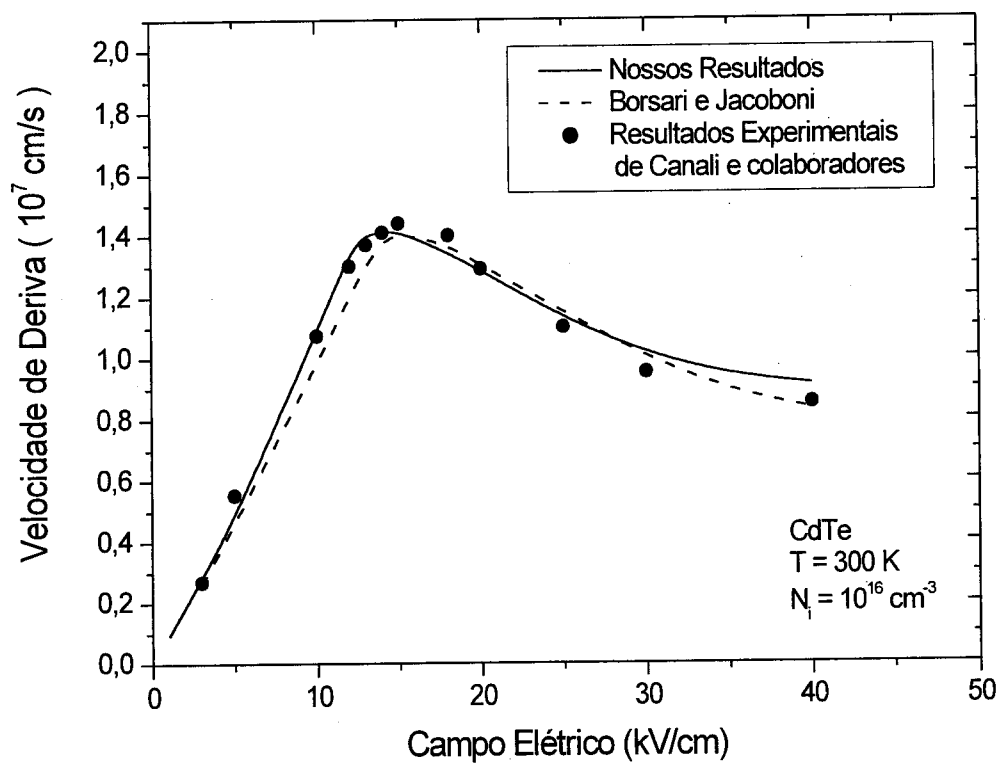


Figura 5.1: Velocidade do elétron em função do campo elétrico. Comparação entre o resultado do modelo proposto com o resultado experimental de Canali[80] e o resultado teórico de Borsari-Jacoboni[79].

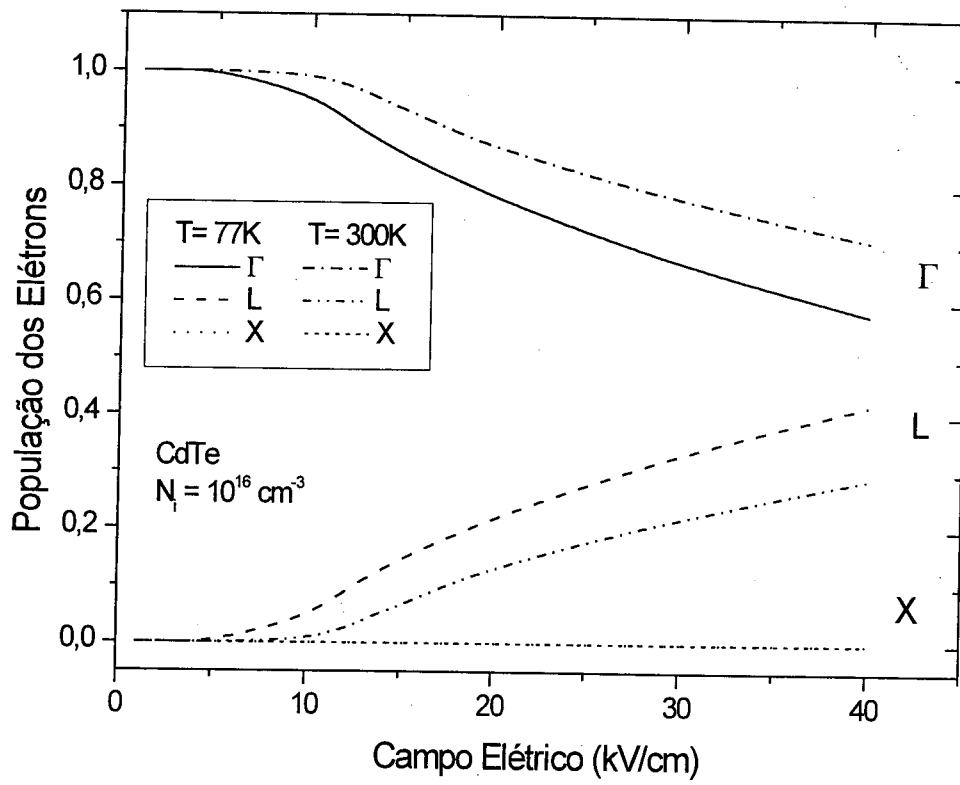


Figura 5.2: População de elétrons em função do campo elétrico à temperatura ambiente. Sem a inclusão de compensação e para uma concentração de impurezas de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

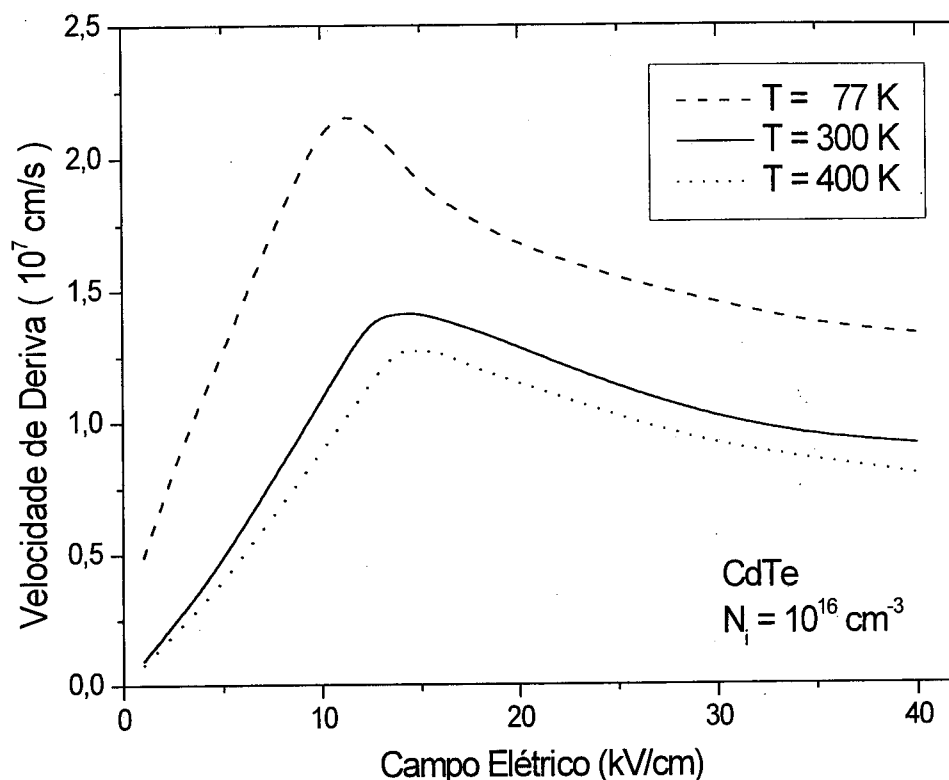


Figura 5.3: Velocidade do elétron como função do campo elétrico aplicado para temperaturas de $T = 77\text{K}$, $T = 300\text{K}$ e $T = 400\text{K}$.

pouco populado. Portanto no caso do CdTe a condutividade diferencial negativa não se deve a superação da população dos elétrons do vale L em relação à população do vale Γ , mas sim a randomização do espalhamento intervala, pelo fato deste mecanismo de espalhamento ser isotrópico. Este mecanismo por ser isotrópico vai espalhar igualmente os elétrons em todas as direções, fazendo com que a velocidade média do elétron diminua. Vemos que quando o espalhamento intervala começa a se tornar relevante é que a velocidade começa a decair e com o aumento da população do vale L tanto a randomização do espalhamento intervala como o aumento da população do vale L, contribuem para a diminuição da velocidade do elétron. Comparando a população do vale Γ para ambas as temperaturas, vemos que a população deste vale é sempre maior em todo intervalo considerado. Isto ocorre porque energeticamente torna-se mais fácil popular o vale L a 77K, devido a diminuição da separação da energia entre os vales $\Gamma - L$.

Na figura 5.3 apresentamos a velocidade de deriva em função do campo elétrico aplicado para três diferentes temperaturas e para uma concentração de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Ao contrário do que ocorre com o GaAs em baixas temperaturas não há um súbito decréscimo da mobilidade para baixos campos, isto indica que no CdTe a mobilidade é menos dependente da temperatura da rede, quando comparado com o GaAs. Observa-se que o campo em que se inicia o fenômeno da CDN, o qual iremos denominar de campo crítico, é bem maior no CdTe do que no GaAs. Isto se deve ao fato de que a diferença de energia entre o vale principal e o vale secundário ser muito maior no CdTe. A 77K, o pico da velocidade de deriva está em torno de $2.2 \times 10^7 \text{ cm/s}$, em torno de 11 kV/cm , enquanto que a velocidade de pico para 300K está em $1.42 \times 10^7 \text{ cm/s}$ à $E = 14 \text{ kV/cm}$ e já a 400 K a velocidade decai para $1.28 \times 10^7 \text{ cm/s}$ para um campo de 15 kV/cm . Vemos que o valor do campo que corresponde a velocidade de pico desloca-se de 11 kV/cm ($T = 77\text{K}$) para 15 kV/cm ($T = 400\text{K}$). A temperaturas mais baixas o espalhamento intervale atua em campos mais baixos fazendo com que o efeito randomizante do espalhamento por impurezas atue "mais cedo".

Na figura 5.4 apresentamos a velocidade de deriva em função do campo elétrico aplicado à temperatura ambiente. Neste gráfico estamos comparando a influência do vale X nas propriedades de transporte. Observamos que a influência deste mecanismo é pequena porém consistente e a sua inclusão foi suficiente para influir ligeiramente nos valores dos potenciais de deformação. A influência deste vale é relevante para o CdTe e para o $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ com $x \leq 0.1$. Para valores de x acima deste patamar, o vale X não é mais populado.

Na figura 5.5, comparamos a velocidade de deriva para várias concentrações de Manganês a $T = 300 \text{ K}$ para uma concentração de impurezas de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, (sem a inclusão do efeito da compensação). O campo crítico muda de 13 kV/cm a $x = 0$ para 20 kV/cm a $x = 0.5$, sendo que a explicação para este comportamento não é direta. O motivo para isto é que apesar da separação $\Delta E_{\Gamma L}$ diminuir com o aumento da concentração de Manganês, o que faria com que o campo crítico diminuísse com o aumento de x , por outro lado, a massa efetiva do vale central aumenta com x , fazendo com que os elétrons tenham mais dificuldade em aumentar sua energia de modo a serem transferidos para o vale L. Portanto, concluímos que o aumento do campo crítico com o aumento da concentração de

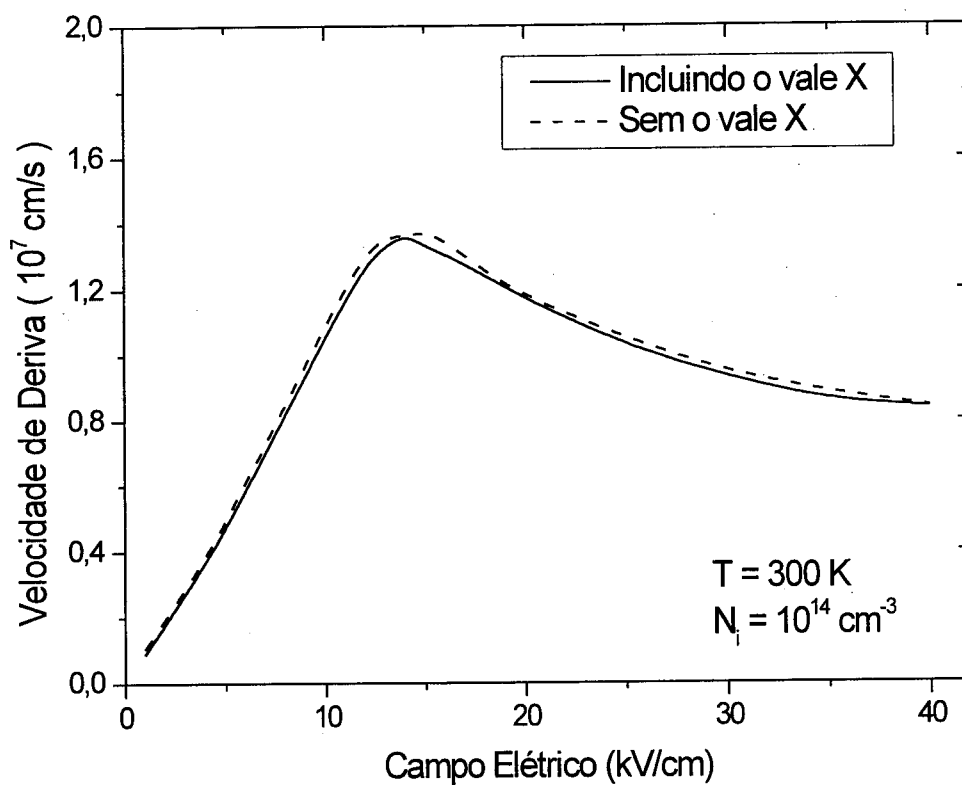


Figura 5.4: Velocidade de deriva em função do campo elétrico aplicado. Comparação entre a velocidade de deriva para a situação em que o vale X é incluído na simulação e para o caso em que desconsidera-se o vale X.

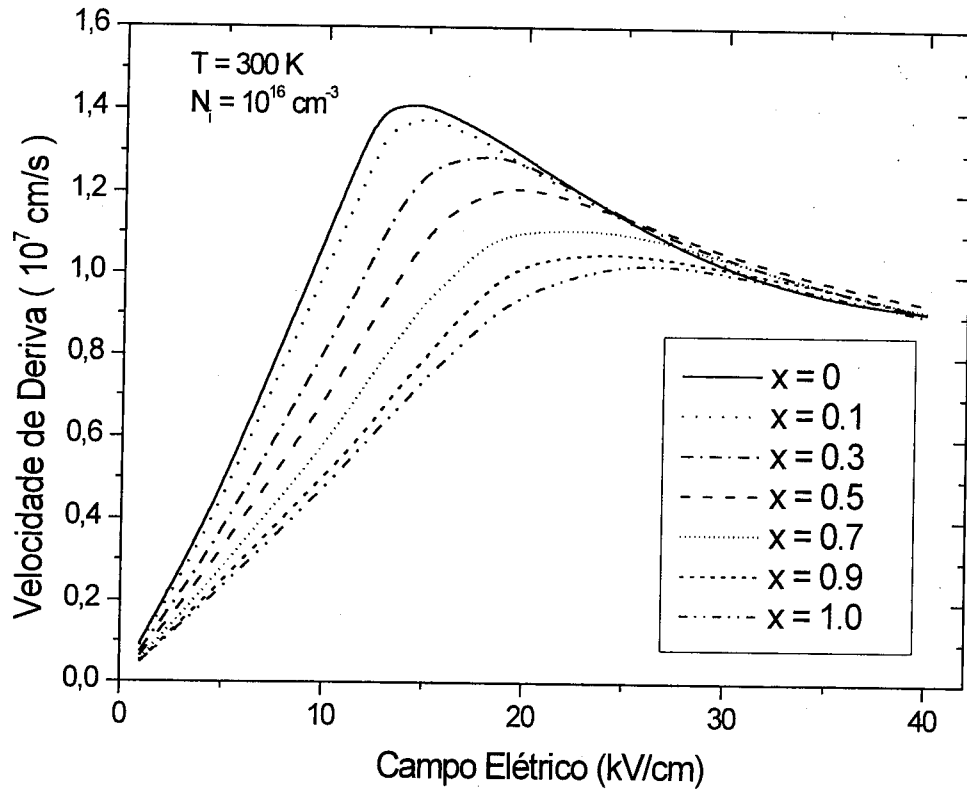


Figura 5.5: Comparação entre a velocidade de deriva do elétron para o Cd_{1-x}Mn_xTe para sete valores de concentração de Manganês.

Manganês, deve-se ao aumento da massa efetiva do vale Γ , que é preponderante em relação a diminuição da separação $\Delta E_{\Gamma L}$. A diminuição da velocidade de pico é consequência direta do aumento da massa efetiva dos vales Γ e L , e pela diminuição da separação $\Delta E_{\Gamma L}$. O único ponto surpreendente é que em altos campos a velocidade de saturação é ligeiramente superior a $x = 0.5$ e um pouco menor para $x = 1.0$. Caso este comportamento seja confirmado por dados experimentais, pode-se usar o $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ para aplicações em altos campos. Especulamos que este comportamento deva-se a um efeito de compensação. À medida em que a concentração de Manganês aumenta a energia média dos elétrons diminui, porém a diferença de energia $\Delta_{\Gamma L}$ diminui de acordo com a equação (5.2). Para altos campos, a diminuição da energia média e da diferença de energia $\Delta_{\Gamma L}$, ocorre aproximadamente na mesma proporção. Desta forma, os efeitos se compensam, tendo como consequência que em altos campos a velocidade de deriva, em função da concentração de Manganês, são próximas.

Na figura 5.6 apresentamos a energia média em função do campo elétrico aplicado para várias concentrações de Manganês. O cálculo foi feito com os mesmos parâmetros usados para o cálculo da velocidade de deriva. Observamos que a energia média decresce com o aumento da concentração de Manganês, sendo que este comportamento se deve a dois fatores: o aumento da massa efetiva e a diminuição da separação $\Delta E_{\Gamma L}$.

No gráfico 5.7 apresentamos a população dos vales em função do campo elétrico. A população do vale Γ a $x = 0.5$ é maior que a $x = 0$ durante todo o intervalo. Isto se deve ao fato de que o aumento da massa efetiva dificulta aos elétrons popularem o vale L , apesar da diminuição da energia entre os vales. Sendo assim, a diminuição da velocidade de deriva deve-se ao aumento da massa efetiva, nos vales Γ e L , do que da transferência intervale. Apesar de não ser visível no gráfico, a diferença na população do vale X a $x = 0.5$, torna-se ainda menor em relação ao CdTe .

A figura 5.8 apresenta a mobilidade em função da concentração de Manganês, com uma concentração de portadores de 10^{16} cm^{-3} . Observa-se que a mobilidade decai com o aumento da concentração, a diminuição da mobilidade se deve ao aumento da massa efetiva no vale Γ e L , e da diminuição da diferença de energia $\Delta E_{\Gamma L}$.

A figura 5.9 apresenta a dependência da temperatura das curvas velocidade-campo para o $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$, com uma concentração de impurezas de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. A velocidade

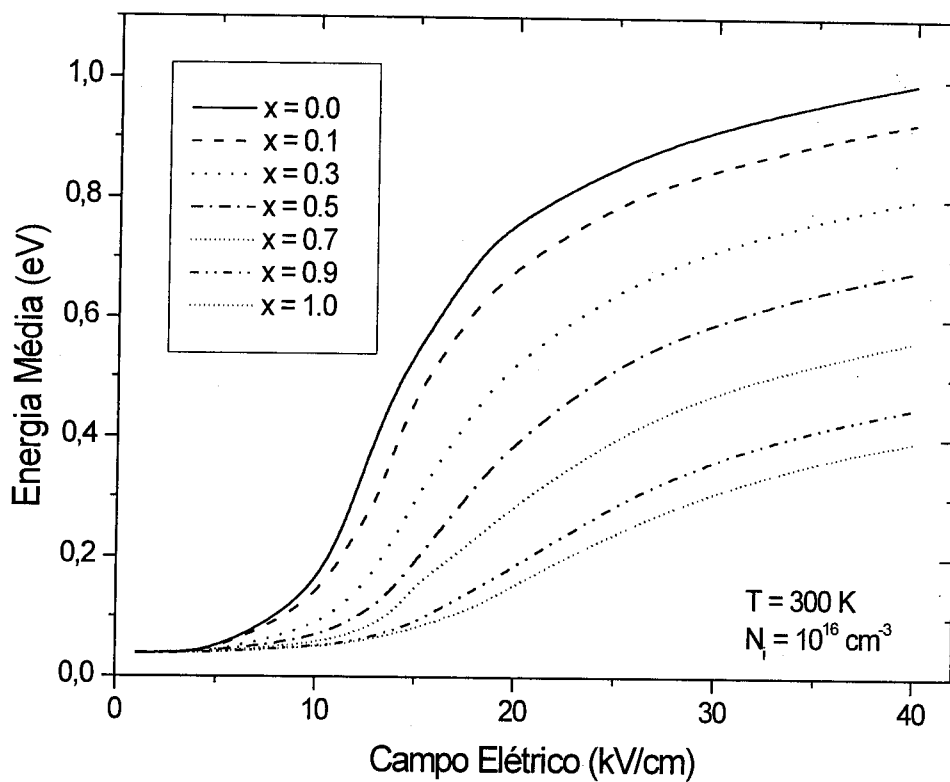


Figura 5.6: Energia média do elétron em função do campo elétrico aplicado, para várias concentrações de Manganês. O cálculo foi feito a temperatura ambiente e para uma concentração de impurezas de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

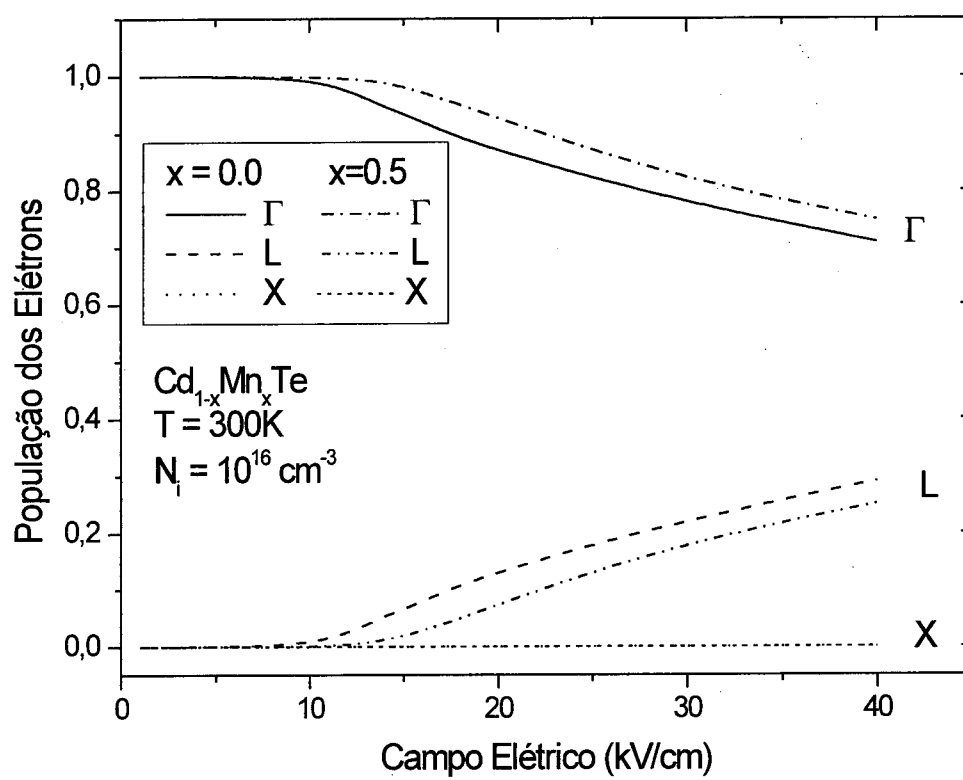


Figura 5.7: Comparação para a população dos elétrons em função do campo elétrico para duas concentrações de Manganês.

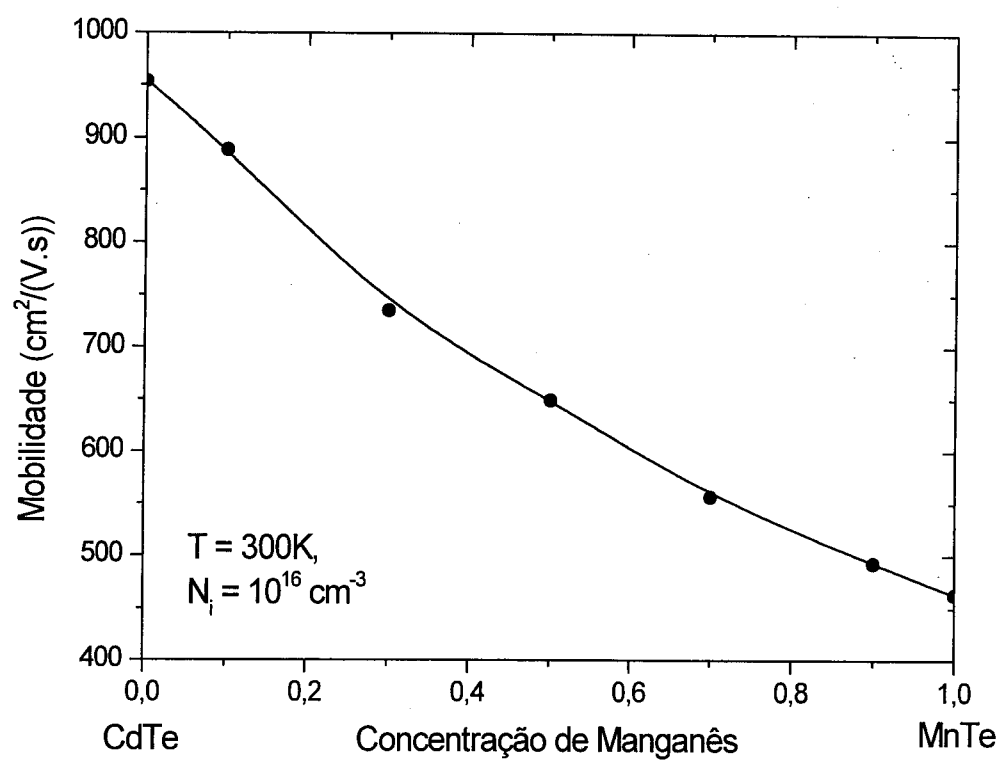


Figura 5.8: Mobilidade em função da concentração de Manganês.

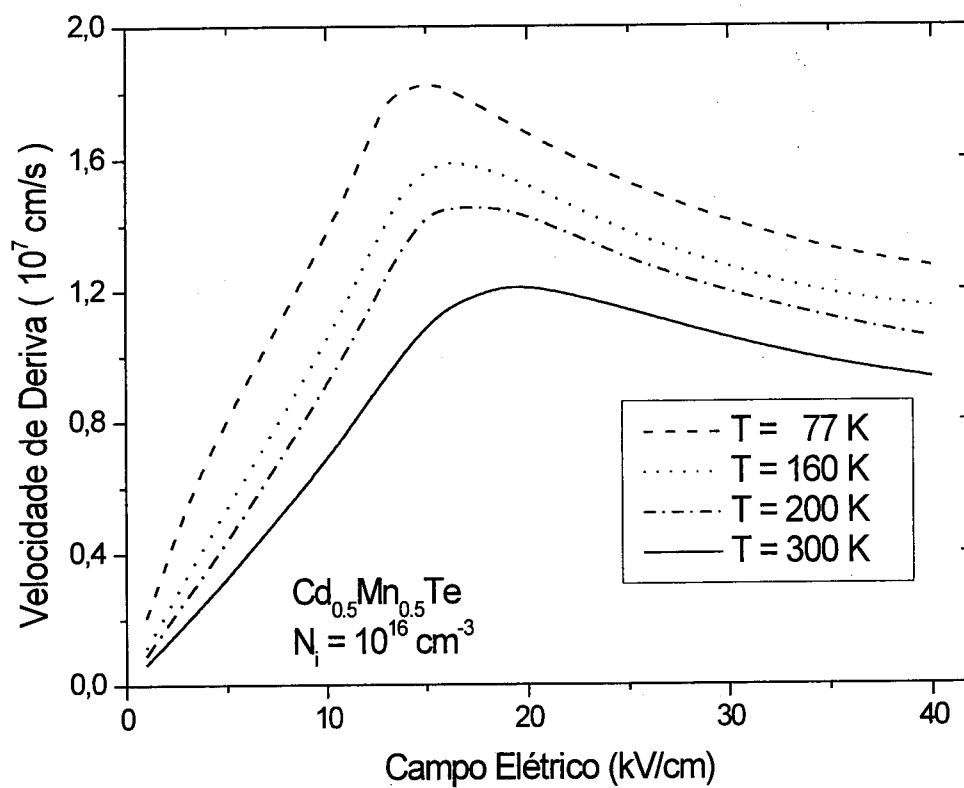


Figura 5.9: Velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico aplicado para várias temperaturas para o $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$.

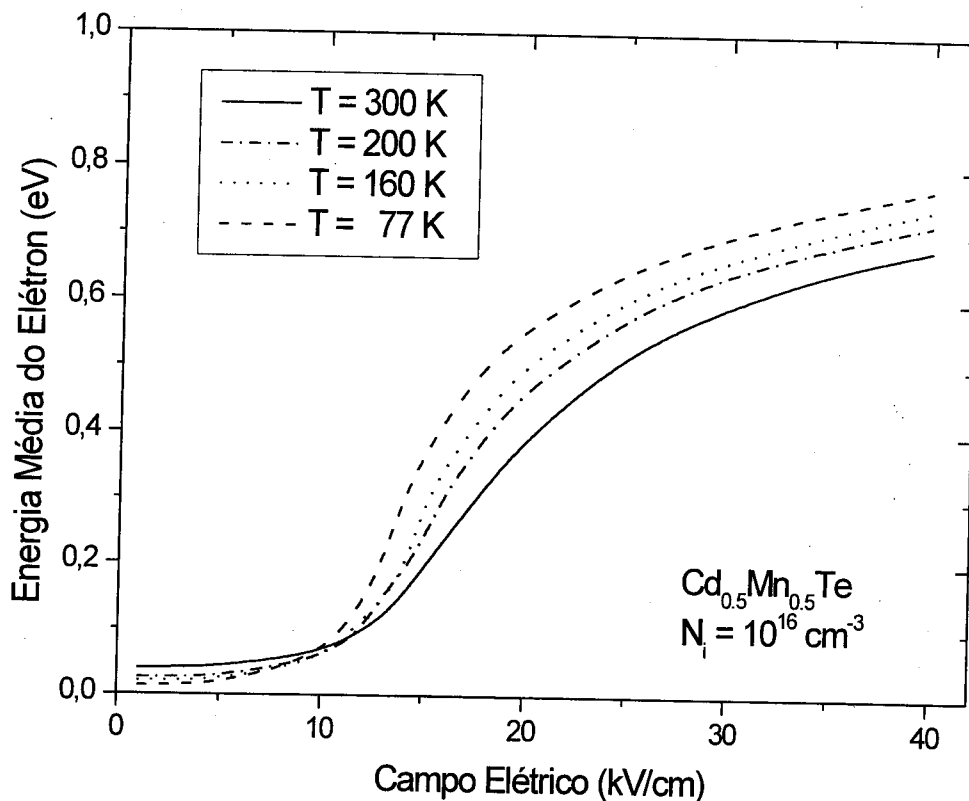


Figura 5.10: Energia média do elétron em função do campo elétrico aplicado para quatro temperaturas.

de pico a 77K é de 1.83×10^7 cm/s a 15 kV/cm e decresce a 300K para 1.22×10^7 cm/s a um campo de 20 kV/cm, um decréscimo de 33%. Há uma pequena variação da mobilidade antes do campo crítico, similar ao comportamento encontrado no GaAs nesta temperatura, mas não tão pronunciada. Isto ocorre, porque neste caso a emissão de fônons começa a se tornar significativa apenas em torno de 5 kV/cm. Quando isto ocorre, a mobilidade sofre uma diminuição e torna-se muito menos dependente da temperatura da rede.

A figura 5.10 apresenta o comportamento da energia média em função do campo elétrico para quatro temperaturas, para uma concentração de Manganês de 50%. Inicialmente, em baixos campos, a energia é mantida constante devido ao espalhamento por fônons ópticos, porém a partir de 10 kV/cm este mecanismo não é mais capaz de dissipar completamente a energia ganha com o aumento do campo elétrico. Deste ponto em diante, a energia têm um súbito aumento até que o espalhamento intervale começa lentamente a dissipar a

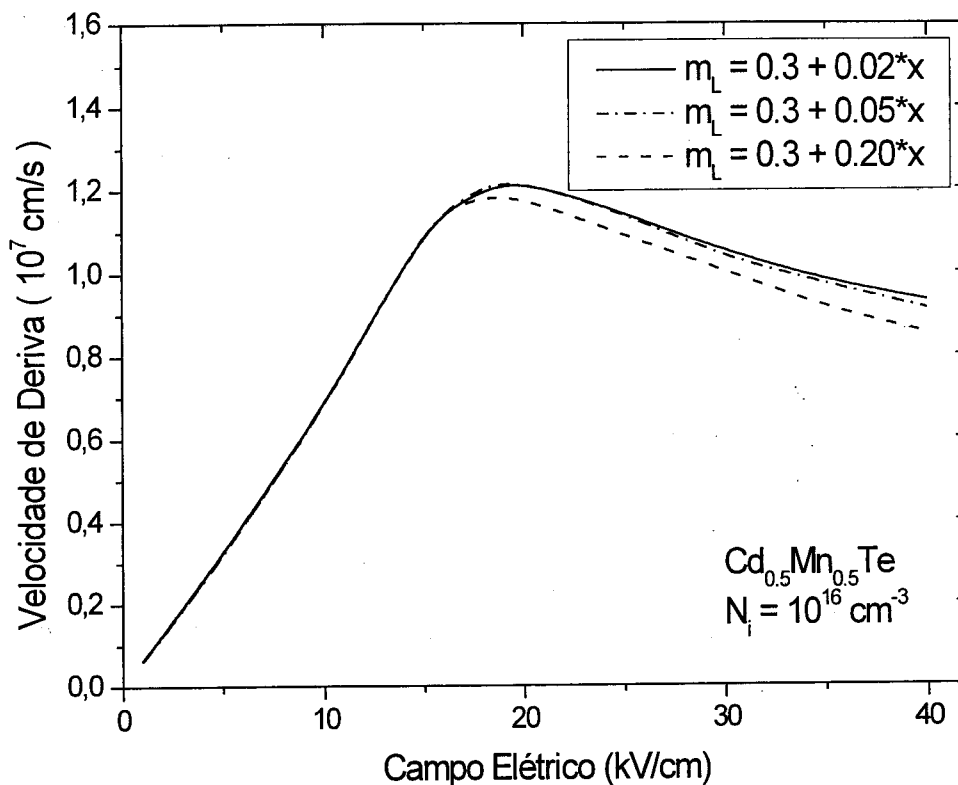


Figura 5.11: Velocidade de deriva em função do campo elétrico para uma concentração de $N_i = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ a temperatura ambiente. Comparação entre três diferentes métodos de aumento da massa efetiva do vale L.

energia ganha pelo campo elétrico. Em torno de 20 kV/cm, notamos que a energia começa a desacelerar devendo saturar para campos mais altos, assim como ocorre no CdTe.

Na figura 5.11 comparamos três diferentes métodos de inclusão da variação da massa efetiva do vale L com a concentração de Manganês. Este estudo foi feito pois não há na literatura valores para a massa efetiva do vale L para o MnTe. Como a princípio a variação da massa efetiva do vale L poderia causar uma grande diferença nas propriedades de transporte, realizamos este estudo para verificar o possível impacto dos diferentes métodos no transporte do $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. Observamos que até 15 kV/cm não existe diferença apreciável entre os três métodos, mas a medida em que o vale L torna-se mais populado, a diferença começa a se tornar mais significativa. Contudo, no intervalo observado a maior diferença é da ordem de 10%, mas o comportamento qualitativo nos três casos é praticamente

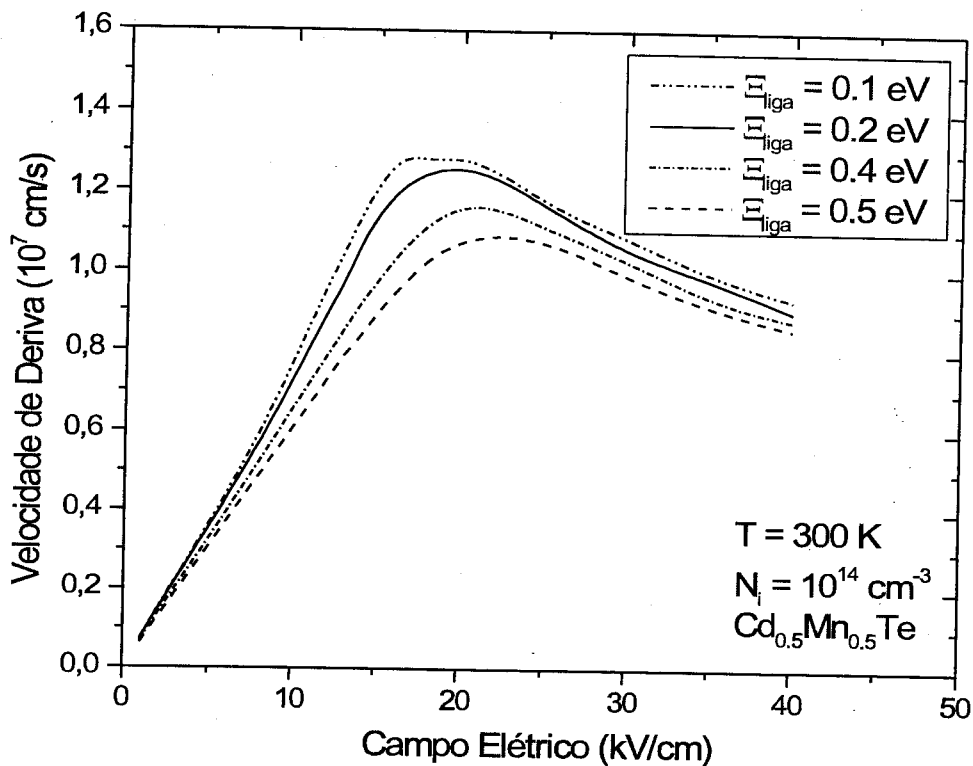


Figura 5.12: Velocidade de deriva em função do campo elétrico para uma concentração de $N_i = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ a temperatura ambiente. Comparação entre diversos valores do potencial de liga.

o mesmo.

Na figura 5.12 comparamos a influência do potencial de liga para o $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$. O cálculo foi realizado para verificar a influência deste mecanismo no $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. Este estudo é necessário porque não há na literatura um valor do potencial de liga U_0 para este material. Contudo, em geral os valores se situam entre 0.1 eV e 0.5 eV. O cálculo foi feito para uma concentração de Manganês de 0.5, porque neste caso o efeito do espalhamento de liga é máximo. Na figura 5.12, observamos que a medida em que o potencial de liga aumenta a velocidade diminui, isto ocorre devido ao aumento da influência deste espalhamento nas propriedades do material. Nota-se também que há uma ligeira mudança da posição de pico deste material, contudo para concentrações de Manganês menores que 0.3 este comportamento desaparece, e há apenas uma pequena diferença nos valores da velocidade.

5.4 Conclusões

Um extensivo estudo das propriedades de transporte baseadas no método de Monte Carlo foi realizado para o CdTe e $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, sendo que comparações com resultados experimentais foram feitas. Implementamos o modelo de três bandas, que apesar da população dos elétrons no vale X ser pequena, sua influência em altos campos é perceptível. No CdTe já foram feitos experimentos com campos de até 100 kV/cm, e espera-se que em campos desta ordem a influência exercida pelo vale X seja maior. Observamos que o campo crítico desloca-se consideravelmente à medida que a concentração de Manganês aumenta. Igualmente quando a temperatura varia notamos que o campo crítico desloca-se para campos mais altos. Ao contrário de materiais do grupo III-V o $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, no intervalo considerado, apresenta um domínio da população de elétrons do vale Γ . Consequentemente, conclui-se que a CDN neste material não é devido a transferência de elétrons do vale Γ para o vale L e sim devido a um efeito randomizante do espalhamento intervale. Este efeito, à medida que a concentração de Manganês aumenta, acentua-se ainda mais como observado na figura 5.7, pois a população de elétrons do vale Γ a $x = 0.5$ é maior do que a $x = 0$. Apesar de nem todos os parâmetros para o MnTe estarem bem estabelecidos, acreditamos que em termos qualitativos nosso modelo é bem acurado. A massa efetiva do vale L, o único parâmetro que não foi encontrado na literatura, e que poderia afetar consideravelmente o resultado das propriedades de transporte, mostrou um comportamento dentro dos padrões. A grande separação energética entre os vales Γ -L é a responsável pelo alto campo crítico que este material exhibe, o qual pode ser útil em dispositivos que operem nesta região. Investigamos a influência do espalhamento piezoelétrico a 300K e a 77K em ambos os casos o espalhamento piezoelétrico não teve qualquer influência significativa nas propriedades de transporte. Estes resultados não foram apresentados, pois devido à proximidade dos resultados não é aparente no gráfico. Outro ponto é porque em altos campos a velocidade de saturação do $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$ é similar à do CdTe. Especulamos que este comportamento se deve a um efeito de compensação, entre a diminuição da energia média e a diminuição da diferença de energia entre os vales $\Gamma - L$.

INSTITUTO DE FÍSICA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Capítulo 6

Transporte Eletrônico em Altos Campos - o efeito do mecanismo de espalhamento de ionização por impacto no $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$

6.1 Introdução

Avanços recentes nas técnicas de crescimento epitaxial do $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, revelaram o bom potencial deste material para aplicações em dispositivos, como por exemplo: dispositivos de alta performance, MOSFET (Transistor Metal-Óxido-Semicondutor de efeito de campo) e heterojunções são algumas das inúmeras aplicações deste material. No trabalho de Nag e colaboradores[10], supôs-se que a implantação de germânio originasse no material um tipo adicional de espalhamento denominado "lucky hot electrons". Segundo este mesmo autor este mecanismo é responsável pelo decréscimo da taxa de degradação num transis-

tor MOSFET. Posteriormente outro trabalho realizado por Lin[82], corroborou a suposição inicial de Nag. Existem também efeitos de tensões ainda não estudadas adequadamente.

O modelo desenvolvido neste capítulo reproduz adequadamente os resultados experimentais disponíveis para o transporte eletrônico no $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. O mecanismo de impacto de ionização é fundamental na compreensão das propriedades de transporte em altos campos para este material. Outro mecanismo de fundamental importância é o espalhamento por liga.

6.2 Modelo

Para investigar o transporte eletrônico no $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ utilizamos o método EMC. Por simplicidade supusemos que alguns parâmetros são similares ao do Si, considerando um modelo similar ao de Canali e colaboradores[80], ou seja, levamos em conta apenas o vale X e consideramos toda a sua anisotropia. A estrutura de banda foi considerada por um modelo analítico não parabólico[4],[6],[8]. Para o cálculo das taxas de espalhamento consideramos os mecanismos: fônons acústicos, espalhamento intervale equivalente f (entre vales perpendiculares) e g (na mesma direção), espalhamento de liga e ionização por impacto. A figura 6.1 representa os mecanismos f e g.

Apesar da simplicidade do modelo, para levar em conta a complexibilidade da estrutura de banda e a anisotropia do sistema no cálculo correto das taxas de espalhamento, reproduzimos a densidade de estados do $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ a 300K e incluímo-la no cálculo das taxas de espalhamento. Esta densidade de estados é obtida a partir de uma estrutura de banda realista, depois é feita uma reprodução e gerado um conjunto de dados o qual é utilizado no cálculo das taxas de espalhamento. O modelo usado no cálculo da taxa de ionização por impacto foi o proposto por Keldish e está descrito no ítem 2.2.7. Porém, para levar em conta a mudança no "gap", devido ao aumento da porcentagem de Ge, utilizamos a seguinte relação[83]:

$$E_g = E_g(0) (1 - 0.561x + 0.470x^2), \quad (6.1)$$

onde $E_g(0) = 1.124$ eV é o "gap" do Silício à temperatura ambiente, sendo que o intervalo de validade desta expressão para a porcentagem de Ge é de $0 \leq x \leq 0.4$. Os parâmetros

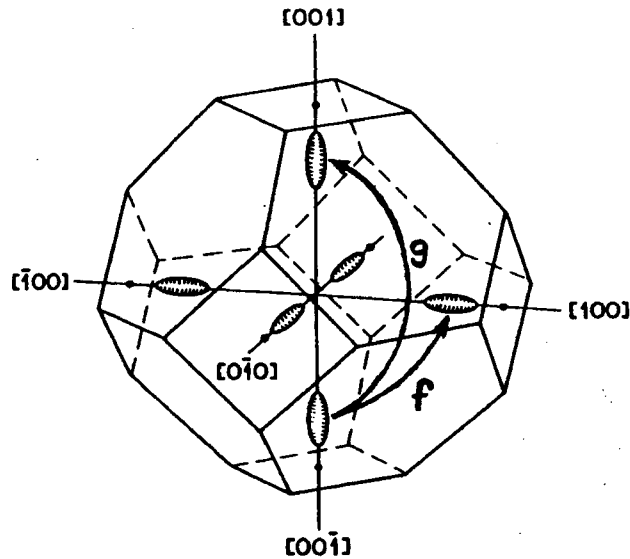


Figura 6.1: Estrutura da banda de condução do Si. São ilustrados os mecanismos de espalhamento f e g.

utilizados nesta simulação estão apresentados nas tabelas 6.1 e 6.2.

Estes parâmetros foram retirados do trabalho de Canali[80] e mantidos constantes no presente cálculo já que são bem conhecidos. Neste material usamos um modelo distinto para incluir a densidade de estados no cálculo das taxas de espalhamento. Analiticamente a densidade de estados é usualmente calculada através da seguinte expressão:

$$D_{an} = \frac{\sqrt{2m_d^3}}{\pi^2 \hbar^3} (1 + 2\alpha\varepsilon) \sqrt{\varepsilon(1 + \alpha\varepsilon)}. \quad (6.2)$$

Apesar de usualmente adotada, Ershov[83] argumenta que neste material para altos campos a diferença entre o resultado analítico e o obtido a partir de cálculos usando o método de pseudopotencial são grandes. Para levar em conta a densidade real de estados, calculamos as taxas de espalhamento dos fônons e do espalhamento por liga usando o modelo de bandas não-parabólico em baixas energias e para altas energias a densidade de estados extraída da referência [84], designada por $D_{pp}(\varepsilon)$. O modelo usado para a densidade de estados é:

$$D(\varepsilon) = \begin{cases} D_{an}(\varepsilon) \longrightarrow \varepsilon \leq 0.5eV \\ D_{pp}(\varepsilon) \longrightarrow \varepsilon > 0.5eV \end{cases} \quad (6.3)$$

Parâmetros	Valores	Unidade
m_l^*	0.98	m_0
m_t^*	0.18	m_0
Densidade	2.33	g/cm^3
Velocidade do som	9	10^5 cm/s
Constante dielétrica	11.7	-
Constante de rede	5.431	Å
Densidade	2.329	g/cm^3
Velocidade do som	9.04×10^5	cm/s
Potencial de deformação acústico	9	eV
U0	0.8	eV
C_{ii} constante do mecanismo II	7×10^{11}	s^{-1}

Tabela 6.1: Parâmetros usados na simulação para transporte de elétrons no SiGe.

Tipo de Espalhamento	Potencial Deformação	Temperatura Equivalente do Fônon
g_1	$0.5 \times 10^8 \text{ eV/cm}$	140 K
g_2	$0.8 \times 10^8 \text{ eV/cm}$	215 K
g_3	$11. \times 10^8 \text{ eV/cm}$	720 K
f_1	$0.3 \times 10^8 \text{ eV/cm}$	220 K
f_2	$2.0 \times 10^8 \text{ eV/cm}$	550 K
f_3	$2.0 \times 10^8 \text{ eV/cm}$	685 K

Tabela 6.2: Parâmetros usados na simulação para transporte de elétrons no SiGe.

6.3 Resultados

Inicialmente apresentamos no gráfico representado pela figura 6.2, a velocidade de deriva em função do campo elétrico para diferentes composições de germânio. Neste cálculo, o mecanismo de impurezas ionizadas não foi levado em consideração. Assim como no caso do Silício, o $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ apresenta condutividade diferencial negativa CDN para campos elétricos muito altos, da ordem de 100 kV/cm. Observamos que a velocidade de deriva aumenta até o campo elétrico alcançar o valor de aproximadamente 100 kV/cm. Nota-se que a partir deste ponto com o aumento do campo a velocidade passa a diminuir, ou seja, o

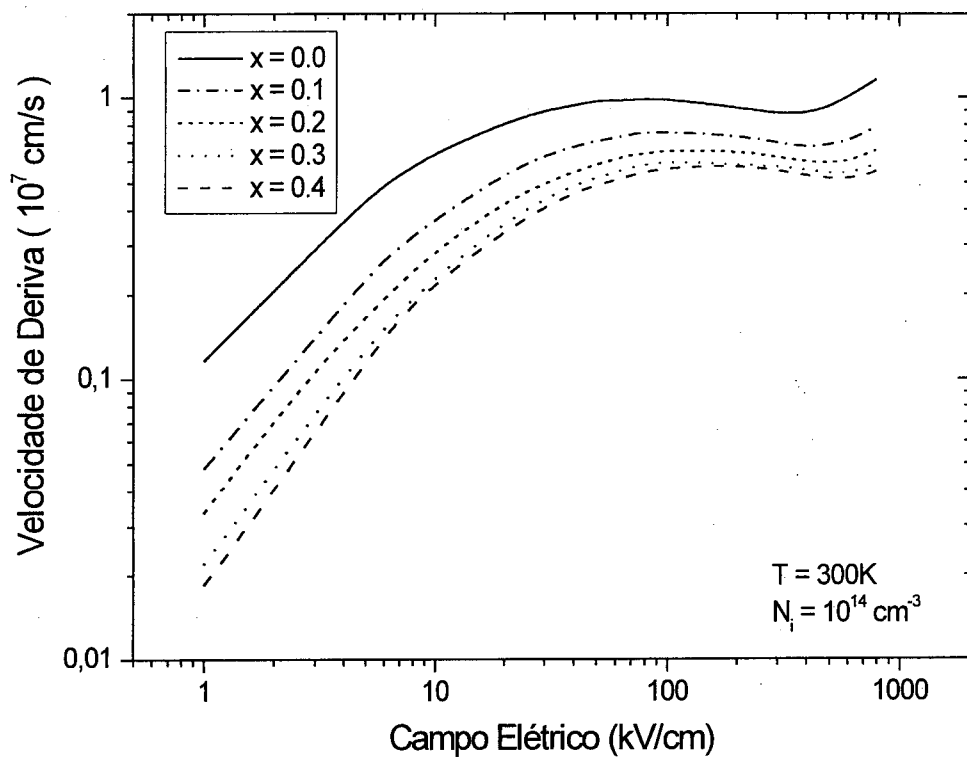


Figura 6.2: Velocidade de deriva em função do campo elétrico, calculado à temperatura ambiente para várias concentrações de germânio.

material apresenta CDN, decrescendo até aproximadamente 400 kV/cm . A velocidade do elétron volta a aumentar a partir deste ponto, o aumento é devido ao início da atuação do mecanismo da ionização por impacto.

O motivo pelo qual este processo aumenta a velocidade do sistema, é entendido através da geração de um par elétron-buraco, que ocasiona um aumento no número de elétrons na banda de condução. Este mecanismo surge apenas em altos campos pois o elétron que inicia este processo deve ter uma energia mínima igual a energia do "gap". Em baixos campos eventualmente um ou outro elétron podem ter energia suficiente para iniciar este processo, porém para que o mecanismo tenha influência no processo de transporte é necessário que um número razoável de elétrons participem deste processo. Para confirmar a nossa suposição inicial, de que o aumento da velocidade do elétron em altos campos é devido ao mecanismo de ionização por impacto, apresentamos na figura 6.3 uma comparação da

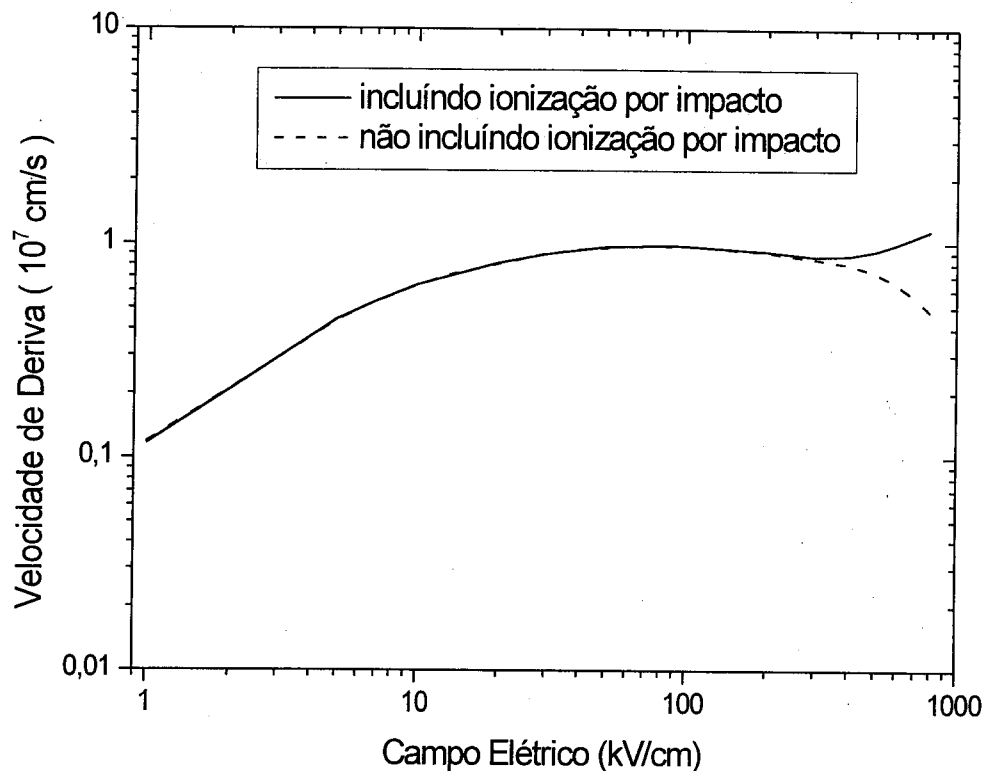


Figura 6.3: Velocidade de deriva em função do campo elétrico para o Si. Resultados comparando a inclusão do mecanismo de ionização por impacto.

atuação deste mecanismo. Observamos que quando o mecanismo de ionização por impacto não é incluído a velocidade a partir de 100 kV/cm decresce continuamente, ao contrário do que o resultado com este mecanismo apresenta. A conclusão é clara de que o mecanismo é o responsável pelo aumento na velocidade do elétron.

Observamos na figura 6.4 o efeito na velocidade de deriva em função do campo elétrico, devido à inclusão do espalhamento por liga. Esta simulação foi realizada a temperatura ambiente para $x = 0.3$ para uma concentração de $N_i = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Verifica-se que o espalhamento por liga têm uma influência muito grande nas propriedades de transporte deste material em todo o intervalo de campo elétrico considerado.

O comportamento da energia média em função do campo elétrico está apresentado na figura 6.5. Através dos resultados obtidos, nota-se que à medida que aumentamos a porcentagem de Ge, a energia média decresce. A razão para este comportamento é que o

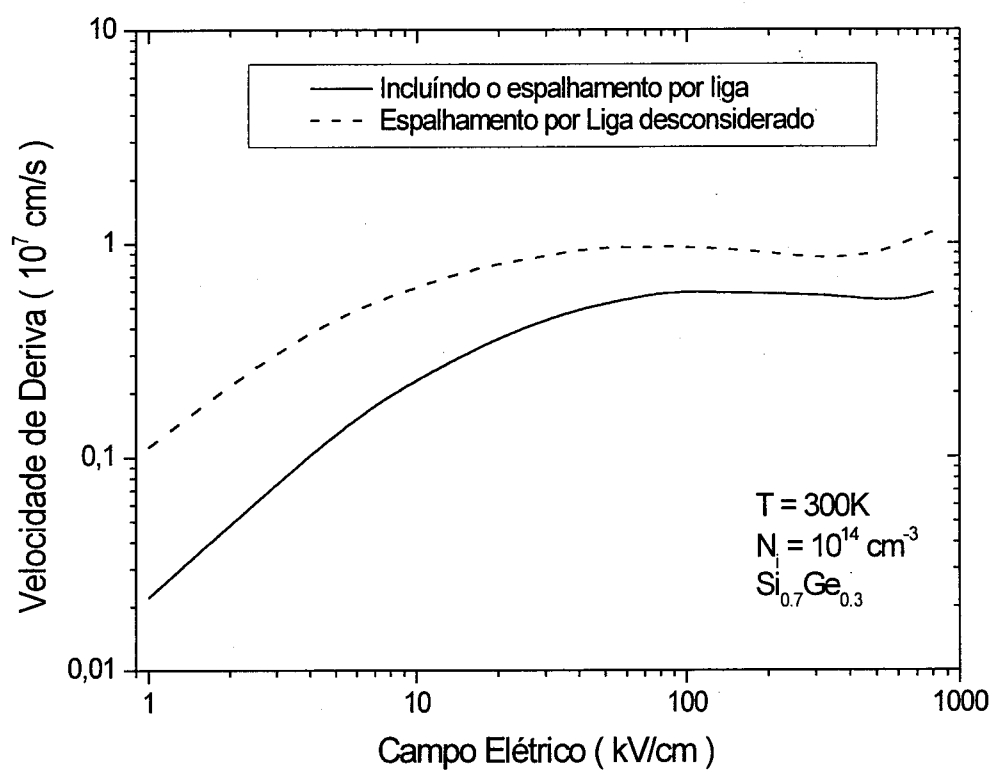


Figura 6.4: Velocidade de deriva em função do campo elétrico. Compara-se o efeito do espalhamento por liga.

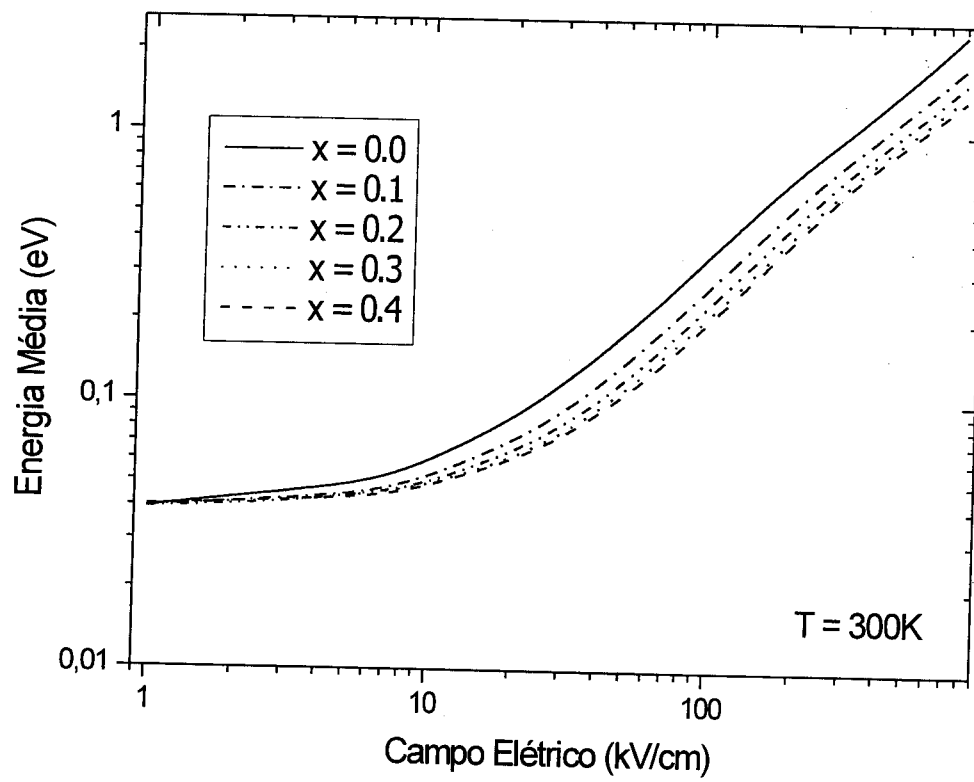


Figura 6.5: Energia média do elétron em função do campo elétrico para o $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$.

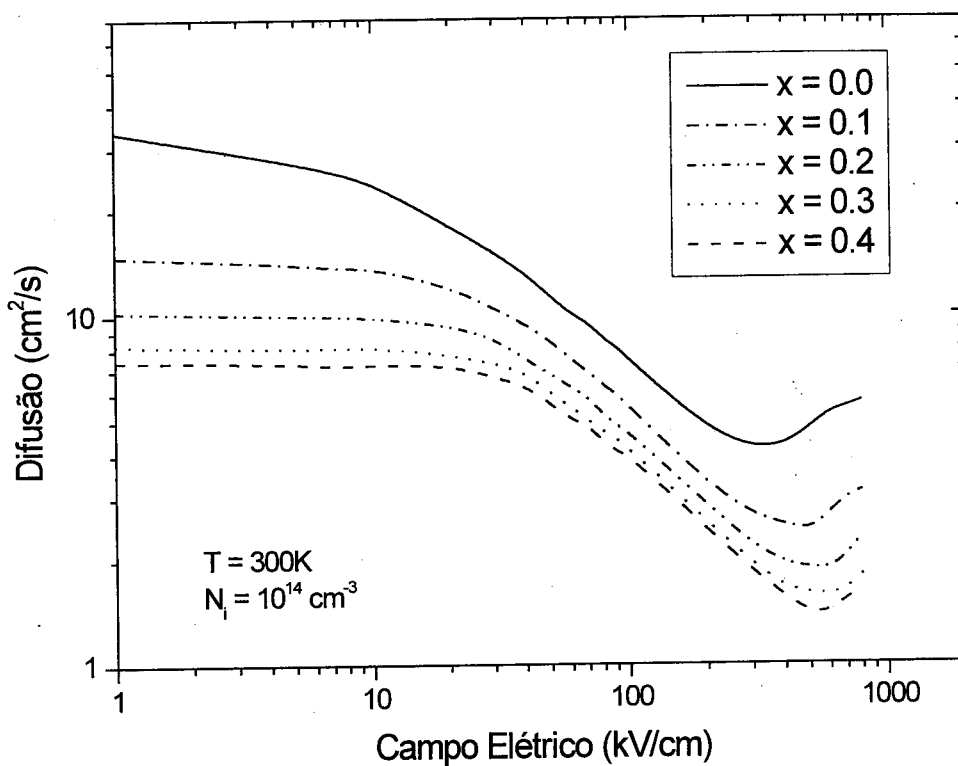


Figura 6.6: A difusão em função do campos elétrico para quatro diferentes concentrações de germânio à temperatura ambiente

espalhamento por liga é um espalhamento isotrópico, ou seja, não há direção preferencial para o elétron espalhar, portanto este mecanismo têm o efeito de além de diminuir a velocidade do elétron, diminui também a sua energia. No intervalo estudado, quanto maior a porcentagem de Ge maior será a taxa do espalhamento por liga e portanto menor será a velocidade do elétron e a sua energia média. Por motivos similares a difusão deverá ter o mesmo comportamento (vide figura 6.6).

Na figura 6.6 apresentamos o cálculo da difusão em função do campo elétrico à temperatura ambiente. Inicialmente observamos que a difusão até 10 kV/cm varia pouco com o campo elétrico. O decréscimo da difusão para campos acima de 10 kV/cm, deve-se ao fato de que a mobilidade começa a decrescer enquanto a energia média está aumentando na mesma proporção. Em torno de 500 kV/cm a difusão começa a aumentar novamente, este efeito têm a mesma origem: o mecanismo de ionização por impacto. A partir deste intervalo

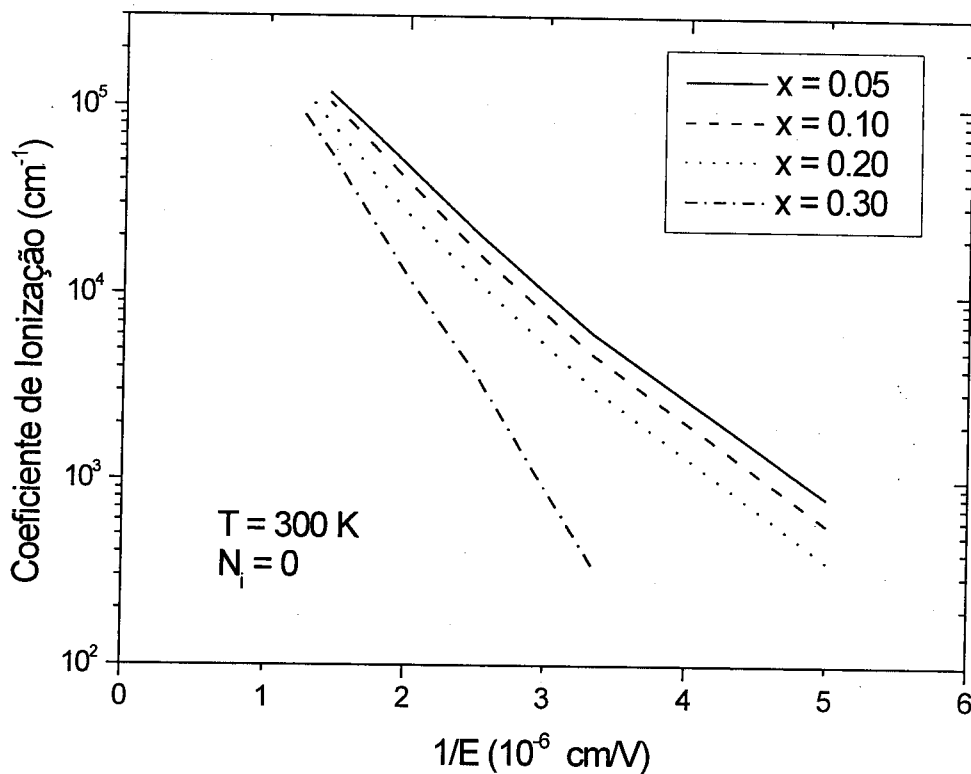


Figura 6.7: Coeficiente da ionização por impacto do elétron no $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ como função do inverso do campo elétrico aplicado, para várias concentrações de germânio.

a mobilidade tende a diminuir mais lentamente e desta forma o aumento da energia torna-se preponderante fazendo com que a difusão aumente.

Como já mencionamos anteriormente o mecanismo de ionização por impacto afeta as propriedades físicas em altos campos em um semiconductor. Este mecanismo introduz novos meios de se caracterizar melhor o material. O cálculo do coeficiente de ionização α_I , é um meio pelo qual pode-se auxiliar na determinação dos parâmetros físicos de um material, já que este pode ser medido experimentalmente. Na figura 6.7 calculamos o coeficiente de ionização em função do inverso do campo elétrico. Observamos que este parâmetro torna-se maior quanto maior for o campo e têm um comportamento exponencial em função do inverso do campo elétrico. Nota-se também que influência da porcentagem do germânio no comportamento do coeficiente de ionização é maior em campos relativamente baixos, tornando-se ainda mais pronunciado para $x = 0.3$.

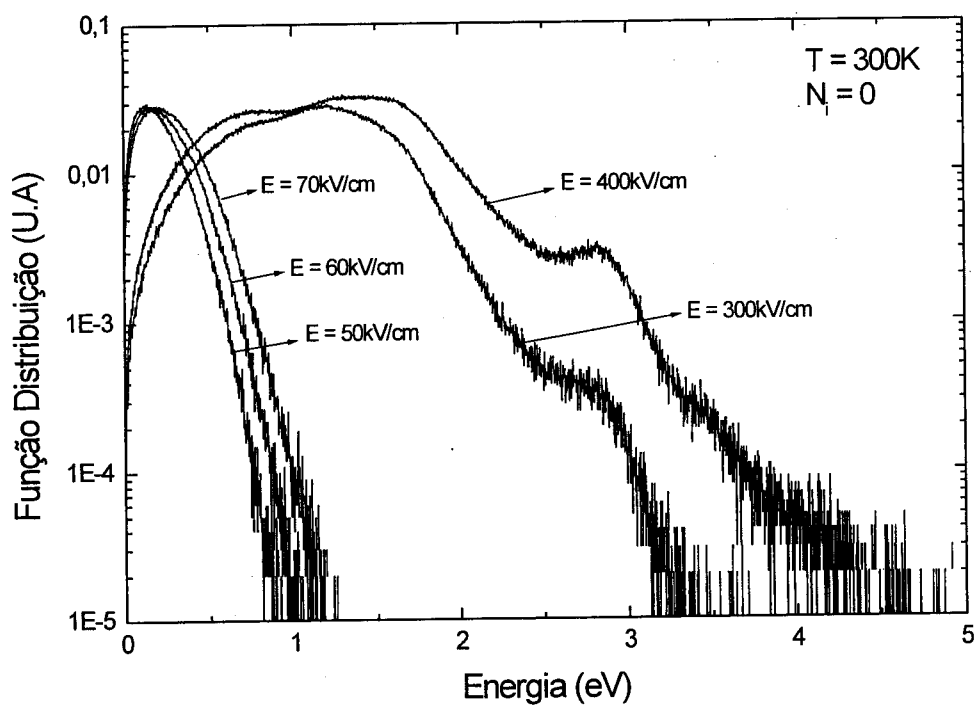


Figura 6.8: Função distribuição em função da energia para diferentes valores de campos elétrico em unidades arbitrárias para $\text{Si}_{0.95}\text{Ge}_{0.05}$.

Na figura 6.8 apresentamos a distribuição da energia para o $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ para diferentes valores do campo elétrico. Observamos que há uma mudança de comportamento na distribuição de energia, para campos em torno de 70 kV/cm, um pico bem definido em torno de 0.2 eV o qual deve corresponder aproximadamente à energia média do sistema, decaindo continuamente para valores maiores de energia. Para campos mais altos a função distribuição têm basicamente dois picos: um principal situando-se em torno de 1.1 a 1.2 eV, (o qual deve corresponder aproximadamente a energia média do sistema) e o segundo pico que acreditamos ser devido ao comportamento da densidade de estados a qual neste material têm um pico próximo a 3 eV.

6.4 Conclusões

Neste capítulo, estudamos a influência dos mecanismos de ionização por impacto e o mecanismo de espalhamento por liga no material $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. O espalhamento de ionização por impacto têm uma importância fundamental nas propriedades de transporte em altos campos. Nossos cálculos concordam com os resultados obtidos por Ershov e Ryzhii[83], apenas pequenas discrepâncias são observadas. O espalhamento por liga têm o efeito de diminuir tanto a energia média do sistema como a velocidade do elétron. Isto se deve ao fato de que os átomos de Germânio causam uma maior randomização do material, ou seja, os elétrons deixam de ter uma direção preferencial causando assim a diminuição tanto da velocidade quanto da energia. O coeficiente de ionização também é sensivelmente afetado pelo aumento da concentração de germânio, principalmente em baixos campos. Tanto o coeficiente de ionização como o de difusão são parâmetros que são mensuráveis através de técnicas experimentais e podem ajudar a compreender os mecanismos físicos envolvidos. Estas quantidades podem ser usadas para determinar os parâmetros de um material junto com a velocidade de deriva. O comportamento da difusão depende do comportamento de duas quantidades físicas, da mobilidade e da energia. Para a difusão permanecer aproximadamente constante até 10 kV/cm, foi necessário que a energia aumentasse na mesma proporção que a mobilidade decrescesse. Apesar da simplicidade do modelo, os resultados são qualitativamente acurados, no intervalo de concentração de Ge estudado. Quantitativa-

mente porém, pode haver discrepâncias principalmente nas quantidades mais sensíveis que são a difusão e o coeficiente de ionização.

Capítulo 7

Mecanismos de Espalhamento em

Sistemas Bi-dimensionais -

Super-Redes de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

7.1 Introdução

O conceito de super-redes semicondutoras foi introduzido inicialmente por Esaki e Tsu [85], com a expectativa da obtenção de oscilações de Bloch neste sistema. Uma super-rede é formada por camadas alternadas de dois semicondutores distintos com diferentes "gaps", sendo que a espessura destas camadas variam em geral de 1 a 10 nm [86]. Uma das super-redes mais comuns é obtida a partir da heteroestrutura de GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, isto é devido às suas várias aplicações práticas, como por exemplo o diodo túnel. Desde então vários artigos já demonstraram que as oscilações de Bloch não eram apenas um conceito teórico, sendo também verificadas experimentalmente.

Apesar de diversos trabalhos terem sido publicados nesta área, pouca atenção foi dada a dois aspectos na super-rede; o primeiro é o espalhamento por rugosidade, este

mecanismo é importante em sistemas que apresentam interfaces entre dois materiais. Outro ponto é a degenerescência, ou seja, se for levado em consideração o princípio de exclusão de Pauli no cálculo, cuja proposta foi desenvolvida por P. Lugli e D. K. Ferry [87]. Contudo já que não levamos em conta o efeito de "Stark ladder" nos cálculos algumas justificativas devem ser colocadas.

O fenômeno da condutividade diferencial negativa (CDN) já foi observado experimentalmente e estudado teoricamente por vários autores. No trabalho de A. Sibille e colaboradores[88], para uma super-rede com "larga mini-banda", ou seja para uma largura de mini-banda de $\Delta_{mb} \gtrsim 30$ meV, sugere-se que a CDN pode ser explicada devido a uma "massa efetiva negativa" sem necessitar de incluir efeitos de Wannier-Stark. Contudo, é necessário ficar atento às restrições que a abordagem semi-clássica da equação de transporte de Boltzmann (ETB) possui, e que podem comprometer a validade do resultado a partir desta abordagem. Como o método de Monte Carlo no fundo é uma ferramenta de resolução da ETB é necessário que façamos algumas considerações. Tendo em mente, o limite de validade da ETB, Wacker e colaboradores [89], compararam o modelo semi-clássico da ETB, através do método de MC, com um modelo quântico auto-consistente baseado nas funções de Green fora do equilíbrio (FG). O autor calculou a velocidade de deriva em função do campo elétrico, até 100 kV/cm, para uma super-rede de GaAs/AlAs a $T = 77$ K com uma largura de minibanda de 20.3 meV (período $d = 5.1$ nm). Comparando os resultados de ambos os modelos a concordância é muito boa até $eFd \lesssim \frac{\Delta}{2}$ [89]. De fato, até em torno de 0.05 eFd o que equivale a um campo elétrico em torno 90 kV/cm os resultados usando EMC estão em boa concordância com os de FG, isto ocorre apesar da condição $eFd > \hbar\Lambda$ que limitaria a validade do modelo de Wacker próximo a 50 kV/cm, pois $\hbar\Lambda \approx 2.3$ meV. Wacker sugere que próximo a região onde $eFd = \hbar\omega_{op}$, o modelo semi-clássico (ETB) falha e a partir deste ponto este modelo não representa adequadamente o transporte, já que o modelo de EMC que Wacker utilizou, não inclui o efeito de Wannier Stark. Apesar do artigo de Morifugi e Hamagushi[90], que estudou o efeito do espalhamento por impurezas ionizadas sobre os estados de "Stark-ladder" utilizando campos de até 100 kV/cm, o método de Monte Carlo sem adequações ao seu limite de validade, depende do campo aplicado e da largura da mini-banda. Deste ponto de vista, a condição de muito boa concordância

obtida por Wacker, ($eFd \lesssim \frac{\Delta}{2}$), para a nossa super-rede equivale a um campo em torno de 8 kV/cm. Para a condição ($eFd > \hbar\Delta$) o campo correspondente é de 20 kV/cm para $\Delta_{ER} = 0$, e 25 kV/cm para $\Delta_{ER} = 5\text{\AA}$.

Neste capítulo iremos estudar a influência do espalhamento por rugosidade da interface nas propriedades de transporte vertical, para uma super-rede de GaAs/Al_xGa_{1-x}As, através do método de MC. Apesar de ser um sistema muito estudado, a aplicação do método de MC ainda é pouco desenvolvida, porém é muito útil para o estudo do mecanismo de ER.

7.2 Descrição do Modelo

O modelo da estrutura de bandas utilizado no método de EMC pode ser encontrada com detalhes na referência [4] [6] [8]. Neste capítulo iremos abordar apenas os detalhes específicos usados nos cálculos do transporte na super-rede. Inicialmente vamos abordar a determinação do "band offset". Este é um dos aspectos mais importantes de uma super-rede, sendo este determinado a partir de uma reprodução dos resultados dos parâmetros de Varshni[62] $\alpha(x)$, $\beta(x)$ e $E_0(x)$ do Al_xGa_{1-x}As que variam com a composição do material[91]. Este valor é necessário para se determinar a estrutura de bandas a partir do modelo Kronig-Penney. Em nossos cálculos levamos em conta apenas o vale Γ , apesar de haver evidência experimental de transferência intervala, do vale Γ do GaAs para o vale X do AlAs [88] [92], esta transferência ocorre em energias mais elevadas do que as atingidas em nossos cálculos.

Para o cálculo da estrutura de banda, utilizamos o modelo proposto por Leburton [93], que é basicamente uma extensão do modelo Kronig-Penney. A relação de dispersão, que é obtida com este modelo, é reproduzida a partir de um polinômio. Uma vez obtida a relação de dispersão, calcula-se a massa efetiva na direção de crescimento através da bem conhecida relação:

$$m_z^* = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E_z(k_z)}{\partial k_z^2} \right)^{-1}, \quad (7.1)$$

onde $E_z(k_z)$ é a relação de dispersão no eixo z, a qual representa a direção de crescimento e

k_z o vetor de onda na direção z , a relação de dispersão total é dada pela seguinte equação:

$$E(k) = E_z(k_z) + \frac{\hbar^2 k_T^2}{2m^*}, \quad (7.2)$$

sendo k_T o vetor de onda no plano transversal a z e m^* é a massa efetiva padrão. Como ainda há uma certa divergência na literatura sobre o modelo correto no cálculo do espalhamento para uma super-rede, adotamos um modelo simples a partir das taxas de espalhamento em três dimensões com exceção da taxa de espalhamento por rugosidade. Foram incluídos no modelo as seguintes taxas de espalhamento: 1- fônon polar óptico (potencial deformação), 2- espalhamento acústico inelástico, 3- impureza ionizada e 4- espalhamento por rugosidade. Consideramos no cálculo somente o vale Γ , apesar de sob certas circunstâncias o vale X também possa ser populado.

Como dito anteriormente, no método de EMC considera-se que uma partícula sob a ação de um campo externo movimenta-se balisticamente, até que esta sofra um espalhamento e o estado final é calculado de acordo com o mecanismo escolhido. Apesar de termos usado taxas de espalhamento típicas de estruturas 3D, o método de escolha do estado final será diferente do usual para estruturas 3D. O vetor de onda final k_f será escolhido pelo método de rejeição, sendo que os componentes do vetor de onda serão escolhidas usando a expressão abaixo[94]:

$$k_{zf} = k_{zo}(1 - 2r_1), \quad (7.3)$$

sendo que k_{zo} é o valor máximo que k_z pode alcançar, que é equivalente a $k_r = 0$, e r_1 é um número randômico entre 0 e 1. Uma vez obtido o vetor de onda na direção z , calculamos o vetor de onda na direção transversal através da conservação de energia, obtendo os valores para k_{xf} e k_{yf} através das seguintes relações:

$$k_{xf} = k_{Tf} \cos 2\pi r_2, \quad (7.4)$$

$$k_{yf} = k_{Tf} \sin 2\pi r_2, \quad (7.5)$$

onde r_2 é um número randômico entre 0 e 1. A partir deste ponto, podemos calcular k_f e verificar se ele é aceito ou rejeitado. Para testar se k_f é aceito, utilizamos o método da rejeição que é baseado na probabilidade de espalhamento do mecanismo selecionado. A

probabilidade de espalhamento para fônons ópticos é:

$$P_{op} = \frac{1}{(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i)^2}, \quad (7.6)$$

e para o espalhamento por impurezas a probabilidade será:

$$P_{op} = \frac{1}{\left((\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i)^2 + (q_d)^2\right)^2}, \quad (7.7)$$

onde q_d é o inverso do comprimento de Debye e \mathbf{k}_i é o vetor de onda inicial. Supomos que o espalhamento por rugosidade é um espalhamento isotrópico, portanto não têm direção preferencial, não necessitando da aplicação do método de rejeição.

O espalhamento por rugosidade têm sua origem física nas flutuações randômicas do plano da interface. Devido a estas flutuações, introduzimos uma correção no período "d" da super-rede. Assumimos que quando o espalhamento por rugosidade é selecionado o comprimento "d" é modificado por Δ_{ER} , onde Δ_{ER} é a flutuação randômica média:

$$d_{ef} = d \pm \Delta_{ER}. \quad (7.8)$$

Outro ponto analisado foi a inclusão da degenerescência. No modelo proposto por P. Lugli e D. K. Ferry [87], a probabilidade de transição entre o estado \mathbf{k}_i e o estado \mathbf{k}_f é proporcional a função distribuição $f(\mathbf{k}_i)$, isto indica quais os estados que estão ocupados e quais os estados que estão disponíveis após o espalhamento, com a seguinte probabilidade $(1 - f(\mathbf{k}_f))$. Normalmente no método de EMC trabalha-se com a aproximação $f(\mathbf{k}_f) = 0$. Conseqüentemente, supõe-se que todos os estados estão disponíveis, isto significa que em certas condições deve haver uma diferença entre o caso degenerado e o caso não-degenerado. Isto deve ocorrer quando o nível de Fermi fica próximo da banda de condução, nesta situação para que os elétrons participem da condução e conseqüentemente dos processos de colisão, estes deverão ter uma energia em torno de $k_b T$. Esta situação ocorre para concentrações de elétrons superiores a $4.6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, considerando o GaAs a 300K [87]. A partir deste ponto, a degenerescência começa a influenciar no transporte, limitando o espaço de fase disponível para transições eletrônicas. O método desenvolvido por P. Lugli e D. K. Ferry basea-se no fato de que no método de EMC a função distribuição é conhecida a cada instante do tempo. Uma vez selecionado o mecanismo de espalhamento e o vetor de onda final for calculado,

pode-se aceitar ou rejeitar este estado final já que a função distribuição $f(\mathbf{k}_f)$ é conhecida. Reapresentaremos aqui o ponto mais importante do método, o qual envolve a normalização da função distribuição. Vamos considerar N como o número de elétrons simulados, em geral da ordem de 10^4 partículas, em um "ensemble" com uma concentração de n_0 elétrons. Desta forma o volume efetivo do espaço real para um número de N partículas simuladas será $V = N/n_0$. Neste modelo, a densidade de vetores de onda no espaço- k é dada por $V/(2\pi)^3$. Discretizando o espaço- k em células de volume $V_c = \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$, no qual podemos colocar N_c elétrons, com $N_c = 2V_c V / (8\pi^3)$, onde o fator 2 leva em conta o spin. Como a função distribuição é medida em todo o espaço de fase, a partir do número de elétrons em cada célula, podemos normalizar esta função a 1, dividindo-a por N_c , para assim utilizarmos a técnica de rejeição. Durante as simulações, notou-se que para não haver erros estatísticos, próprios do processo, é necessário que N_c seja suficientemente grande (N_c da ordem de 10). A função de onda normalizada f_c , a qual corresponde a célula na qual o elétron se encontra, é comparada com um número randômico gerado entre 0 e 1. Caso $r > f_c$, a transição é aceita e a célula é contada na função distribuição. Porém, se o número randômico for menor que a função distribuição, o evento espalhador é tratado como um auto-espalhamento adicional com a probabilidade $(1 - f(\mathbf{k}_f))$. Este procedimento é feito para cada evento espalhador, e a função distribuição é atualizada em intervalos regulares até que a simulação atinja o estado estacionário.

Finalmente para o estudo da degenerescência da super-rede, foi incluído o efeito de blindagem conforme descrita no capítulo 3.

7.3 Resultados

Os resultados das figuras 7.1 a 7.5 foram obtidos para uma super-rede de GaAs / $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ com uma concentração de alumínio de $x = 0.2$ a uma temperatura de 77K com $a = b = 4.5$ nm, e um "band offset" de $\frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} = 0.6$. Consideramos diferentes concentrações de impurezas, diferentes Δ_{ER} (raiz quadrática média da altura da rugosidade) e diferentes L (comprimentos da flutuação da interface) para estudar o efeito do mecanismo ER no transporte vertical de elétrons na super-rede em questão.

Na figura 7.1, para o caso $\Delta_{ER} = 1 \text{ \AA}$, observamos que quase não há diferença para o caso sem rugosidade, porém quando calculamos para $\Delta_{ER} = 5 \text{ \AA}$, notamos que a velocidade do elétron diminui sensivelmente mas o efeito das oscilações de Bloch continuam. Porém quando a altura média da rugosidade é de $\Delta_{ER} = 9 \text{ \AA}$ notamos que as oscilações de Bloch são completamente suprimida. Na mesma figura, observamos que a velocidade estática também foi afetada pelo espalhamento por rugosidade. Para o caso quando $\Delta_{ER} = 0$ a velocidade do elétron é quase 20 vezes maior do que para $\Delta_{ER} = 0.9 \text{ nm}$, o que implica que este mecanismo afeta tanto a parte estática do transporte, como a coerência da parte transiente. Para investigar mais profundamente o efeito por rugosidade foi analisada as características de transporte para vários valores de L (30nm-40nm), com parâmetros de $\Delta_{ER} = 0.5 \text{ nm}$, $T = 77\text{K}$, $N_i = 0$ usando campos de até 10 kV/cm. Apesar da importância deste mecanismo, não foi encontrada qualquer diferença apreciável para valores padrão de L . No caso da utilização de valores muito altos ou muito baixos de L , o mecanismo de espalhamento não será importante pois o elétron "não verá" a rugosidade. Resultado similar foi encontrado para o modelo de auto-correlação gaussiana, quando aplicado a uma estrutura tipo MOS [95]. Nestes resultados não foi incluído o efeito da degenerescência, pois nas concentrações onde se observa as oscilações de Bloch, o efeito da degenerescência não é importante.

Comparamos na figura 7.2 a velocidade de deriva do elétron para $\Delta_{ER} = 0 \text{ nm}$ e $\Delta_{ER} = 0.5 \text{ nm}$. Os resultados mostram que os valores de pico da velocidade do elétron em ambos os casos estão em torno de 1 kV/cm. Porém a diferença entre os dois casos é de um fator de dois aproximadamente. Porém em ambos os casos para altos campos a velocidade do elétron tende para um mesmo valor. A razão deste comportamento é que em altos campos a interação elétron-fônon aumenta tornando os modos de vibração mais acoplados, diminuindo assim a influência do espalhamento por rugosidade no transporte.

Na figura 7.3 é representada a energia média em função do campo elétrico. Observa-se que em altos campos a energia do sistema tende a um valor que é aproximadamente a metade da largura da mini-banda [94] [96]. Espera-se que a energia comece a se estabilizar quando o sistema comece a oscilar, a medida que a energia estabilize assintoticamente em torno de metade da largura de mini-banda. No regime de oscilações de Bloch, a velocidade

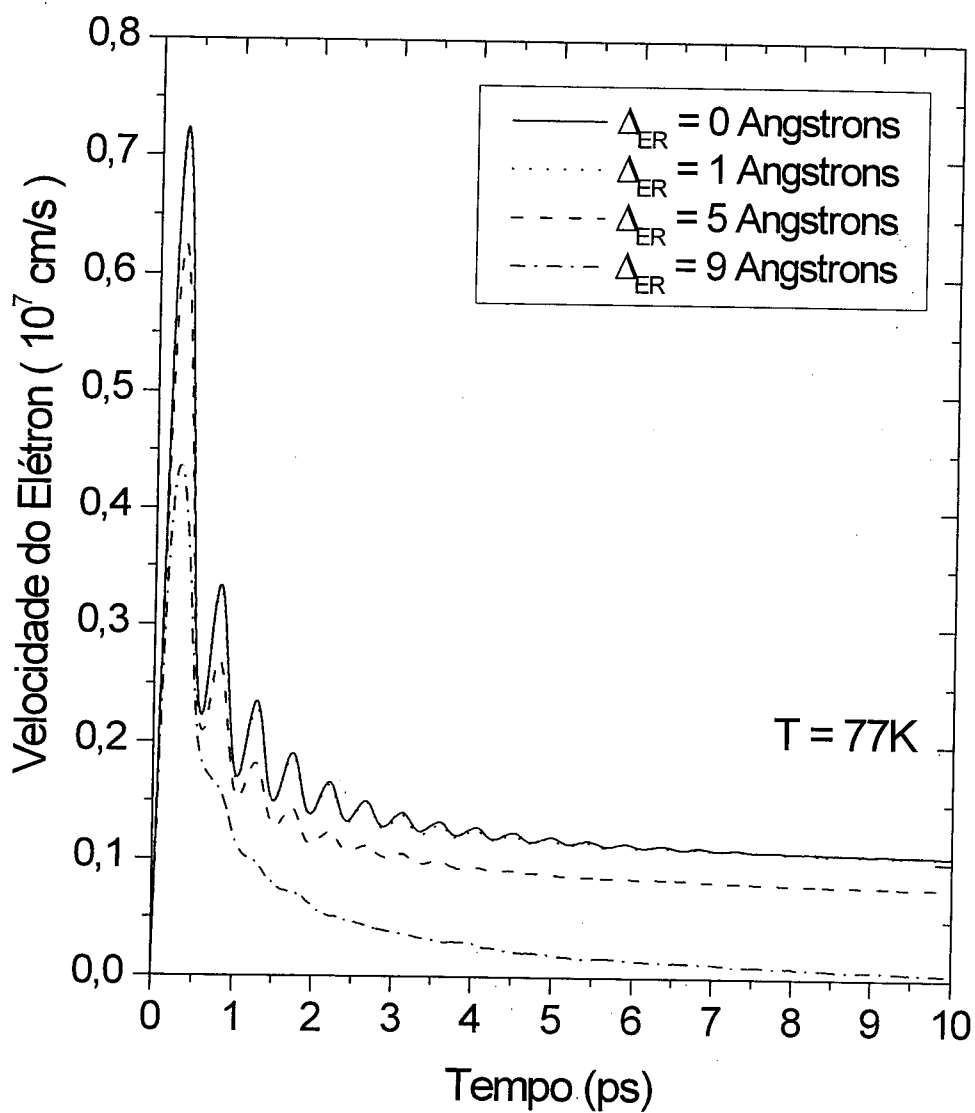


Figura 7.1: Velocidade do elétron em função do tempo para uma super-rede de GaAs / $Al_xGa_{1-x}As$. Campo elétrico aplicado de 10 kV/cm.

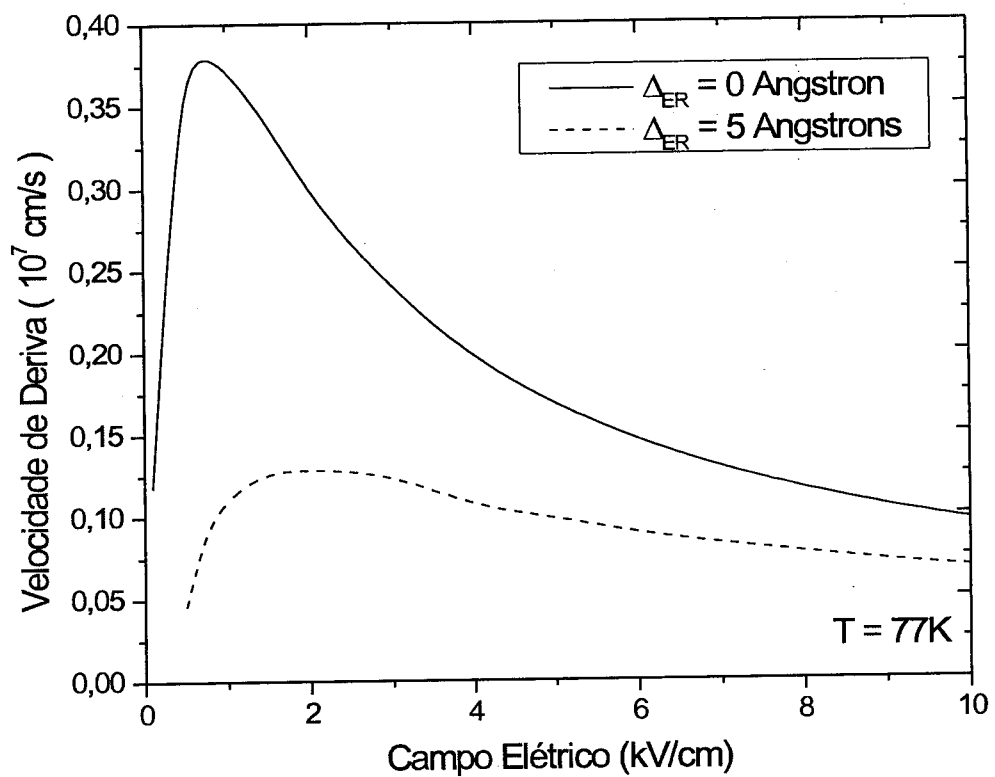


Figura 7.2: Velocidade de Deriva do elétron em função do campo elétrico, comparando como o espalhamento por rugosidade afeta as propriedades do estado estacionário. Os resultados foram obtidos com $N_i = 0$, $L = 30$ nm.

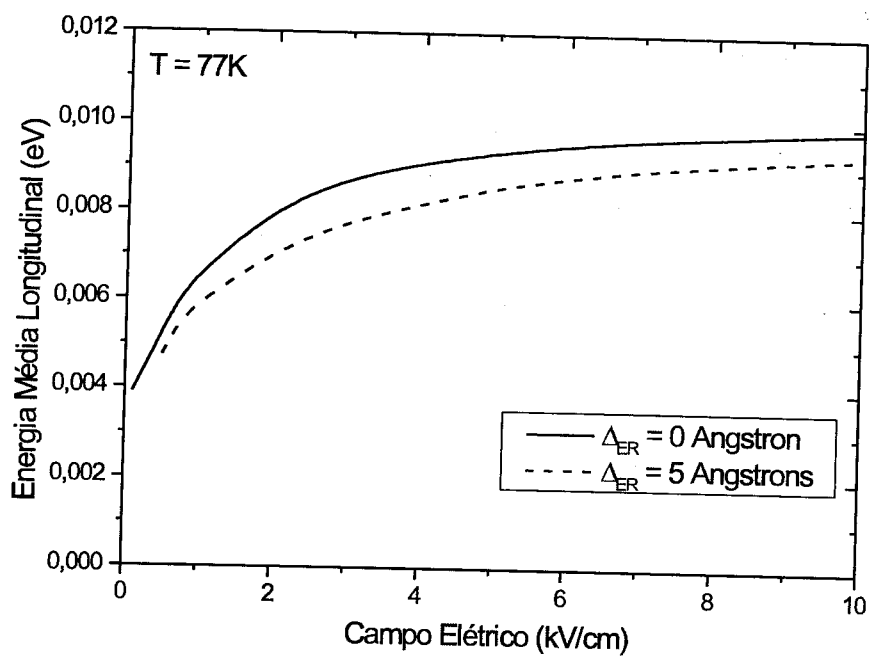


Figura 7.3: Energia média longitudinal em função do campo elétrico. Compara-se como o ER afeta as propriedades do regime estacionário. Os resultados foram obtidos à $T = 77\text{K}$ $N_i = 0$ e $L = 30 \text{ \AA}$.

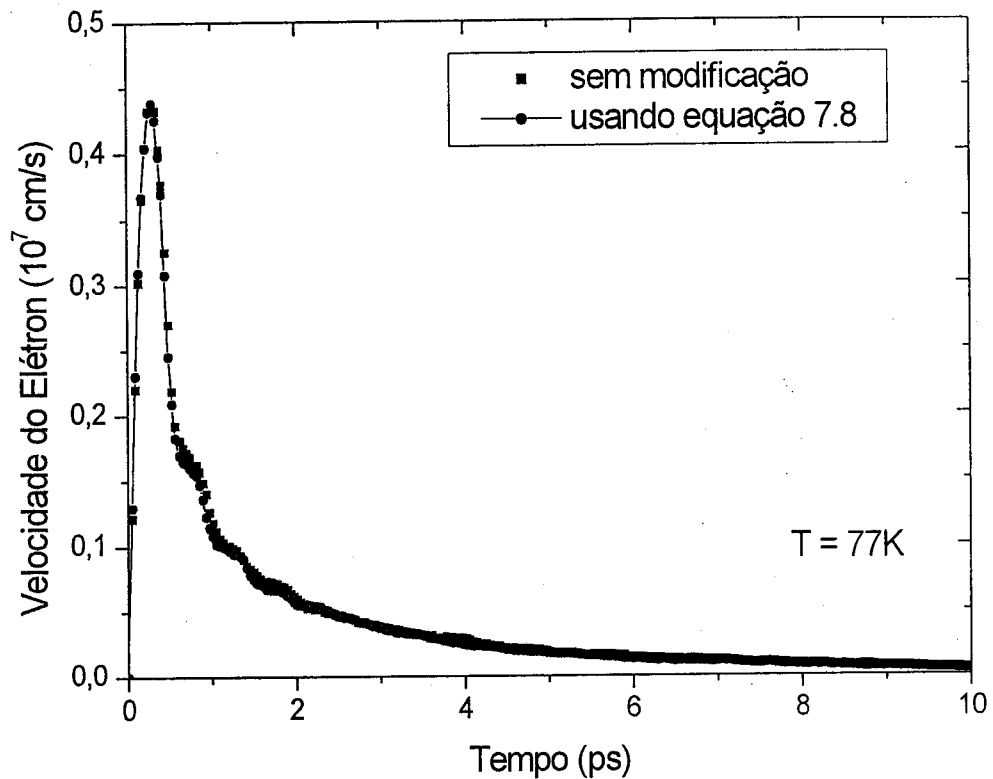


Figura 7.4: Velocidade do elétron em função do tempo. Neste gráfico é comparado a proposta feita pela equação (7.8). Parâmetros utilizados $\Delta_{ER} = 0.9$ nm, $E = 10$ kV/cm, $L = 30$ Å.

do elétron será inversamente proporcional ao campo elétrico [96] [97].

Comparamos no gráfico da figura 7.4 a diferença no período da super-rede introduzida pela equação (7.8). Há pouca diferença entre os dois resultados, a diferença mais significativa é em torno de $t = 1$ ps, quando a velocidade alcança o estado estacionário não se observa qualquer diferença significativa. Porém, em super-redes mais finas esta modificação deve ser levada em consideração.

No gráfico representado pela figura 7.5 apresentamos a mobilidade versus Δ_{ER} . Observa-se que a mobilidade decresce com o aumento da altura da rugosidade. Este comportamento era esperado, já que com uma altura da rugosidade maior a interação da rugosidade com o elétron tende a diminuir a sua mobilidade. Fizemos uma reprodução da curva através do método polinomial de segunda ordem, cuja dependência era esperada já

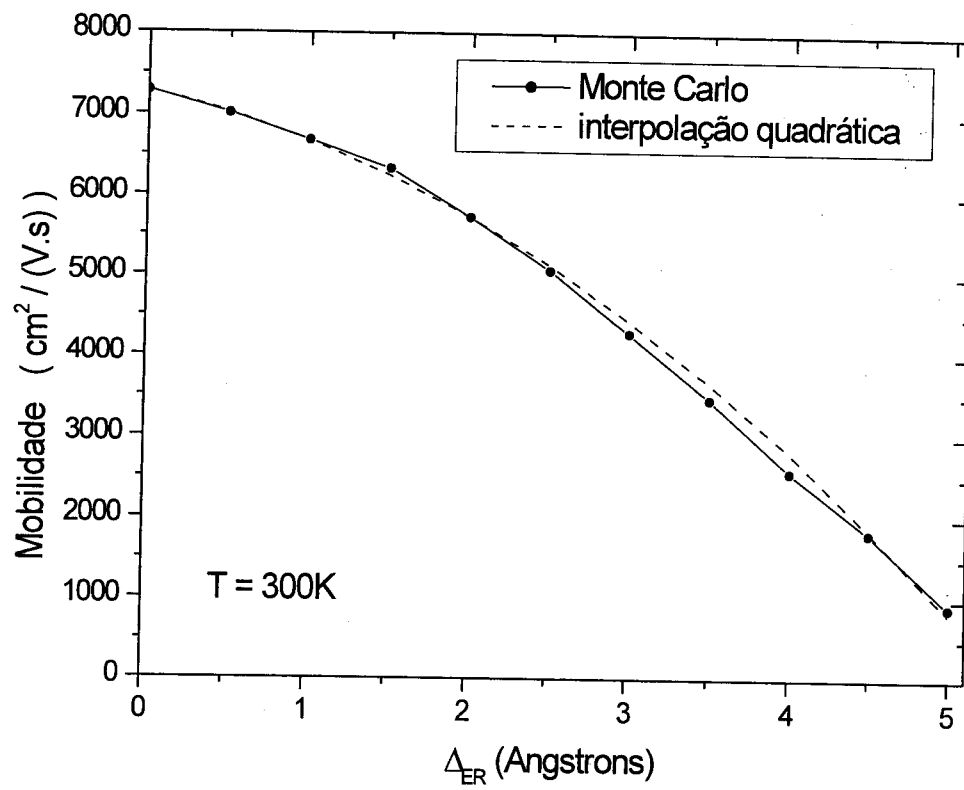


Figura 7.5: Mobilidade em função raiz quadrática média da altura da rugosidade.

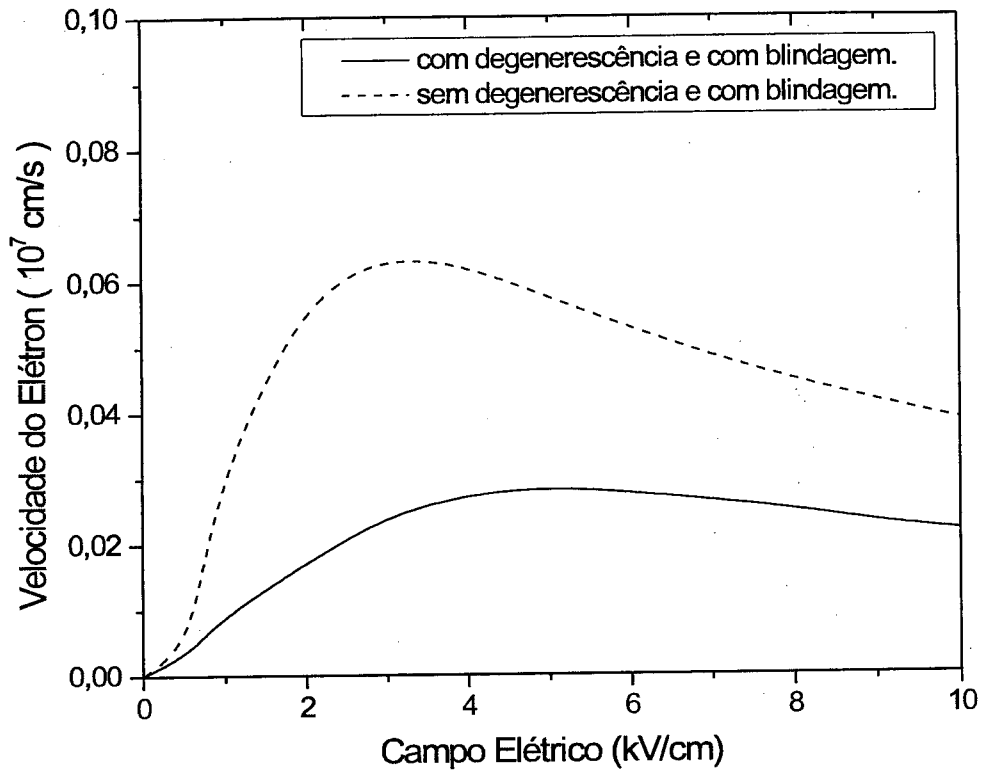


Figura 7.6: Velocidade de Deriva do elétron em função do campo elétrico. Comparação para a influência do efeito da degenerescência, $N_i = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

que $\mu_{ER} \propto \frac{1}{\Delta_{ER}^2}$ [8].

Apresentamos na figura 7.6, a velocidade de deriva do elétron em função do campo elétrico para uma super-rede de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, com $x = 0.3$ de Al a uma temperatura de 77 K. A concentração de impurezas é de $N_i = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, onde a compensação não é incluída. Observamos que a velocidade em altos campos, quando incluída a degenerescência é menor do que a calculada anteriormente. O motivo para isto, é que quando a degenerescência é incluída, isto equivale a dizer que nem todos os estados são permitidos para o elétron, caso este estado já esteja ocupado. Portanto, o elétron terá um livre caminho médio maior, chegando antes ao limite da Zona de Brillouin onde ele será defletido, fazendo com que sua velocidade média diminua. Por este mesmo motivo, o pico do caso degenerado acontece antes do que no caso não degenerado.

7.4 Conclusões

Apesar de estudos recentes nesta área, a aplicação do método de EMC em heteroestruturas semicondutoras, tais como super-redes, ainda não está bem desenvolvido. Alguns modelos foram propostos porém ainda não há um consenso. Por esta razão escolhemos um modelo simples onde é fácil de se extrair conclusões do sistema em estudo.

Foi estudado inicialmente o efeito do mecanismo de espalhamento por rugosidade na interface no transporte eletrônico da super-rede GaAs/Al_xGa_{1-x}As, nos regimes transiente e estático. Os resultados numéricos foram apresentados e discutidos para o presente caso. Mostramos que o mecanismo ER têm um papel fundamental no transporte eletrônico numa super-rede, sendo que, principalmente o parâmetro Δ_{ER} . O comportamento das oscilações de Bloch mudam significativamente, desaparecendo quando o valor de Δ_{ER} aumenta acima de 7Å, por outro lado o parâmetro L tem pouca influência no transporte. No modelo adotado as taxas de espalhamento polar óptico, impureza ionizada e fônons acústicos foram calculadas com base nas expressões para o semicondutor volumétrico. Esperamos que com a utilização das taxas de espalhamento apropriadas para a super-rede, incluindo as funções de onda para o problema proposto, a importância do espalhamento por rugosidade deva crescer. Isto porque, quando tratamos o espalhamento como 3D os outros mecanismos são estimados com um fator acima do que eles teriam se calculados em 2D. Observamos que a correção, que nós propomos para o período da super-rede não produziu qualquer diferença significativa para os parâmetros considerados, contudo para uma super-rede de período menor, esta correção deva ser levada em consideração.

No estudo da influência da degenerescência nas propriedades de transporte da super-rede, foi observado que para concentrações acima de 10^{17} cm^{-3} , a influência deste efeito é considerável no decréscimo da velocidade de deriva. Concluímos que isto se deve ao fato do elétron alcançar antes (no caso com degenerescência) a zona de Brillouin do que na situação sem degenerescência.

Capítulo 8

Conclusões e Trabalhos Futuros

O objetivo deste trabalho foi o de realizar um estudo sistemático das propriedades de transporte em materiais semicondutores através do método de Monte Carlo. A rotina computacional desenvolvida, a partir do método de Monte Carlo, se mostrou bastante versátil, demonstrada através de sua aplicação nos diversos materiais (Modelos) estudados. Quando possível os resultados obtidos foram comparados com resultados experimentais, e ou, propostas de outros modelos. As comparações vêem confirmar a confiabilidade de nossos resultados e conseqüentemente as conclusões parciais propostas ao final dos capítulos 4, 5, 6 e 7. Muitas das conclusões dos estudos já foram expostas ao final dos capítulos equivalentes, tanto que neste capítulo iremos expor um estudo comparativo entre os materiais e apresentar as contribuições inéditas geradas ao longo do desenvolvimento do trabalho.

8.1 Comparação entre as atuações dos mecanismos

Um quadro resumindo o grau de importância da atuação dos mecanismos de espalhamento está representado na figura 8.1.

Em ambos os materiais, GaSb e CdTe, o espalhamento polar óptico deve perder importância em relação ao espalhamento por impurezas ionizadas a baixas temperaturas. No SiGe, no intervalo entre 77K - 300K, não há mudança na ordem de importância dos

Material		Grau de Importância				
		1º	2º	3º	4º	5º
GaSb	Baixos Campos <1 kV/cm	Polar óptico	Impurezas	Intervale	Acústico	Piezoelétrico
	Campos médios 1 - 8 kV/cm	Impurezas	Polar óptico	Intervale	Acústico	Piezoelétrico
CdTe	Baixos Campos <1 kV/cm	Polar óptico	Impurezas	Acústico	Piezoelétrico	Intervale
	Campos médios 1 - 8 kV/cm	Polar óptico	Impurezas	Acústico	Intervale	Piezoelétrico
	Altos Campos >8 kV/cm	Intervale	Polar óptico	Impurezas	Acústico	Piezoelétrico
SiGe	Baixos Campos <1 kV/cm	Intervale f e g	Liga	Impurezas	Acústico	Ionização por impacto
	Campos médios 1 - 8 kV/cm	Intervale f e g	Liga	Impurezas	Acústico	Ionização por impacto
	Altos Campos >8 kV/cm	Ionização por impacto	Intervale f e g	Liga	Impurezas	Acústico

Figura 8.1: Comparação entre a atuação dos mecanismos de espalhamento à temperatura ambiente.

mecanismos apresentados na figura 8.1.

i) CdTe-GaSb

Tanto o CdTe quanto o GaSb, por serem materiais polares, o mecanismo de espalhamento polar óptico é muito importante para se determinar as propriedades de transporte. De forma similar o espalhamento acústico age em ambos os materiais, tendo importância similar. Contudo, as semelhanças param por aqui, pois devido à diferenças na estrutura de banda estes materiais têm comportamentos distintos em relação aos outros mecanismos de espalhamento. No CdTe devido à grande separação entre os vales, o mecanismo de espalhamento intervale começa a atuar apenas em campos da ordem de 8 a 10 kV/cm. Por outro lado, no GaSb devido à baixa separação entre os vales Γ e L, mesmo em baixos campos, este mecanismo influencia as propriedades de transporte deste material. No mecanismo de espalhamento por impurezas, as diferenças são menores, no GaSb sabe-se que a impureza é duplamente ionizável, fazendo com que o espalhamento por impurezas seja bem mais efetivo, do que num material no qual a impureza seja unicamente ionizável, como o CdTe. Também existe o efeito de que as impurezas no GaSb destroem o efeito da CDN, efeito este que não ocorre no CdTe. O espalhamento piezoelétrico no CdTe é menos importante do que no GaSb, provavelmente isto deve-se a um maior "strain" no GaSb o que resulta em uma maior constante piezoelétrica no GaSb do que no CdTe. Um ponto curioso é que apesar dos estudos teóricos alcançarem altos campos elétricos, nenhum trabalho menciona o mecanismo de ionização por impacto, enquanto que no GaSb para campos da ordem de 10 kV/cm este mecanismo deve ser levado em consideração. Tanto trabalhos teóricos quanto experimentais já demonstraram que o CdTe apresenta a CDN, porém neste material a CDN não se deve ao efeito da inversão de populações como no GaSb, mas sim ao efeito randomizante do espalhamento intervale.

ii) SiGe - CdTe

As diferenças entre o $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ e o CdTe são grandes, devido ao fato de que o CdTe é um material polar e o $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ é um material não-polar. Consequentemente, o mecanismo polar óptico não é levado em consideração neste material. Ainda, devido ao fato de sua banda de condução apresentar um mínimo no vale X, o espalhamento intervale têm uma participação muito pequena no transporte deste material. O CdTe por outro

lado, por ter uma estrutura de banda similar ao GaAs, com "gap" direto, o mecanismo intravale é muito importante como já salientamos anteriormente. Aprofundando mais as diferenças entre estes dois materiais, o fato do $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ser uma liga induz a necessidade da inclusão deste mecanismo no cálculo de suas propriedades de transporte para obtenção de uma descrição correta. Por outro lado, este mecanismo é inexistente no CdTe, contudo este mecanismo poderia ser levado em consideração no $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ caso fosse conhecido o valor do potencial de liga. O valor deste parâmetro no $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ é de 0.8 eV, enquanto que em vários materiais situa-se entre 0.2 e 0.5 eV. No $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, apesar do espalhamento intravale não ser levado em consideração e termos obtido uma boa descrição, o mecanismo de espalhamento intravale deve ser considerado no $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. Neste material incluímos explicitamente a anisotropia da banda de condução, sendo que os mecanismos de espalhamento intravale ocorrem em vales que estejam na mesma direção e vales que estejam em direções perpendiculares. No CdTe a anisotropia da banda de condução não foi levada em conta, pois é possível obter-se uma boa descrição de suas propriedades sem levar em conta este efeito. Sabemos também que o mecanismo de espalhamento de ionização por impacto é fundamental para compreender o comportamento deste material em altos campos, ao contrário do que ocorre com o CdTe. Tanto o espalhamento acústico como o piezoelétrico não são muito importantes nestes materiais, eventualmente em baixas temperaturas estes mecanismos venham a ter uma maior contribuição nas propriedades de transporte. Um dos poucos pontos em comum entre estes dois materiais é o espalhamento por impurezas, importante em ambos os materiais.

iii) GaSb - SiGe

Como o GaSb é um material polar como o CdTe, grande parte dos argumentos usados no CdTe são cabíveis para a comparação entre o $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ e o GaSb. Apesar do fato que seja necessário incluir o mecanismo de ionização por impacto para campos acima de 10 kV/cm no GaSb, para o $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ este mecanismo só é necessário a partir de campos muito altos. O mecanismo de impurezas ionizadas deva ser mais importante no GaSb do que no $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ devido a natureza duplamente ionizável da impureza normalmente presente neste material (GaSb). O mecanismo piezoelétrico que não foi incluído no $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, têm uma pequena mas consistente presença em baixos campos no GaSb.

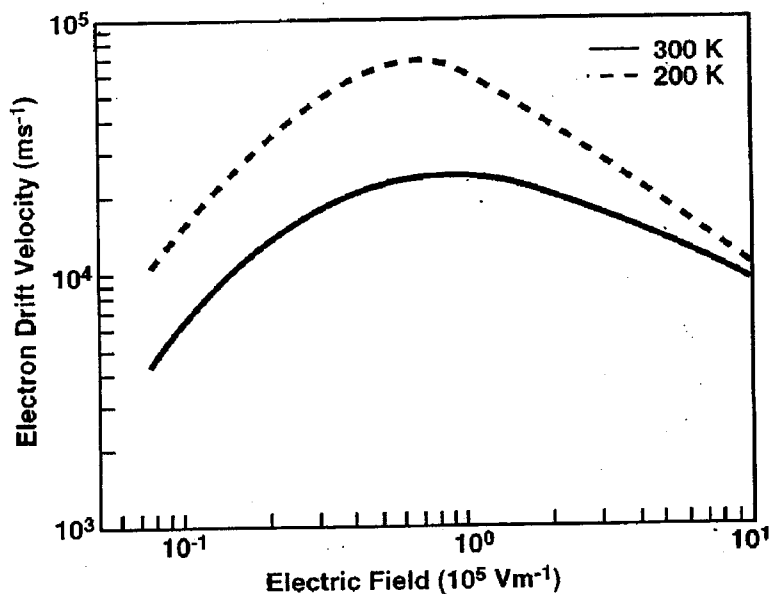


Figura 8.2: Velocidade de Deriva em função do campo elétrico para o n-GaSb. Resultado retirado do trabalho de Damayanthi e colaboradores [59].

8.2 Contribuições originais do trabalho

Um dos pontos mais importantes obtidos em nosso trabalho está relacionado ao transporte de elétrons no GaSb. Como mostramos no capítulo 4, o fenômeno da CDN só aparece para temperaturas inferiores a 100K e concentrações menores que 10^{16} cm^{-3} , resultados estes suportados pelos valores experimentais da velocidade de deriva em função do campo elétrico[55].

Os resultados recentes obtidos por Damayanthi [59] (figura 8.2), tem um comportamento completamente diferente dos resultados obtidos pelo nosso modelo para o n-GaSb. Ainda com relação ao n-GaSb, mostramos que a mobilidade é fortemente influenciada pelo mecanismo de espalhamento por impurezas ionizadas, e que o modelo de CW é o que melhor representa o comportamento deste parâmetro com a temperatura. O resultado apresentado na figura 8.3, retirado do trabalho de Kourkoutas[98], representa a dependência da condu-

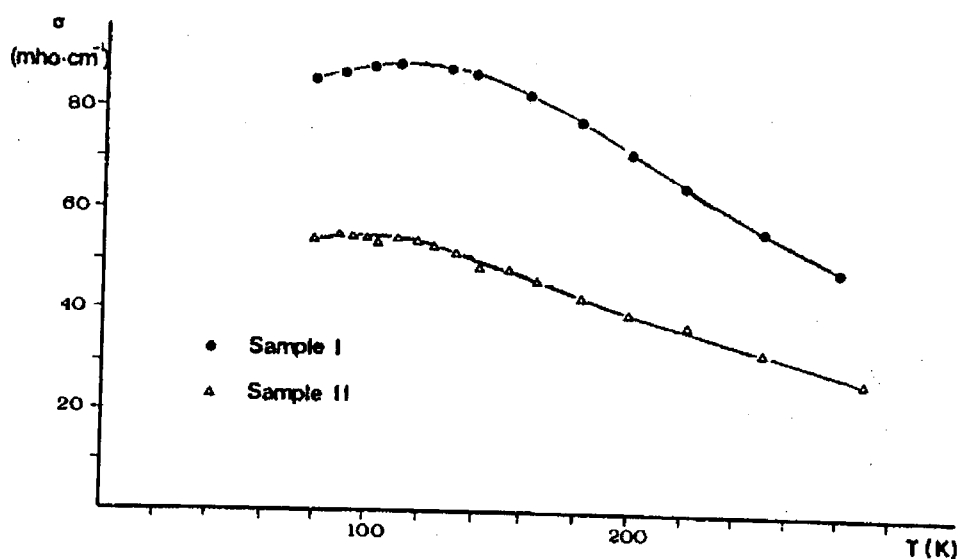


Figura 8.3: Condutividade em função da temperatura para o n-GaSb. Retirado do trabalho de Kourkoutas [98].

tividade em função da temperatura, resultado este que qualitativamente reflete os resultados obtidos na figura 4.8. Além disto, foi demonstrado que a compensação eletrônica exerce um papel fundamental nas grandezas calculadas.

Os resultados obtidos para os parâmetros do $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ são inéditos na literatura e merecem um estudo mais aprofundado, quando estes puderem ser amparados por resultados experimentais, ainda não disponíveis na literatura.

A aplicação do Método de Monte Carlo numa super-rede para o estudo da influência da rugosidade nas propriedades dinâmicas e estáticas do transporte eletrônico, foram propostos e realizados pela primeira vez. Apesar da simplicidade do modelo implementado, os resultados refletem qualitativamente o comportamento esperado. Ainda no sistema bi-dimensional, mostramos a influência da inclusão da degenerescência nas propriedades estáticas do transporte eletrônico.

8.3 Propostas para trabalhos futuros

As idéias expostas aqui, são decorrentes de observações feitas ao longo do trabalho realizado e que podem ser perfeitamente implementadas na rotina Monte Carlo desenvolvida. Passamos a seguir, a expôr as idéias principais de possíveis trabalhos futuros.

i) Semicondutores Magnéticos Diluídos - o efeito do campo magnético

Inicialmente ao estudarmos as propriedades do CdTe nos deparamos com dois interessantes ternários deste material: $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ e o $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$. A escolha do estudo do $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ em vez do $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, deveu-se exclusivamente a disponibilidade naquele momento de material bibliográfico adequado. O $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ enquadra-se na categoria de um semicondutor magnético diluído (SMD), este tipo de material têm atraído muito atenção dos pesquisadores devidos à suas potenciais aplicações, como por exemplo em dispositivos magneto-ópticos. Há também vários fenômenos que ocorrem quando um campo magnético é aplicado em um material SMD, a separação das bandas de valência e da banda de condução, conhecida como efeito Zeeman, o efeito polaron-magnético, encontrado sob várias formas[99], são aspectos importantes pois afetam as propriedades de materiais como o $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. Pode-se investigar como a aplicação de campos magnéticos afeta nas propriedades do $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$, incluindo o efeito polaron-magnético, o efeito Zeeman e o efeito que o campo exerce sobre a densidade de estados, o que por sua vez influenciará nos cálculos das taxas de espalhamento.

ii) A influência do campo elétrico na estrutura de bandas de uma super-rede.

Numa super-rede a coerência quântica têm uma função importante como mostra o efeito de Wannier-Stark. O movimento dos elétrons em uma super-rede é descrito pela mesma equação semi-clássica do sólido cristalino, quando aplicado apenas um campo elétrico \mathbf{F} :

$$\dot{\mathbf{k}} = -\frac{e\mathbf{F}}{\hbar}. \quad (8.1)$$

Na super-rede o vetor de onda \mathbf{k} aumenta monotonicamente até alcançar o limite da primeira zona de Brillouin, ao contrário do que ocorre em um material bulk. Quando o elétron alcança o limite da primeira zona de Brillouin, pela reflexão de Bragg, o elétron é refletido dando origem ao movimento oscilatório conhecido por oscilações de Bloch. Como

resultado da interferência de várias oscilações de Bloch, as funções de onda estáticas tornam-se localizadas. Uma super-rede é formada por camadas alternadas de dois semicondutores distintos com diferentes "gaps", sendo que a espessura destas camadas variam em geral de 1 a 10 nm [86]. Em geral, no estudo das super-redes os cálculos feitos normalmente incluem uma série de simplificações o qual limitam a validade das conclusões[92, 101]. Até mesmo os modelos baseados no método de Monte Carlo fazem suas simplificações[94, 101, 103], normalmente se supõe que a banda não se inclina quando o campo elétrico é aplicado. A idéia proposta neste item, seria construir um modelo que levasse em consideração a inclinação da banda e os mecanismos de espalhamento mais realistas (2D), para se obter um cálculo das propriedades de transportes mais próximo da realidade. Este modelo pode ser amparado pelos resultados experimentais de Grahan e colaboradores[104].

iii) Efeito da Anisotropia da Estrutura de Bandas no Transporte.

O efeito da anisotropia nas propriedades de transporte em semicondutores é um assunto pouco estudado, e há apenas poucos trabalhos tratando do assunto[7]. Em estudos teóricos normalmente calcula-se a estrutura de banda através do modelo não-parabólico. A consideração da anisotropia no estudo de um material, eventualmente, até não seja relevante, porém atualmente não há uma estimativa confiável sobre o quanto a inclusão da anisotropia irá afetar nas propriedades de transporte. Materiais que dependam principalmente do ponto Γ para o transporte não têm problemas com a anisotropia pois este ponto de simetria não é anisotrópico. Contudo, há materiais que mesmo a temperatura ambiente não dependem apenas do vale Γ , ainda assim a medida em que o campo vai aumentando os vales satélites começam a ser populados. Para este estudo pode-se utilizar o método EMC, incluindo os efeitos da anisotropia e as taxas de espalhamento calculadas através da densidade de estados obtidas pelo método de pseudopotencial. Os resultados obtidos no capítulo 4, mostram que o GaSb é um bom candidato a esta proposta.

Referências Bibliográficas

- [1] T. Kurosawa, in Proceedings of the International Conference on the Physics of Semiconductor, Kyoto, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. A **49**, 345, 1966.
- [2] H. Budd, in Proceedings of the International Conference on the Physics of Semiconductor, Kyoto, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. A **21**, 420, 1966.
- [3] C. Moglestue, *Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices*, Chapman&Hall, (London), 1993.
- [4] C. Jacoboni, P. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Devices Simulation*, Springer-Verlag (New York), 1989.
- [5] C. Jacoboni and L. Reggiani, Rev. Modern Phys. **55**, 645, 1983.
- [6] K. Tomizawa, *Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices*, Artech House (Boston-London), 1993.
- [7] J. M. Hinckley, J. Singh, J. Appl. Phys. **80**, 6766, 1996.
- [8] J. Singh, *The Physics of Semiconductor and Their Heterostructures*, McGraw-Hill (New York), 1993.
- [9] S. Selberherr, *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*, Springer-Verlag Wien (New York).
- [10] B. R. Nag, Solid-State Sciences **11**, *Electron Transport in Compound Semiconductors*, Springer Series, 1980.

- [11] M. E. Conwell, and V. F. Weisskopf, *Phys. Rev.* **77**, 388, 1950.
- [12] H. Brooks and C. Herring, , *Phys. Rev.* **83**, 879, 1951.
- [13] C. Erginsoy, *Phys. Rev.* **79**, 1013, 1950.
- [14] N. Sclar, *Phys. Rev.* **104**, 1559, 1956.
- [15] J. W. Harrison, J. R. Hauser, *J. Appl. Phys.* **47**, 292, 1976.
- [16] B. Pödör, *Phys. Status Solidi* **16**, K167, 1966.
- [17] E. O. Kane, *J. Phys. Chem. Solids* **1**, 82, 1956.
- [18] M. Costato, C. Jacoboni and L. Reggiani, *Phys. Stat. Sol. (b)* **32**, 461, 1972.
- [19] H. Frölich *Proc. Royal Soc. A* **160**, 230, 1937.
- [20] J. D. Wiley, *Phys. Rev. B* **4**, 230, 1972.
- [21] G. L. Bir, and G. E. Pikus, *Sov. Phys. Solid State* **2**, 2039, 1961.
- [22] L. Reggiani, C. Canali, F. Nava, G. Ottaviani; *Phys. Rev. B* **16**, 2781, 1977.
- [23] P. J. Briggs, A. B. Walker and D. C. Herbert, *Semicond. Sci. Technol.* **13**, 692, 1998.
- [24] L. V. Keldish, *Soviet Physics JETP* **21**, 1135, 1965.
- [25] E. Bellotti, D. K. Doshi, K. F. Brennan, J. D. Aldebrecht and P. P. Ruden, *J. Appl. Phys.* **85**, 916, 1999.
- [26] N. Sano, T. Aoki, M. Tomizawa and A. Yoshii, *Phys. Rev. B* **41**, 12122, 1990.
- [27] I. Dharssi, and P. N. Butcher, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 4629, 1990.
- [28] J. F. Palmier, G. Etemadi, A. Sibille, M. Hadjazi, F. Mollot, R. Planel, *Surface Science* **267**, 574, 1992.
- [29] C. Herring and E. Vogt, *Phys. Rev.* **101**, 944, 1956.
- [30] F. Rossi, P. Poli and C. Jacoboni, *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 1017, 1992.

- [31] R. W. Hockney, E. W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles*, IOP Publishing Limited, (Bristol), 1994.
- [32] R. Castagne, *Physica* **134B**, 55, 1985.
- [33] H. D. Rees, *Phys. Lett.*, **26A**, 416, 1968.
- [34] P. J. Price, *Semiconductors and Semimetals* **14**, 249, 1979.
- [35] J. G. Ruch, W Fawcett, *J. Appl. Phys.* **41**, 3843, 1970.
- [36] J. Pozela, A. Reklaitis, *Solid State Electronics* **23**, 927, 1979.
- [37] H. Shichijo, K Hess, *Phys. Rev. B* **23**, 4197, 1981.
- [38] P. A. Houston and A. G. R. Evans, *Solid State Electron.* **20**, 197, 1977.
- [39] P. Lugli, D. K. Ferry, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1295, 1986.
- [40] M. A. Osman, D. K. Ferry, *Phys. Rev. B* **36**, 6018, 1987.
- [41] W. A. Harrison, *Phys. Rev. B* **53**, 12869, 1996.
- [42] P. Borowik, *J. Appl. Phys.* **82**, 4350, 1997.
- [43] J. M. M. Pantoja, *IEEE Elect. Dev. Letts.* **18**, 258, 1997.
- [44] N. Nintunze, M. A. Osman, *Semicond. Sci. Technol.* **10**, 11, 1995.
- [45] D. E. Hill, *J. Appl. Phys.* **41**, 1815, 1970.
- [46] J. S. Blakemore, *J. Appl. Phys.* **53**, R123, 1982.
- [47] V. L. Dalal, *Appl. Phys. Lett.* **12**, 489, 1970.
- [48] P. S. Dutta and H. L. Bhat, *J. Appl. Phys. Lett.* **81**, 5821, 1997.
- [49] G. Motosugi, T. Kagawa, *Jpn. J. Appl. Phys.* **19**, 2303, 1980.
- [50] O. Hildebrand, W. Kuebard, K. W. Benz, M. H. Pilkuhn, *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-17**, 284, 1981.

- [51] L. Esaki, *J. Crystal Growth* **52**, 227, 1981.
- [52] R. D. Baxter, R. T. Bate, F. J. Reid, *J. Phys. Chem. Solids* **26**, 41, 1965.
- [53] V. W. L. Chin, *Solid State Electronics* **38**, 59, 1995.
- [54] H. J. Lee and J. C. Wooley, *Can. J. Phys.* **59**, 1844, 1981.
- [55] W. Jantsch, and H. Heinrich, *Phys. Rev. B* **3**, 420, 1971.
- [56] C. Hilsum, H. D. Rees, *Electronics Letters* **6**, 277, 1970.
- [57] J. G. Ruch, *Appl. Phys. Letters* **20**, 246, 1972.
- [58] D. C. Smith, E. D. O'Sullivan, L. Rota, A. C. Maciel, J. F. Ryan, *Phys. Stat. Sol.* **204**, 110, 1997.
- [59] P. Damayanthi and R. P. Joshi, *J. Appl. Phys. Lett.* **86**, 5060, 1999.
- [60] J. Basinsky, C. C. Y. Kwan, and J. C. Wooley, *Can. J. Phys.* **50**, 1068, 1972.
- [61] H. Arimoto, N. Miura, R. J. Nicholas, N. J. Mason and P. J. Walker, *Phys. Rev. B* **47**, 4560, 1998.
- [62] Y. P. Varshini, *Physica (Netherlands)* **34**, 149, 1967.
- [63] T. Ikoma, K. Sakai, Y. Adachi and H. Yanai, *Jap. J. of Appl. Phys.* **16**, 1379, 1977.
- [64] P. N. Butcher, W. Fawcett, *Proc. Phys. Soc.* **86**, 1205, 1965.
- [65] D. L. Rode, *Phys. Rev. B* **2**, 1012, 1970.
- [66] B. K. Ridley, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10**, 1589, 1977.
- [67] P. S. Dutta, V. Prasad, H. L. Bhat and V. Khumar, *J. Appl. Phys.* **80**, 2847, 1996.
- [68] P. Damayanthi, R. P. Joshi and J. A. McAdoo, *J. Appl. Phys.* **88**, 817, 2000.
- [69] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580, 1955.
- [70] J. Robert, B. Pistouilet, D. Barjon, and A. Raymond, *J. Phys. Chem. Solids* **34**, 2221, 1973.

- [71] F. Long, P. Harrison and W. E. Hagston, *J. Appl. Phys.* **79**, 6939, 1996.
- [72] M. Bugajsky, P. Becla, P. A. Wolff, D. Heiman, L. R. Ram-Mohan, *Phys. Rev. B* **38**, 10512, 1988.
- [73] D. Heiman, P. A. Wolff, J. Warnock, *Phys. Rev. B* **27**, 4848, 1983.
- [74] R. R. Galazka, S. Nagata e P. H. Keeson, *Phys. Rev. B* **22**, 3344, 1980.
- [75] S. B. Oseroff, *Phys. Rev. B* **25**, 6584, 1982.
- [76] J. Voves *Materials Science and Eng.* **B35**, 417, 1995.
- [77] K. Ando e H. Akinaga, *J. of Magnetism and Magnetic Materials* **140**, 2029, 1995.
- [78] J. R. Chelikovsky and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **14**, 556, 1976.
- [79] V. Borsari, C. Jacoboni, *Phys. Stat. Sol. (b)* **54**, 649, 1972.
- [80] C. Canali, M. Martini, G. Ottaviani, K. R. Zanio, *Phys. Letters* **33A**, 241, 1970.
- [81] K. Zanio, *Semiconductors and Semimetals Vol.13*, Academic Press, 1978.
- [82] T. C. Lin, D. R. Young, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 3499, 1993.
- [83] M Ershov, V. Ryzhii, *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, 1365, 1994.
- [84] M. V. Fischetti, S. E. Laux, *Phys. Rev. B* **38**, 9721, 1988.
- [85] L. Esaki, and R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.* **14**, 61, 1970.
- [86] R. Mazurczyk, *Chaos Solitons & Fractals* **10**, 1071, 1999.
- [87] P. Lugli and D. K. Ferry, *IEEE Trans. Elect. Dev.* **ED-32**, 2431, 1985.
- [88] A. Sibille, J. F. Palmier, H. Wang, F. Mollot, *Phys. Rev. Letters* **64**, 52, 1990.
- [89] A. Wacker, A. P. Jauho, S. Rott, A. Markus, P. Binder, G. H. Döhler, *Phys. Rev. Letters* **83**, 836, 1999.
- [90] M. Morifugi, C. Hamaguchi, *Phys. Rev. B* **58**, 12842, 1998.

- [91] S. Adachi, *Properties of Aluminium Gallium Arsenide*, IEE INSPEC, (London), 1993.
- [92] G. Weber, A. M. de Paula, *Superlattices and Microstructures* **23**, 249, 1998.
- [93] J. P. Leburton, and K. Kahen, *Superlattices and Microstructures* **1**, 49, 1985.
- [94] M. Artaki and K. Hess, *Superlattices and Microstructures* **1**, 489, 1985.
- [95] R. P. Joshi, *Appl. Phys. Letters* **72**, 2156 1998.
- [96] D. L. Andersen and E. J. Aas, *J. Appl. Phys.* **44**, 3721, 1973.
- [97] S. Rott, P. Binder, N. Linder and G. H. Döler, *Phys. Rev. B* **59**, 7334, 1999.
- [98] C. D. Kourkoutas, P. D. Bekris, G. J. Papaioannou, P. C. Euthymiou, *Solid State Comm.* **49**, 1071, 1984.
- [99] J. Miao, *The Theory of Magnetic Polarons and Magnetic Field Effect in Diluted Magnetic Semiconductors*, University of Hull, 1998.
- [100] F. Ren, C. R. Abernathy, J. D. Mackenzie, B. P. Gila, S. J. Pearton, M. Hong, M. A. Marcus, M. J. Schurman, A. G. Baca, R. J. Shul, *Solids State Electronics* **42**, 2177, 1998.
- [101] X. L. Lei, I. C. da Cunha Lima, A. Trooper, *Superlattices and Microstructures* **23**, 243, 1998.
- [102] G. J. Warren, S. B. Rand, R. A. Abram, R. W. Keisall, *Semicond. Sci. Technol.* **6**, 784, 1991.
- [103] J. Voves, H. _ermáková, comunicação privada.
- [104] H. T. Grahan, K. von Klitzing, K. Ploog, G. H. Döler, *Phys. Rev. B* **43**, 12094, 1991.
- [105] X. L. Lei, *Semicond. Sci. Technol.* **9**, 567, 1994.

Apêndice A

Avaliação Analítica de Integrais

Neste apêndice apresentamos uma aproximação analítica das integrais decorrentes dos cálculos de alguns mecanismos de espalhamento. Estas integrais envolvem a função distribuição de Bose-Einstein. Com uma boa aproximação o número de ocupação de fônons n_q , pode ser escrito como:

$$n_q(x) = \frac{1}{x} - \frac{1}{2} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{B_{2m} x^{2m-1}}{(2m)!}, \quad x \leq \bar{x}, \quad (\text{nqx1})$$

$$n_q(x) = \exp(-x), \quad x > \bar{x}, \quad (\text{nqx2})$$

onde o termo B_{2m} são os números de Bernoulli. O termo \bar{x} , apesar de depender do número de termos a serem tomados na série, é usualmente adotado próximo de 3.5[4], e para assegurar a validade da expansão em séries, é necessário que $\bar{x} < 2\pi$.

Para o caso de elétrons, substituindo uma expansão até a nona potência nas equações (2.28) e (2.29) para o caso de absorção, obtemos as seguintes expressões:

$$F_1(x) = \begin{aligned} & \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{48} - \frac{x^6}{4320} + \frac{x^8}{241920} - \frac{x^{10}}{12096000} + \frac{x^{12}}{622702080}, \quad x \leq \bar{x}_a \\ & \frac{\bar{x}_a^2}{2} - \frac{\bar{x}_a^3}{6} + \frac{\bar{x}_a^4}{48} - \frac{\bar{x}_a^6}{4320} + \frac{\bar{x}_a^8}{241920} - \frac{\bar{x}_a^{10}}{12096000} + \frac{\bar{x}_a^{12}}{622702080} \\ & + \exp(-\bar{x}_a) (\bar{x}_a^2 + 2\bar{x}_a + 2) - \exp(-x) (x^2 + 2x + 2), \quad x > \bar{x}_a \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{aligned}
& \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{8} + \frac{x^5}{60} - \frac{x^7}{5040} + \frac{x^9}{272160} - \frac{x^{11}}{143305600} + \frac{x^{13}}{622702080}, \quad x \leq \bar{x}_a \\
F_2(x) = & \frac{\bar{x}_a^3}{3} - \frac{\bar{x}_a^4}{8} + \frac{\bar{x}_a^5}{60} - \frac{\bar{x}_a^7}{5040} + \frac{\bar{x}_a^9}{272160} - \frac{\bar{x}_a^{11}}{143305600} + \frac{\bar{x}_a^{13}}{622702080} \\
& + \exp(-\bar{x}_a) (\bar{x}_a^3 + 3\bar{x}_a^2 + 6\bar{x}_a + 6), \\
& - \exp(-\bar{x}_a) (\bar{x}_a^3 + 3\bar{x}_a^2 + 6\bar{x}_a + 6), \quad x > \bar{x}_a
\end{aligned} \tag{A.2}$$

que correspondem aos termos utilizados no cálculo do espalhamento acústico inelástico ($\bar{x}_a = 3.5$). Aplicando o mesmo procedimento das equações (2.30) e (2.31), encontramos as seguintes expressões:

$$\begin{aligned}
& \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} - \frac{x^6}{4320} + \frac{x^8}{241920} - \frac{x^{10}}{12096000} + \frac{x^{12}}{622702080}, \quad x \leq \bar{x}_e, \\
G_1(x) = & \frac{\bar{x}_e^2}{2} + \frac{\bar{x}_e^3}{6} + \frac{\bar{x}_e^4}{48} - \frac{\bar{x}_e^6}{4320} + \frac{\bar{x}_e^8}{241920} - \frac{\bar{x}_e^{10}}{12096000} + \frac{\bar{x}_e^{12}}{622702080} \\
& + \exp(-\bar{x}_e) (\bar{x}_e^2 + 2\bar{x}_e + 2) - \exp(-x) (x^2 + 2x + 2), \quad x > \bar{x}_e,
\end{aligned} \tag{A.3}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{x^3}{3} + \frac{x^4}{8} + \frac{x^5}{60} - \frac{x^7}{5040} + \frac{x^9}{272160} - \frac{x^{11}}{143305600} + \frac{x^{13}}{622702080}, \quad x \leq \bar{x}_e, \\
G_2(x) = & \frac{\bar{x}_e^3}{3} + \frac{\bar{x}_e^4}{8} + \frac{\bar{x}_e^5}{60} - \frac{\bar{x}_e^7}{5040} + \frac{\bar{x}_e^9}{272160} - \frac{\bar{x}_e^{11}}{143305600} + \frac{\bar{x}_e^{13}}{622702080} \\
& + \exp(-\bar{x}_a) (\bar{x}_e^3 + 3\bar{x}_e^2 + 6\bar{x}_e + 6), \\
& - \exp(-\bar{x}_a) (\bar{x}_e^3 + 3\bar{x}_e^2 + 6\bar{x}_e + 6), \quad x > \bar{x}_e,
\end{aligned} \tag{A.4}$$

onde $\bar{x}_e = 4$. Integrais similares aparecem para buracos, utilizando-se um procedimento similar ao adotado para elétrons. Substituindo-se a expansão A.1 e a expressão A.1 nas equações (2.70) e (2.71) teremos:

$$\begin{aligned}
& 2x^2 \left(1 - \frac{34}{105} \sqrt{2}x + \frac{x^2}{12} \right), \quad x \leq \frac{3}{\sqrt{2}}, \\
F_3(x) = & \frac{1017}{280} + \left(68 - \frac{2358}{x^2} + \frac{41931}{x^4} \right) \exp(-3) \\
& - 8 \exp(-\sqrt{2}x) (x^2 + 4\sqrt{2}x + 28) \\
& + \frac{72\sqrt{2}}{x} + \frac{252}{x^2} + \frac{270\sqrt{2}}{x^3} + \frac{270}{x^4}, \quad x > \frac{3}{\sqrt{2}},
\end{aligned} \tag{A.5}$$

$$\begin{aligned}
 & x^3 \left(\frac{136}{105} \sqrt{2} - x + \frac{44\sqrt{2}x^2}{315} \right), & x \leq \frac{3}{\sqrt{2}}, \\
 F_4(x) = & \frac{801}{140} + \left(312 - \frac{13248}{x^2} + \frac{300078}{x^4} \right) \exp(-3) \\
 & - \exp(-\sqrt{2}x) (8\sqrt{2}x^3 + 72x^2 + 288\sqrt{2}x) \\
 & 1824 + \frac{4320\sqrt{2}}{x} + \frac{14400}{x^2} + \frac{15120\sqrt{2}}{x^3} + \frac{15120}{x^4}, & x > \frac{3}{\sqrt{2}},
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

que são os termos utilizados na absorção. A partir das equações (2.72) e (2.73) teremos resultados similares para a emissão, expressos pelas seguintes equações:

$$\begin{aligned}
 G_3(x) = & 2x^2 \left(1 + \frac{34}{105} \sqrt{2}x + \frac{x^2}{12} \right), & x \leq \frac{3}{\sqrt{2}}, \\
 & \frac{5913}{280} + \frac{136\sqrt{2}x^3}{105} - 9 \left(4 - \frac{162}{5x^2} + \frac{729}{7x^4} \right), & x > \frac{3}{\sqrt{2}},
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

$$\begin{aligned}
 G_4(x) = & x^3 \left(\frac{136\sqrt{2}}{105} + x + \frac{44}{315} \sqrt{2}x^2 \right), & x \leq \frac{3}{\sqrt{2}}, \\
 & \frac{6371}{140} + 2x^4 - 81 + \frac{729}{x^2} - \frac{19683}{8x^4}, & x > \frac{3}{\sqrt{2}}.
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

Estas expressões foram desenvolvidas para simplificar os cálculos das taxas de espalhamento. Contudo, caso seja necessário calcular explicitamente as integrais, estas não deverão alterar significativamente o tempo total da simulação.

Apêndice B

Geração de Números Randômicos para uma Distribuição

No método de MC é necessário avaliar, durante a simulação, o ângulo de espalhamento final. Em alguns mecanismos, o cálculo deste ângulo depende de uma dada distribuição. Felizmente, é muito fácil gerar uma sequência de números randômicos entre 0 e 1, e as técnicas utilizadas são rápidas e não comprometem o tempo total de simulação. Neste apêndice, descreveremos duas técnicas de geração de números randômicos: 1-Técnica de rejeição; 2 - Técnica combinada.

B.1 Técnica de Rejeição

Consideremos inicialmente um número R positivo de modo que este obedeça a seguinte restrição:

$$R \geq g(x), \quad (\text{B.1})$$

em um intervalo (a,b) . São gerados dois números randômicos r_1 e r_2 entre $(0,1)$. Usando estes números faremos as seguintes operações:

$$x_1 = a + (b - a) r_1, \quad (\text{B.2})$$

$$g_2 = r_2 R. \quad (\text{B.3})$$

Desta forma geramos dois números randômicos com uma distribuição (a,b) e $(0,R)$, respectivamente. Comparando o valor gerado randomicamente com a função $g(x_1)$, o número x_1 será aceito, caso satisfaça a seguinte condição:

$$g_2 \leq g(x_1), \quad (\text{B.4})$$

caso esta condição não seja satisfeita, x_1 é rejeitado e um novo par de números randômicos é gerado. O procedimento será repetido até que a condição representada pela equação (B.4) seja satisfeita. Quando a condição é satisfeita retêm-se x_1 e a simulação prossegue normalmente.

Observando a figura B.1, notamos que o ponto que satisfaz a condição (B.4) é o representado pelo número randômico r_2 . A princípio, n_r tentativas podem ser necessárias até que esta condição seja alcançada.

Esta técnica aplica-se a qualquer distribuição $g(x)$ que seja contínua em um intervalo (a,b) . Contudo, caso neste intervalo a função seja muito aguda, pode-se gerar muitos números até que o par satisfaça a condição (B.4). Para uma distribuição que apresente este tipo de comportamento pode-se aplicar a técnica combinada.

B.2 Técnica Combinada

Nesta técnica o termo x_1 é gerado da mesma maneira que na técnica de rejeição, dada pela equação (B.2), para uma dada distribuição $h(x)$. Ao multiplicar-se esta função por uma constante Q de modo que:

$$Qh(x) \geq g(x), \quad (\text{B.5})$$

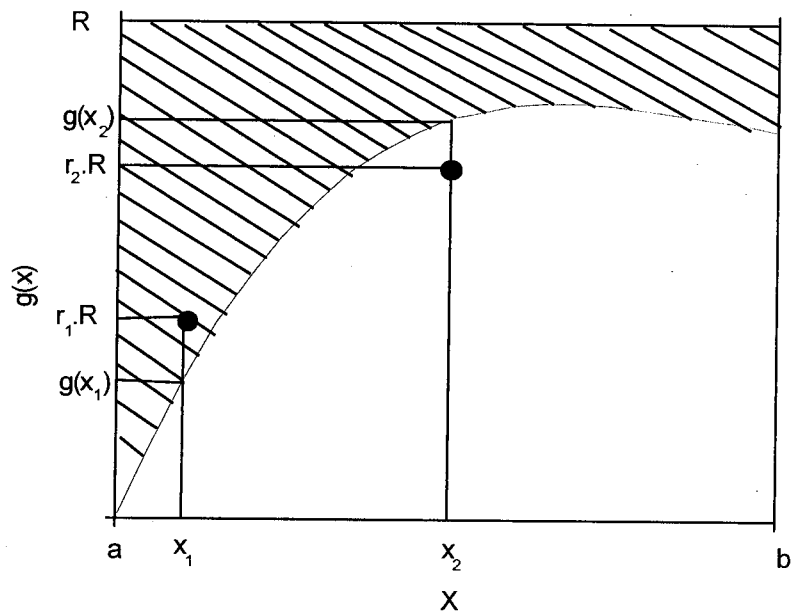


Figura B.1: Interpretação geométrica da técnica de rejeição para uma distribuição $g(x)$ em um intervalo (a,b) . Os números randômicos estão distribuídos entre 0 e 1.

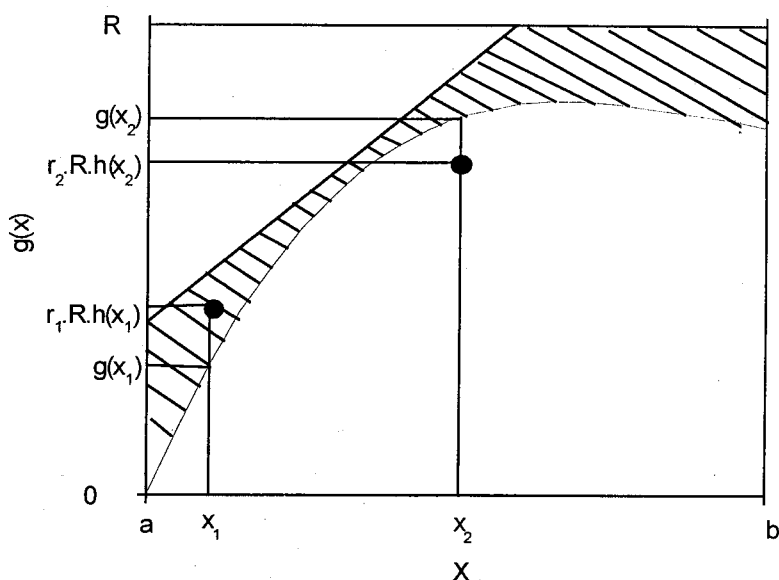


Figura B.2: Interpretação geométrica da técnica combinada para uma distribuição $g(x)$ em um intervalo (a,b) . Os números randômicos estão distribuídos entre 0 e 1.

no intervalo de interesse (a,b) , um novo número randômico r_2 é gerado no intervalo $(0,1)$ e o valor gerado por x_1 será aceito, caso a seguinte condição seja satisfeita:

$$r_2 Q h(x) < g(x_1). \quad (\text{B.6})$$

A probabilidade de obter-se o valor x_1 é igual a probabilidade de ter o valor x_1 aceito dentro de um intervalo dx em torno do ponto x , o qual será proporcional a $h(x)dx$ vezes a probabilidade de x_1 ser aceito, que é $g(x)/Qh(x)$. Portanto a probabilidade final é proporcional a $g(x)dx$.

A figura B.2 representa graficamente esta técnica. Na primeira tentativa, o número r_1 não foi aceito, pois não satisfaz a condição (B.6), mas na segunda tentativa, esta condição foi satisfeita. A técnica combinada pode ser aplicada em funções não contínuas, ou funções que são definidas em intervalos não-conectados.