



FIS 42 42

UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE
FACULDADE DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TRABALHO DE LICENCIATURA

**Investigação da Piezoresistência Causada Pela
Redistribuição de Electrões entre L_1 e Δ_1 Mínimos do
Germânio**

AUTOR:

FÉLIX FERNANDO TOMO

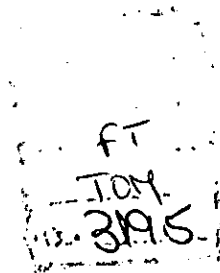
MAPUTO, JULHO DE 1998



UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE
FACULDADE DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TRABALHO DE LICENCIATURA

**Investigação da Piezoresistência Causada Pela
Redistribuição de Electrões entre L_1 e Δ_1 Mínimos do
Germânio**



SUPERVISOR:

PROF. DOUTOR VLADIMIR TCHERNYCH

MAPUTO, JULHO DE 1998

`A memória de Fernando "Rhoda" Tomo, o saudoso pai,
`a dona Virgínia Armando, a mãe,
e aos meus irmãos Lacerda, Elizabeth e outros.

(... quem não vive para servir, não serve para viver...)

Agradecimentos

Este trabalho é também resultado do apoio que me foi prestado, por aqueles que acreditaram na minha formação. Pelo que agradeço:

* Ao Prof. Doutor Tchernych V., meu supervisor, pelo incansável apoio, pelos inestimáveis pontos de vista e pela elevada paciência que teve ao longo da realização deste trabalho.

* A direcção do Departamento de Física, nas pessoas do dr. Hermínio Tembe e da dr^a Mayra Hernandez de Sousa, pela elevada flexibilidade no desbloqueamento de todos aspectos burocráticos.

* A todos os meus docentes ao longo dos cinco anos da minha formação, particularmente ao Prof. Doutor Burdeynyi V.M., ao Prof. Doutor Yuri Rakov, ao Prof. Doutor Rogério Utui, ao Prof. Doutor Boaventura Cuamba, pelas suas maneiras simples e coerentes de estar na ciência e por serem a minha fonte de inspiração.

* Aos meus colegas do curso, especialmente ao João Lobo, Alberto Macamo, Humberto Mutevuie e Ana Costa, pelo inestimável apoio que me prestaram ao longo do curso.

* Ao dr. Genito, pelos valiosos pontos de vista e opiniões que me concedeu ao longo destes anos.

* A todo o pessoal do Capacity Building Project (CBP), em particular ao senhor Luis de Carvalho, pela possibilidade de divulgação e da publicação dos resultados obtidos na conferência do SAIP-98.

* Aos meus primos, Gabriel Traveira, Rui Alige, Marcelino Portado, Francisco Bomba e Inácio Falso, pelo apoio moral e material que me concederam ao longo do curso.

* Aos meus sobrinhos Cremildo, Gina, Suraia, Hélio, Euclides, Hermenegildo e Ívan, pelo encorajamento que me davam.

* Aos membros do CTA do Departamento de Física, em particular ao sr. Santos Luis Victorino, sr. Simões Mabuluco, sr. Levi Salomão, sr. Jorge, dona Rosa Nhambe e dona Etelvina, pelo apoio inestimável que me deram ao longo do curso.

* Ao meu cunhado Benjamim dos Santos Niquice, pelo apoio multiforme que me concedeu ao longo do curso.

* Aos meus amigos Sérgio Obra, Sérgio Roberto, Lorino Rodrigues, Luis, Caldino Z. Damas Jr., pela ajuda desinteressada que sempre me concederam.

DECLARAÇÃO DE HONRA

Este trabalho foi completamente realizado com base no material, a que ao longo do mesmo se faz referência. As ideias originais nele expressas, são de inteira responsabilidade do autor.

Maputo, Julho de 1998

O autor

Félix Fernando Tomo

(Félix Fernando Tomo)

RESUMO

O objectivo do presente trabalho é investigar o fenómeno da piezoresistência nos monocristais do n-Ge, na presença da deformação elástica uniaxial (DEU) ao longo do eixo cristalográfico do tipo [001].

Foi feita uma investigação bibliográfica, que permitiu esclarecer as principais causas do surgimento da piezoresistência nos monocristais dos semicondutores clássicos, com muitos mínimos na superfície de energia constante, métodos da medição da piezoresistência e aplicação prática deste efeito.

Diferencia-se a piezoresistência de Herring-Smith com a causada pela DEU ao longo do eixo [001].

Efectuam-se cálculos que permitem analisar com detalhes a cinética do deslocamento dos mínimos da energia na presença da DEU e investigar a inversão $L_1 \leftrightarrow \Delta_1$ mínimos.

Foram obtidas expressões analíticas para o cálculo dos números de preenchimento, que descrevem a redistribuição dos electrões entre os diferentes grupos de mínimos de energia em função da pressão e da temperatura.

Usa-se a teoria do espalhamento anisotrópico, que permitiu obter e analisar numericamente expressões para o tensor da condutibilidade eléctrica e o tensor da resistividade eléctrica dos monocristais do n-Ge na presença da DEU, tomando em conta L_1 e Δ_1 mínimos.

Os resultados dos cálculos numéricos da resistividade eléctrica, tendo em conta que os electrões espalham-se só por fonões acústicos, estão em boa concordância qualitativa com os dados experimentais.

ÍNDICE.

I.	INTRODUÇÃO	3
II.	INFLUÊNCIA DA DEFORMAÇÃO ELÁSTICA NA ESTRUTURA ENERGÉTICA DO N-GE. PIEZORESISTÊNCIA	5
	1. CONCEITOS PRINCIPAIS DA TEORIA DA ELASTICIDADE	5
	2. EFEITO DA PIEZORESISTÊNCIA	7
	3. PIEZORESISTÊNCIA DUM SEMICONDUTOR NAS CONDIÇÕES DA COMPRESSÃO VOLUMÉTRICA	9
	4. PROPRIEDADES FÍSICAS DO GERMÂNIO SUJEITO À ACÇÃO DA DEFORMAÇÃO VOLUMÉTRICA	11
	5. INFLUÊNCIA DA DEFORMAÇÃO ELÁSTICA UNIAXIAL NAS PROPRIEDADES FÍSICAS DO N-GE	14
	6. ESCOLHA E DISCUSSÃO DO MODELO TEÓRICO	20
III.	FUNÇÕES DE DISTRIBUIÇÃO, CONCENTRAÇÃO DOS ELECTRÕES NOS MÍNIMOS DE ENERGIA E SUA VARIAÇÃO NA PRESENÇA DA DEFORMAÇÃO ELÁSTICA UNIAXIAL (DEU)	22
	FUNÇÕES DE DISTRIBUIÇÃO, POTENCIAL QUÍMICO E NÚMERO DE ELECTRÕES NOS MÍNIMOS DE ENERGIA NA PRESENÇA DA DEU	22
	A) EXPRESSÕES GERAIS	22
	a1) Funções de distribuição	22
	a2) Número de electrões nos mínimos de energia	23
	a3) Potencial químico	24
	B) CASOS PARTICULARES	27
IV.	CÁLCULO DOS POTENCIAIS DE DEFORMAÇÃO	28
	A) MATRIZES DA TRANSFORMAÇÃO (REFERENCIAL ELIPSOIDAL ↔ REFERENCIAL CRISTALOGRÁFICO)	29
	B) TRANSFORMAÇÃO DO TENSOR DOS MÓDULOS ELÁSTICOS	31
	C) CÁLCULO DO TENSOR DA DEFORMAÇÃO	34
	D) POTENCIAIS DE DEFORMAÇÃO DOS MÍNIMOS NÃO EQUIVALENTES	36
V.	NÚMEROS DE PREENCHIMENTO E SUA DEPENDÊNCIA DA DEU	37
	CASOS PARTICULARES	38
VI.	CINÉTICA DO DESLOCAMENTO DOS MÍNIMOS L_1 E Δ_1 , COM A PRESSÃO UNIAXIAL (P// [001])	41
VII.	TENSOR DA CONDUTIBILIDADE ELÉCTRICA	43
VIII.	TENSOR DA RESISTIVIDADE ELÉCTRICA	52
IX.	CONCLUSÃO	53
X.	RECOMENDAÇÕES	54
XI.	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	55

I. Introdução

A investigação dos fenómenos de transporte da carga nos corpos sólidos tem desempenhado um papel extremamente importante tanto devido à aplicação prática, bem como devido à obtenção de novos conhecimentos sobre o espectro energético dos portadores de carga e a sua interacção com outras quasipartículas [1,2,7-9].

Durante as últimas décadas estas investigações adquiriram novos horizontes devido a ampla utilização dos materiais semicondutores na microelectrónica e com fins da transformação directa da energia dissipada em energia eléctrica [10-12].

Foram construídos geradores e frigoríficos termoeléctricos, geradores fotovoltaicos e fotoeléctricos, que encontraram grande aplicação, com particular relevo, em países com elevado nível de radiação solar.

Em Moçambique, é possível utilizar plenamente estes métodos de obtenção de energia eléctrica. Dados disponíveis indicam, que já funcionam em muitos lugares do nosso país, dispositivos à base da energia solar.

Entretanto, o uso destes métodos é na prática limitado pelo baixo rendimento de transformação bem como outras limitações tecnológicas. Por isso, a busca e a investigação de materiais com novas propriedades (incluindo o maior rendimento de transformação de energia) reveste-se de grande importância [11,12,19,20].

Factos testemunham, que os dispositivos semicondutores, funcionam frequentemente na presença do campo magnético e das deformações externas, o que leva à necessidade do estudo do comportamento dos efeitos cinéticos (isto é, a resistividade, a condutibilidade, o coeficiente da força termoelectromotriz e a condutividade térmica) nas condições mencionadas acima [10-12,19].

A investigação da resistividade dos semicondutores na presença da deformação elástica uniaxial (DEU), bem como a investigação de outros efeitos cinéticos, permite criar os tensosensores. Tensosensores semicondutores utilizam-se em vez dos habituais tensosensores feitos de fios condutores quando é necessário obter sensibilidade muito alta. Tensosensores semicondutores aplicam-se na qualidade de elementos transdutores para as medições das pressões, torques, deslocamentos ; na biologia e na medicina para fins de investigação de processos biológicos e fisiológicos com a transferência da informação para distâncias significativas (por exemplo, caracter intercardial, dedicado à medição da pressão sanguínea intercardial) [14-19,20-27].

A ampla utilização do n-Ge na construção de dispositivos microelectrónicos e o seu uso como material modelo (pois muitas características electrofísicas são bem conhecidas), determinou a escolha dele como objecto da investigação.

A deformação elástica uniaxial (DEU) dos semicondutores com muitos mínimos de energia constante na banda de condução (como por exemplo, para o n-Ge e o n-Si), realizada ao longo das direcções assimétricas em relação aos mínimos de energia, leva `a redistribuição dos portadores de carga (os electrões) entre os mínimos de energia, sob a concentração total dos portadores constante. Como se sabe, os mínimos de energia no caso de n-Ge e n-Si são elipsóides de revolução, que doravante os denominaremos simplesmente por elipsóides. Sendo as massas efectivas dos electrões e suas mobilidades, grandezas anisotrópicas, isto leva `a alteração apreciável dos efeitos cinéticos quantitativa e qualitativamente, comparando com os mesmos efeitos, na ausência da deformação. Por exemplo, sendo a mobilidade dos electrões uma grandeza escalar na ausência da DEU nos cristais em análise (devido à simetria cúbica do n-Ge e do n-Si), estará o tensor da segunda ordem no caso da presença da DEU ao longo dos eixos assimétricos em relação aos mínimos de energia (isto é, os eixos considerados [111] e [110] para o n-Ge e [100] e [110] para o n-Si). Este facto condiciona, por seu turno, a variação nos caracteres da dependência angular, ao campo e à concentração dos efeitos cinéticos [1-7].

Tomando em conta, as grandes variações destes fenómenos, isto é de interesse prático e científico.

A investigação da piezoresistência do n-Ge foi feita pela primeira vez por C. Herring [3] e explicada teoricamente por Smith [4] , na base da redistribuição de electrões nos mínimos da energia situados ao longo dos eixos cristalográficos do tipo [111] (situados nos pontos L_1 da zona de Brillouin) e por isso este mecanismo da piezoresistência adquiriu o nome de Herring-Smith.

Já nos fins dos anos 50 foi conhecido, que a deformação elástica uniaxial (DEU) dos cristais de n-Ge ao longo dos eixos cristalográficos do tipo [001] não leva `a variação da resistência, pois, neste caso o eixo da deformação é simétrico em relação aos mínimos do tipo L_1 da energia e todos os quatro mínimos se deslocam de mesmo modo em relação a escala de energia.

Entretanto, o aperfeiçoamento da técnica experimental e a possibilidade tecnológica da criação dos monocristais com alto grau de perfeição e também exigências da indústria microelectrónica permitiram começar as investigações dos materiais (incluindo os semicondutores) em condições externas extremas (isto é, sob grandes deformações elásticas e inelásticas, campos electromagnéticos fortes e temperaturas extremamente baixas ou altas).

Neste caminho, foi descoberta pela primeira vez experimentalmente a existência da piezoresistência dos monocristais do n-Ge quando a DEU é aplicada ao longo do eixo

crystalográfico do tipo [001], que é, evidentemente, diferente da observada e explicada por Herring-Smith. Os autores do artigo: [27], lançaram hipótese bem fundamentada experimentalmente, que o surgimento deste fenómeno é ligado com a redistribuição dos portadores de carga (sob o número total deles constante) entre os L_1 e Δ_1 mínimos na zona de Brillouin do germânio ou como se diz habitualmente entre os mínimos "germânicos" e "silícicos", pois os Δ_1 mínimos na zona de Brillouin do Ge estão situados nos pontos, onde se colocam mínimos mais baixos (na escala de energia em n-Si). As investigações posteriores independentes, comprovaram esta hipótese [29].

Contudo, segundo a nossa investigação bibliográfica, até agora não está desenvolvida a teoria deste fenómeno na base dos "primeiros princípios", que possa explicar os resultados experimentais e permita assentar os detalhes do espectro energético dos portadores de carga e os possíveis mecanismos do seu espalhamento.

No presente trabalho, debruçámo-nos essencialmente ao estudo e a análise da influência da deformação elástica uniaxial (DEU), na referida redistribuição dos portadores de carga entre os L_1 e Δ_1 mínimos de energia e aplicação posterior dos resultados obtidos na explicação dos factos experimentais [28] da piezoresistência no n-Ge, quando a força deformável é paralela ao eixo crystalográfico [001].

II. Influência da deformação elástica na estrutura energética do n-Ge. Piezoresistência.

1. Conceitos principais da teoria da elasticidade.

A deformação dum cristal descreve-se pelo tensor simétrico da deformação, que se representa pela relação seguinte [19,32]:

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) = \varepsilon_{ki} \quad , \quad (\text{II. 1})$$

onde $\vec{u} = \vec{r}' - \vec{r}$ é o vector da deformação ou vector do deslocamento e, \vec{r}' e \vec{r} são raios vectores dum ponto no cristal deformável e não deformável respectivamente.

O tensor da deformação nos eixos principais tem a forma diagonal seguinte :

$$\varepsilon_{ik} = \varepsilon^{(i)} \delta_{ik} \equiv u^{(i)} \delta_{ik} \quad (\text{II. 2})$$

e determina a variação da distância entre os pontos sob a deformação.

Usando o tensor da deformação ϵ_{ik} a distância entre dois pontos num cristal não deformável (dl) e o deformável (dl') será

$$dl'^2 = dl^2 + 2 \sum_{i,k} \epsilon_{ik} dx_i dx_k \quad (II.3)$$

Se o tensor da deformação for diagonal, então

$$dl'^2 - dl^2 = 2 \sum_{i,k} \epsilon^{(i)} \delta_{ik} dx_i dx_k = 2 \sum_i \epsilon^{(i)} dx_i^2 \quad (II.4)$$

Da fórmula (II.3) segue que ,

$$dl' = \sqrt{dl^2 + 2 \sum_{i,k} \epsilon_{ik} dx_i dx_k} = dl \sqrt{1 + 2 \sum_{i,k} \epsilon_{ik} n_i n_k} \quad (II.5)$$

onde $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ determina a direcção da deformação.

Variação relativa do comprimento na direcção $\vec{n}(n_1, n_2, n_3)$ pode ser expressa através do tensor da deformação, de acordo com a relação abaixo:

$$\epsilon = \frac{dl' - dl}{dl} = \sqrt{1 + 2 \sum_{i,k} \epsilon_{ik} n_i n_k} - 1 \approx \sum_{i,k} \epsilon_{ik} n_i n_k \quad (II.6)$$

Na base da relação (II.6) pode-se concluir, que a variação do volume do cristal sob a deformação é:

$$d\tau' = d\tau (1 + \epsilon^{(1)} + \epsilon^{(2)} + \epsilon^{(3)}), \quad (II.7)$$

e, a variação relativa respectiva será:

$$\frac{d\tau' - d\tau}{d\tau} = \Delta V = \sum_i \epsilon^{(i)} = \sum_i \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \text{div} \vec{u} \quad (II.8)$$

Portanto, os valores principais do tensor da deformação determinam o aumento relativo do comprimento do cristal ao longo dos eixos principais do tensor da deformação e a soma deles determina a variação relativa do volume.

O tensor da deformação ϵ_{ik} pode ser apresentado noutra forma. Para isso, escreveremos a identidade seguinte:

$$\epsilon_{ik} = \left[\epsilon_{ik} - \left(\frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \epsilon_{ii} \right) \delta_{ik} \right] + \left(\frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \epsilon_{ii} \right) \delta_{ik} \quad (II.9)$$

O segundo tensor da relação (II.9), que é igual a um terço da variação relativa do volume do cristal ΔV , chama-se o tensor da compressão volumétrica (ou compressão hidrostática). O tensor entre parênteses é denominado como o tensor do deslocamento. Sendo a soma dos elementos

diagonais para o tensor do deslocamento igual a zero, então, sob o deslocamento é ausente a variação do volume.

A força \vec{F} que actua para o volume unitário dum corpo pode ser expressa através do tensor das tensões U , tal que:

$$\vec{F} = \text{div}U, \quad (\text{II.10})$$

ou

$$F_i = \sum_k \frac{\partial u_{ik}}{\partial x_k}. \quad (\text{II.11})$$

No caso das deformações elásticas, entre a deformação e a tensão existe uma ligação linear, que se determina pela lei de Hooke. A grandeza, que liga a deformação com a tensão, chama-se módulo da elasticidade, e é tensor da quarta ordem,

$$U_{ik} = \sum_{l,m} C_{iklm} \epsilon_{lm}, \quad (\text{II.12})$$

sendo o tensor dos módulos de elasticidade C_{iklm} simétrico em relação aos pares dos seus índices (isto é, $C_{iklm} = C_{kilm} = C_{ikml} = C_{lmik}$), pois ele liga entre si os dois tensores simétricos. Devido a esta simetria, dos 81 elementos, que determinam este tensor, podem ser independentes apenas 21. Tomando em conta a simetria dum cristal, o número dos componentes independentes é ainda menor. Nos cristais com simetria cúbica existem só 3 componentes independentes, que se designam habitualmente como [19,34]:

$$C_{1111} \equiv C_{xxxx} \equiv C_{11}; \quad C_{1122} \equiv C_{xyxy} \equiv C_{12}; \quad C_{1212} \equiv C_{xyxy} \equiv C_{44}$$

Os corpos isotrópicos caracterizam-se só por dois módulos elásticos, que são: o módulo do deslocamento e o módulo da compressão volumétrica (ou compressividade).

2. Efeito da Piezoresistência.

O efeito da piezoresistência é a variação da resistência eléctrica dum semiconductor sob acção da força externa, que cria a deformação num cristal. O efeito da piezoresistência foi considerado em [1-4,7,30-32]. Para cristais de simetria arbitrária, no caso geral a lei de Ohm pode ser escrita através do tensor da resistividade na forma seguinte:

$$E_i = \sum_k \rho_{ik} j_k \quad (\text{II.13})$$

A variação relativa da resistividade no cristal deformável pode ser apresentada como se segue:

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_{ik} = \sum_{l,m} \Pi_{iklm} U_{lm} \quad , \quad (\text{II.14})$$

onde Π_{iklm} é o tensor da piezoresistência da quarta ordem e U_{lm} é o tensor da tensão da segunda ordem.

O tensor da resistividade ρ_{ik} é simétrico ($\rho_{ik} = \rho_{ki}$, segundo a relação de Onsager) e não tem mais do que 6 componentes diferentes, que podem ser considerados como componentes do vector de seis dimensões ρ_i , em que $i=1,2,3,4,5,6$. O mesmo pode-se dizer sobre o tensor das tensões U_{lm} . Usando as designações de Voigt [34], isto é, 11→1; 22→2; 33→3; 23,32→4; 31,13→5 e 12,21→6, a fórmula (II.14) pode ser escrita na forma seguinte:

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_i = \sum_{k=1}^6 \Pi_{ik} U_k \quad . \quad (\text{II.15})$$

Usando o facto, que o tensor das tensões $U_{lm} = U_i$, através dos módulos elásticos C_{ik} é ligado com o tensor da deformação $\left(U_i = \sum_k C_{ik} \varepsilon_k\right)$, na expressão (II.15) pode-se chegar ao tensor da deformação

$$m_{ik} = \sum_l \Pi_{il} C_{lk} \quad , \quad (\text{II.16})$$

onde ,

$$\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)_i = \sum_{k=1}^6 \Pi_{ik} U_k = \sum_{k=1}^6 m_{ik} \varepsilon_k \quad . \quad (\text{II.17})$$

Π_{ik} e m_{ik} são coeficientes da piezoresistência e elasto-resistência respectivamente. Cada um destes coeficientes formam as matrizes de seis dimensões.

No caso das rotações dos eixos das coordenadas os vectores de seis componentes ρ_i , U_i , ε_i transformam-se de acordo com a fórmula seguinte:

$$\rho'_i = \sum_{k=1}^6 \alpha_{ik} \rho_k \quad , \quad (\text{II.18})$$

onde α_{ik} é a matriz de seis dimensões, cujos elementos são os produtos dos co-senos directores entre os eixos do referencial inicial e do virado.

Os tensores Π_{ik} e m_{ik} transformam-se da maneira seguinte:

$$\Pi'_{ik} = \sum_{l,m} \alpha_{il} \Pi_{lm} \alpha_{im}^{-1} \quad . \quad (\text{II.19})$$

Consequentemente, no caso concreto do cristal do tipo diamante, o tensor Π_{ik} transforma-se no referencial rectangular com os eixos [100], [010], [001] na forma seguinte:

$$\Pi_{ik} = \begin{pmatrix} \Pi_{11} & \Pi_{12} & \Pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \Pi_{12} & \Pi_{11} & \Pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \Pi_{12} & \Pi_{12} & \Pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} \end{pmatrix}, \quad (\text{II.20})$$

isto é, os componentes independentes do tensor Π_{ik} no caso dos cristais do tipo diamante são Π_{11} , Π_{12} e Π_{44} .

Notemos também, que com ajuda da transformação (II.18), o tensor da resistividade ρ_{ik} reduz-se ao escalar, pois, neste caso $\rho_{11} = \rho_{22} = \rho_{33} = \rho_0$, $\rho_{12} = \rho_{13} = \rho_{23} = 0$.

3. Piezoresistência dum semiconductor nas condições da compressão volumétrica.

Os tipos principais da deformação elástica dos sólidos no caso da consideração do efeito da piezoresistência, é cómodo subdividir em duas classes conforme o facto de que esta deformação muda ou não a simetria da rede cristalina [1,3-4,30,31].

Compressão ou extensão volumétrica (ou isotrópica) não pode mudar a simetria da rede cristalina e, conseqüentemente, uma componente da resistência que é nula por razões da simetria num cristal não deformável, continuará a ser nula no caso da aplicação da deformação isotrópica.

No caso da compressão volumétrica o tensor ε_{ii} transforma-se no escalar ε e a constante da rede diminui neste caso $a' = a(1 - \varepsilon)$.

A diminuição das distâncias interatómicas leva ao aumento do recobrimento das funções de onda, o que provoca a variação da energia potencial $W(a)$ da interacção atómica. Supondo que $W_{\min}(a) = W(a_0)$, então o valor W deve crescer tanto sob a compressão do cristal ($a < a_0$) como sob a extensão dele ($a > a_0$), o que por seu turno deve provocar a variação das espessuras das bandas proibidas e permitidas da energia.

Se através de α se designar o coeficiente da variação relativa da espessura $\Delta\varepsilon_0$, isto é,

$$\alpha = -\frac{1}{\Delta\varepsilon_0} \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial p}, \quad (\text{II.21})$$

$$\text{então, } \Delta\varepsilon(P) = \Delta\varepsilon_0(1 - \alpha P) \quad (\text{II.22})$$

A variação da espessura da banda proibida aparece devido ao facto de os deslocamentos do fundo da banda de condução ε_c e do topo da banda de valência ε_v no caso geral serem diferentes.

Para deformações pequenas tem-se :

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_c(\varepsilon) &= \varepsilon_c(0) + \Delta_c \varepsilon \\ \varepsilon_v(\varepsilon) &= \varepsilon_v(0) + \Delta_v \varepsilon \\ \Delta\varepsilon(\varepsilon) &= \varepsilon_c(\varepsilon) - \varepsilon_v(\varepsilon) = \Delta\varepsilon(0) + (\Delta_c - \Delta_v)\varepsilon \end{aligned} \right\}, \quad (\text{II.23})$$

onde Δ_c e Δ_v são potenciais da deformação nas respectivas bandas do cristal.

Por isso na região da condutibilidade intrínseca,

$$np = n_i^2 = N_s N_c \exp\left[-\frac{\Delta\varepsilon(\varepsilon)}{KT}\right] = n_i^2(0) \exp\left[-\frac{(\Delta_c - \Delta_v)}{KT} \varepsilon\right] \approx n_i^2(0) \left(1 - \frac{\Delta_c - \Delta_v}{KT} \varepsilon + \dots\right).$$

Sob $n=p$,

$$\frac{\delta n_i}{n_i} = \frac{\Delta_v - \Delta_c}{2KT} \varepsilon = \frac{\delta n}{n(0)} = \frac{\delta p}{p(0)}$$

A compressão volumétrica, no caso geral, entra como parte integrante para deformação arbitrária, a menos do deslocamento puro, então a variação da concentração dos portadores de carga deve ser observada em todos os casos.

Na região da condutibilidade extrínseca (a par de impurezas), entretanto, a compressão volumétrica pode mudar a concentração total só ao valor $2\delta n$, o que praticamente não pode mudar o valor total da condutibilidade eléctrica.

A compressão volumétrica (causada pela pressão hidrostática) na maioria dos casos provoca o acréscimo da resistência, o que na 1ª aproximação se determina por duas razões : o acréscimo da espessura da banda proibida e o aumento da massa eficaz m^* com a pressão.

Neste caso concreto o tensor da tensão $U_{lm} = P \cdot I$, onde P é a pressão em $\text{Kgf} \cdot \text{cm}^{-2}$, I é o tensor unidade.

A variação da condutibilidade eléctrica dum semiconductor sob pressão na região da condutibilidade extrínseca pode ser apresentada como:

$$\frac{d\sigma}{dp} = eU_n \frac{dU}{dp} + en \frac{dU_n}{dp} = eU_n \frac{dn}{dp} + e^2 n \left(\frac{d\tau}{dp} \cdot \frac{1}{m^*} - \tau \cdot \frac{1}{m^{*2}} \cdot \frac{dm^*}{dp} \right),$$

isto é, σ nesta região da condutibilidade varia com a pressão hidrostática a custa de :

1) Variação da concentração de electrões, o que pode acontecer devido a variação da posição dos níveis de impurezas (na escala de energia) ou devido a variação da espessura da banda proibida com a pressão;

2) Variação do tempo de relaxação em função da pressão, o que pode surgir, por exemplo, como devido a variação do espectro dos fonões, tanto devido a variação possível do espectro de electrões.

3) Variação da massa eficaz dos portadores de carga.

4. Propriedades físicas do germânio sujeito à acção da deformação volumétrica.

A variação das distâncias interatómicas deve reflectir-se seriamente na espessura da banda proibida. Os dados sobre a variação da espessura da banda proibida $\Delta\epsilon$ nos cristais em função da pressão e da temperatura estão representados na tabela 1.

Tabela 1: Variação da espessura da banda proibida $\Delta\epsilon$ em Ge em função da pressão e da temperatura

$d\Delta\epsilon/dP$, eV.Kgf ⁻¹ .cm ²	$d\Delta\epsilon/dT$, eV.°C ⁻¹	Temperatura	Pressão, atm	Método da Determinação	Literatura
	- 0,87·10 ⁻⁴	300 °C	1	Variação de ρ	[35]
	- 0,9·10 ⁻⁴			Cálc. Teórico	[36]
5,5·10 ⁻⁶		23,72°C;77K	1-30000	Variação de ρ	[37]
(8,9±0,5)·10 ⁻⁶			1-8000	Deslocamento do extremo da abs. óptica	[38]
5,5·10 ⁻⁶		23,42,60,76°C	1-30000	Variação de ρ	[39]

Tendo em conta a estrutura real das bandas do Ge (fig. 1), o deslocamento dos mínimos (111), (100) e (000) da banda de condução relativamente o máximo da banda de valência (que se considera imóvel) com o aumento do valor da compressão volumétrica pode ser apresentado segundo [40] por fig.2. O mínimo (000) está situado (na escala de energia) mais alto do que o mínimo (111) aproximadamente a $0,14 \div 0,15$ eV. Por isso, sob a pressão atmosférica neste mínimo há muito poucos electrões. Há que salientar, que com aumento da pressão a concentração dos portadores de carga no mínimo (000) só pode decrescer.

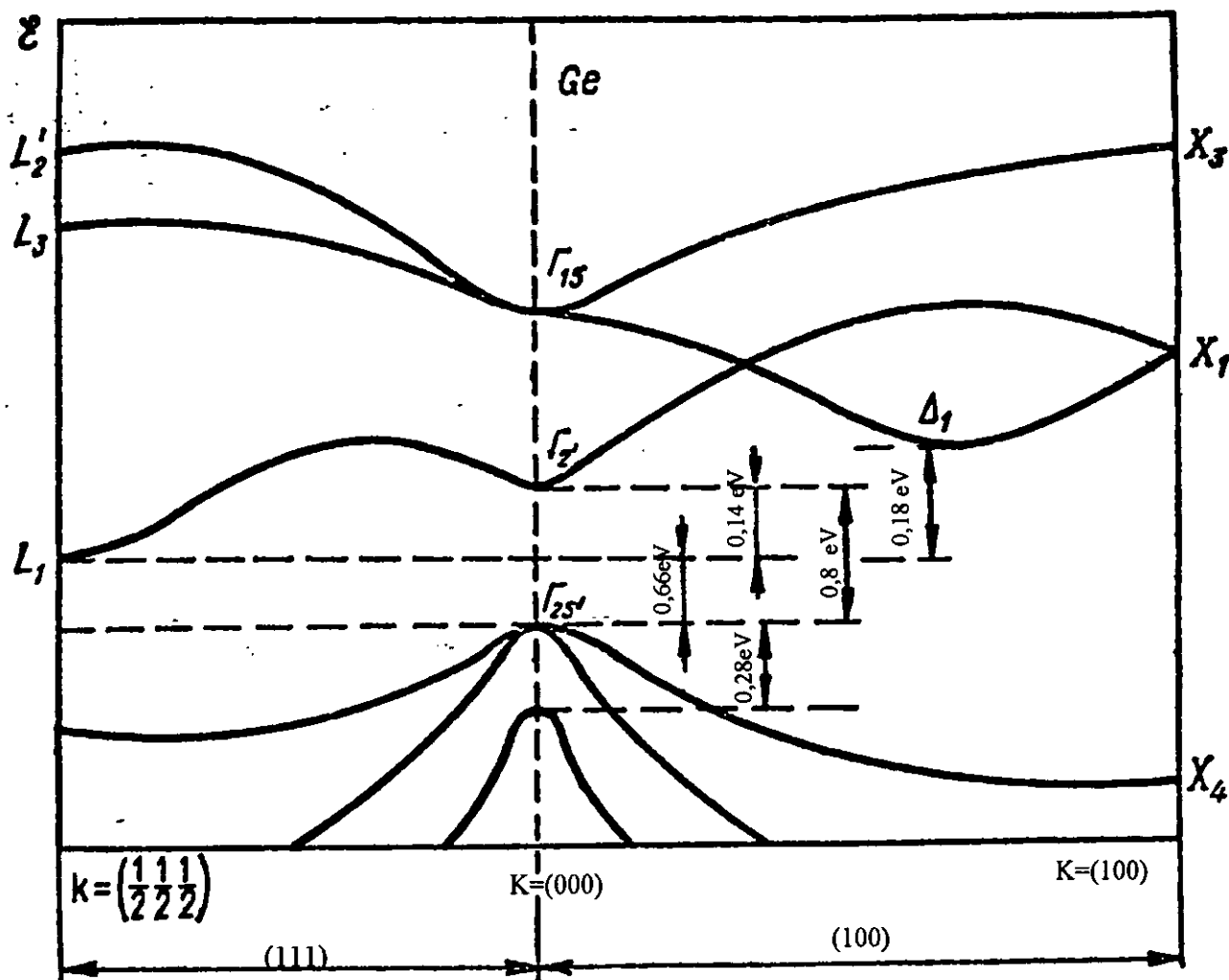


Fig.1: Estrutura energética do germânio (Ge).

Com o aumento da pressão o mínimo (100) diferentemente do mínimo (000), energeticamente se aproxima ao mínimo (111) e no intervalo das pressões $P \approx 25000 \div 30000$ Kgf-cm⁻² a posição deles torna-se energeticamente equivalente. A variação de σ na região da condutibilidade extrínseca com a variação de P pode determinar-se só pela variação da concentração ou da mobilidade dos

portadores de carga no mínimo (111). Sendo no intervalo das temperaturas não muito baixas sob as pressões até $100000 \text{ Kgf}\cdot\text{cm}^{-2}$: os centros doadores com a energia de ionização $\Delta\epsilon_i \approx 0,01 \text{ eV}$ são completamente ionizados (Tabela 2), então a variação de σ no intervalo $P < 10000 \text{ Kgf}\cdot\text{cm}^{-2}$ pode ser ligada só com a variação da mobilidade que surge devido à variação da massa eficaz dos portadores de carga e outros parâmetros do cristal.

Tabela 2: Variação dos parâmetros do Ge sob compressão volumétrica elástica

Parâmetro	Varição	Literatura
Banda proibida, banda de valência – (111) mínimo	$+ 5 \cdot 10^{-6} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{Kgf}^{-1}$	[37]
Banda proibida, banda de valência – (100) mínimo	$- 2 \cdot 10^{-6} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{Kgf}^{-1}$	[41]
Banda proibida, banda de valência – (000) mínimo	$+ 1,3 \cdot 10^{-5} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{Kgf}^{-1}$	[42]
	$+ 0,94 \cdot 10^{-5} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{Kgf}^{-1}$	[43]
	$+ 1,00 \cdot 10^{-5} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{Kgf}^{-1}$	[44,45]
Desdobramento spin – orbital na banda de valência	0	[40]
Energia de ionização dos doadores do V grupo e as dos aceitadores do III grupo	$10^{-8} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2\cdot\text{Kgf}^{-1}$	[36]
Massa eficaz dos electrões e das lacunas (variação relativa)	$\approx 10^{-6} \text{ cm}^2\cdot\text{Kgf}^{-1}$	[46]
Permissividade dieléctrica (variação relativa)	$\approx 10^{-6} \text{ cm}^2\cdot\text{Kgf}^{-1}$	[1]
Módulos elásticos (variação relativa)	$\approx 10^{-6} \text{ cm}^2\cdot\text{Kgf}^{-1}$	[1]
Densidade (variação relativa)	$\approx 10^{-6} \text{ cm}^2\cdot\text{Kgf}^{-1}$	[1]

Como se vê da tabela 2 a variação dos outros parâmetros do cristal é pequena, e, portanto, a variação de σ também é pequena. A situação pode mudar significativamente sob os valores $P > 10000 + 20000 \text{ Kgf}\cdot\text{cm}^{-2}$, se:

1) Os mínimos (111) e (100) no intervalo destes valores de P, se aproximam energéticamente e, por isso os portadores de carga que o cristal possui redistribuem-se entre eles, após o que, U_{ef} se determina por um valor "médio".

2) Nas condições de aproximação energética dos mínimos (111) e (100), deve aparecer um mecanismo novo de espalhamento de electrões, ligado com a troca de electrões entre os mínimos não equivalentes. Este tipo de espalhamento chama-se o (interband ou intravalley) distinguindo-o assim do espalhamento de electrões entre mínimos equivalentes (intervalley). O espalhamento intravalley possui o máximo perto do ponto de intersecção das linhas rectas da fig.2 e deve-se diminuir se afastarmos-nos deste ponto tanto para o intervalo das pressões maiores como o intervalo das pressões menores, onde os mínimos (111) e (100) são separados significativamente.

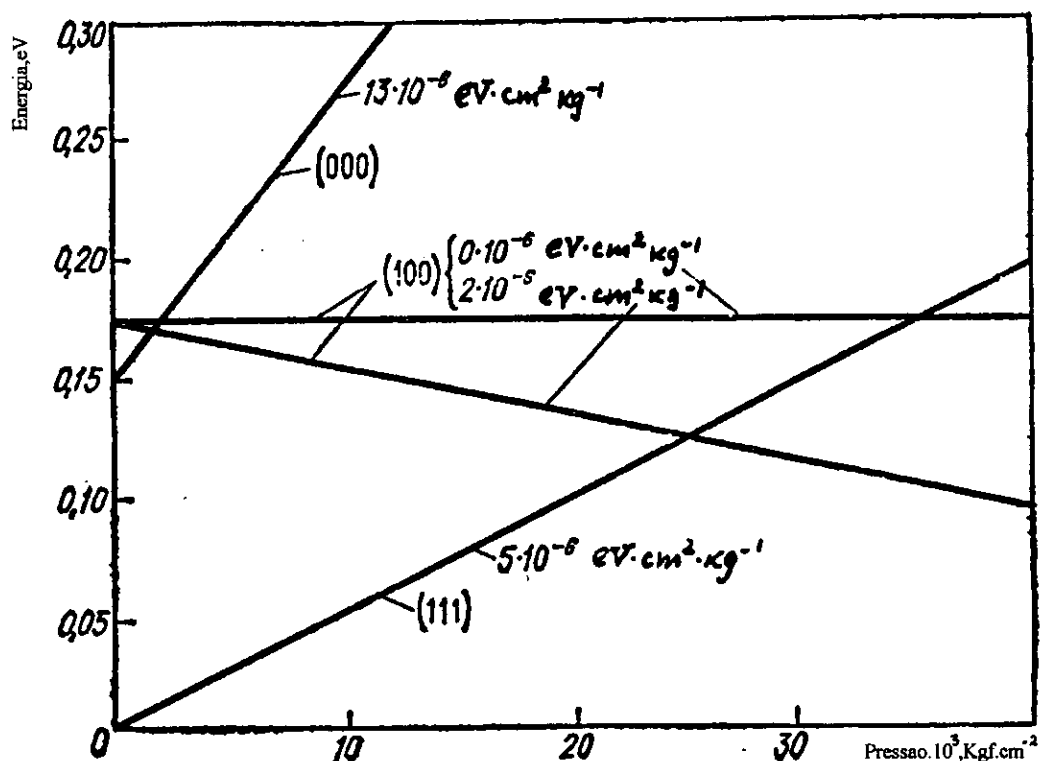


Fig.2: Deslocamento na escala de energia dos diferentes mínimos na banda de condução do Ge sob acção da pressão elástica volumétrica.

5. Influência da deformação elástica uniaxial nas propriedades físicas do n-Ge .

Como foi mostrado em [4], nos cristais com sistemas cristalográficos cúbicos os coeficientes independentes da piezoresistência Π_{11} , Π_{12} e Π_{44} podem ser determinados sob orientações mútuas de P e I, mostrados na fig.3.

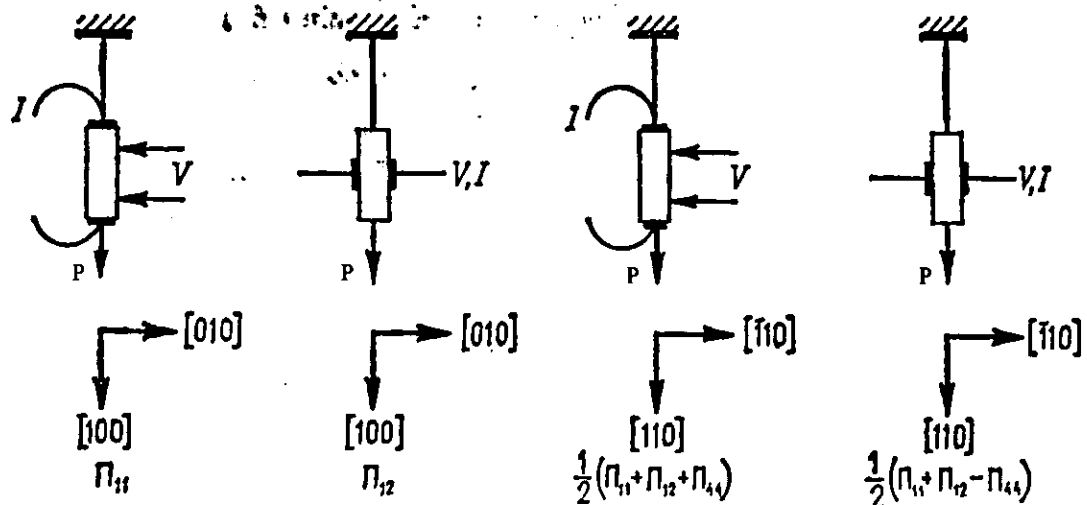


Fig.3: Orientação mútua da corrente I e da pressão P para determinar os coeficientes independentes Π_{ik} da Piezoresistência

Tabela 3. Variações nas posições dos mínimos de energia em n-Ge sob DEU [47]

Orientação		Deslocamento dos mínimos de energia em relação à posição deles sob $P=0$	Componentes da mobilidade no sentido I	
P	I			
[110]	[110]	2 para cima	$+ C_2 S_{44} P / 6$	u_{\perp}
		2 para baixo	$- C_2 S_{44} P / 6$	$(u_{\perp} + 2u_{//}) / 3$
[111]	[111]	3 para cima	$+ C_2 S_{44} P / 9$	$(8u_{\perp} + u_{//}) / 9$
		1 para baixo	$- C_2 S_{44} P / 3$	$u_{//}$
[111]	[110]	3 para cima	$+ C_2 S_{44} P / 9$	u_{\perp} (um elipsóide)
		1		$(u_{\perp} + 2u_{//}) / 3$ (dois elipsóides)
		1 para baixo	$- C_2 S_{44} P / 3$	u_{\perp}
[110]	[001]	2 para cima	$+ C_2 S_{44} P / 6$	$(u_{\perp} + 2u_{//}) / 3$
		2 para baixo	$- C_2 S_{44} P / 6$	$(u_{\perp} + 2u_{//}) / 3$

Em [5] foi mostrado pela primeira vez, que DEU provoca a desagregação em relação à energia dos mínimos equivalentes e redistribuição dos portadores de carga entre os mínimos, que surge neste caso, leva à variação de ρ (ou de σ). Os valores concretos do deslocamento dos mínimos sob DEU são mostrados na Tabela 3.

As investigações experimentais detalhadas do efeito da piezoresistência nos cristais puros de Ge e Si (n e p tipo) no intervalo vasto da temperatura foram realizadas em [48].

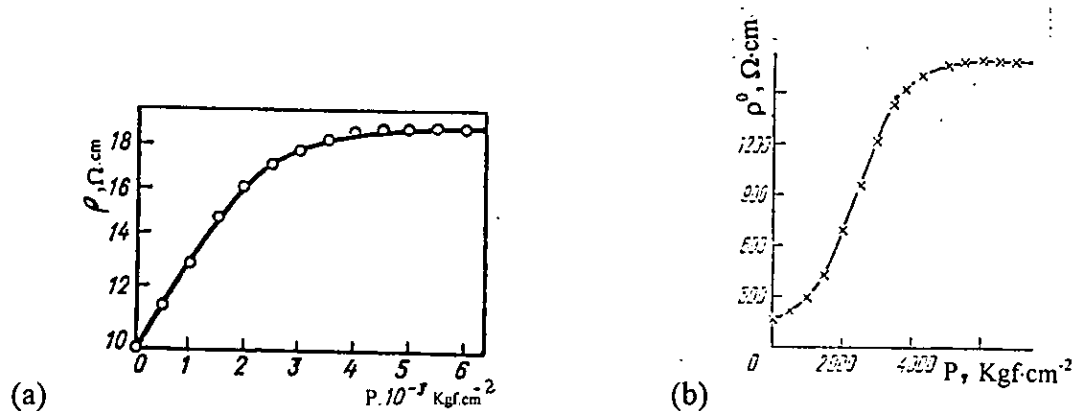


Fig.4-:(a) Resistividade dum monocristal de Ge, $\rho=f(P)$, $P//J//[110]$, $T=77K$, $n_e=1,6 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-3}$. (b) Resistividade dum monocristal de Ge, $\rho=f(P)$, $P//J//[111]$, $T=77,4K$, $n_e=1,02 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-3}$.

Um passo significativo no estudo da piezoresistência e em geral os outros piezoefeitos cinéticos foi possível fazer depois do aperfeiçoamento da técnica experimental da obtenção das tensões uniaxiais altas (até $50000 \text{Kgf} \cdot \text{cm}^{-2}$ nos últimos anos) e depois da criação dos métodos metrológicos de alta precisão a par das possibilidades tecnológicas da criação dos cristais com propriedades físicas programadas antecipadamente.

Nestas circunstâncias foram realizadas experiências minuciosas e exaustivas da medição da piezoresistência a fim de verificar as principais suposições das teorias existentes e obter informação sobre pormenores da estrutura energética dos portadores de carga e mecanismos do espalhamento deles, com objectivos práticos já referidos na introdução deste trabalho [1,2].

Para o estudo da influência da DEU na resistência do n-Ge, foram feitos cálculos do fenómeno da piezoresistência quando $P // I // [111]$, $T=77,4 \text{K}$ na base da teoria do espalhamento anisotrópico [1,2] tomando em conta o espalhamento dos electrões por fonões acústicos e iões de impurezas. Os resultados teóricos foram comparados com os dados experimentais obtidos em experiências com os monocristais do n-Ge de alta pureza ($n_e \approx N = 1,02 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-3}$, $\rho_0^0 = 153,7 \Omega \cdot \text{cm}$; $\mu_H = 37400 \text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{S}^{-1}$) realizadas sob $T=77,4 \text{K}$.

Coincidência quantitativa dos resultados teóricos e dados experimentais (fig.4) pode-se tomar como argumentação a favor das suposições teóricas, a saber: DEU pelo menos até $P \approx 7000 \text{Kgf}\cdot\text{cm}^{-2}$, influi apenas para a população dos níveis de energia diferentes em n-Ge, não mudando nem os tempos de relaxação, nem o espectro dos fonões, nem as massas eficazes dos portadores de cargas nestes cristais. Utilizaremos no futuro estes factos para fundamentar a escolha do nosso modelo.

O forte crescimento da resistividade do cristal investigado com o aumento da pressão $|P|$ está ligado com a transição dos electrões para um elipsóide orientado ao longo da direcção de deformação (veja Tabela 3), onde a massa dos electrões aumenta, pois eles movem-se ao longo da direcção que corresponde a massa eficaz $m_{//} > m_{\perp}$, (sendo a corrente eléctrica $\vec{j} // [111]$). O nível da saturação atinge-se, quando todos os electrões dos três elipsóides que sobem na escala de energia passam para um elipsóide que desce na escala de energia sob acção da DEU.

Finalizando a discussão da influência da DEU para propriedades físicas do n-Ge podemos concluir o seguinte: Segundo as noções de Herring-Smith [3-4] que relacionam a variação da resistividade dos semicondutores com muitos mínimos na superfície da energia constante na presença da DEU com a redistribuição dos electrões entre os mínimos equivalentes da banda de condução, os resultados habituais nas condições $P // \vec{j}$ são seguintes:

- 1) Forte crescimento de $\rho = f(P)$ com o aumento de P sob $P // [111]$ em n-Ge,
- 2) A saturação da dependência $\rho(P)/\rho(0) = f(P)$ nos cristais com a condutibilidade extrínseca sob intervalo energético entre os mínimos equivalentes $\delta\epsilon \geq 10kT$, o que corresponde a transição de todos os electrões para um mínimo energético.
- 3) Ausência da variação da resistividade com o aumento de P no caso da orientação simétrica do eixo da deformação em relação a orientação de todos os mínimos isoenergéticos, isto é, sob $P // [001]$ para o n-Ge.

No intervalo das tensões mecânicas $0 < P < 10000 \text{Kgf}\cdot\text{cm}^{-2}$, que é relativamente fácil obter e que habitualmente se utilizam nos trabalhos científicos de tal género, as particularidades acima referidas têm confirmado constantemente, o que se pode considerar como justificação séria do mecanismo da piezoresistência ligado com a redistribuição dos electrões entre os mínimos equivalentes da energia sob a orientação assimétrica do eixo da deformação em relação a eles.

Aumentando o limite superior do intervalo das tensões até $20000 \text{Kgf}\cdot\text{cm}^{-2}$ os autores do artigo [28] descobriram que habitual ausência sob $P // j // [100]$ da variação da piezoresistência, sucede-se ao aumento brusco da ρ com o aumento da $P > 15000 \text{Kgf}\cdot\text{cm}^{-2}$ (curva 1 da fig.5), sob as temperaturas do nitrogénio líquido.

Daí vem a conclusão, que a grande variação da resistividade do n-Ge com o aumento de P sob $P > 15000 \text{Kgf}\cdot\text{cm}^{-2}$ não está relacionada com a redistribuição dos electrões entre os mínimos equivalentes (na ausência da DEU) da banda de condução.

Tomando em conta a estrutura da banda de condução, foi lançada a suposição que a piezoresistência representada pela curva 1 da fig.5 seja ligada com a diminuição da distância na escala de energia entre quatro L_1 mínimos da banda de condução (orientados ao longo das direcções [111]) e dois (dos seis mínimos, orientados como no n-Si, ao longo das direcções [100]) Δ_1 -mínimos. Como se sabe, Δ_1 -mínimos sob $P=0$, estão situados $0,18\text{eV}$ acima dos mínimos absolutos da banda de condução e em condições de equilíbrio não contribuem para fenómenos de transporte.

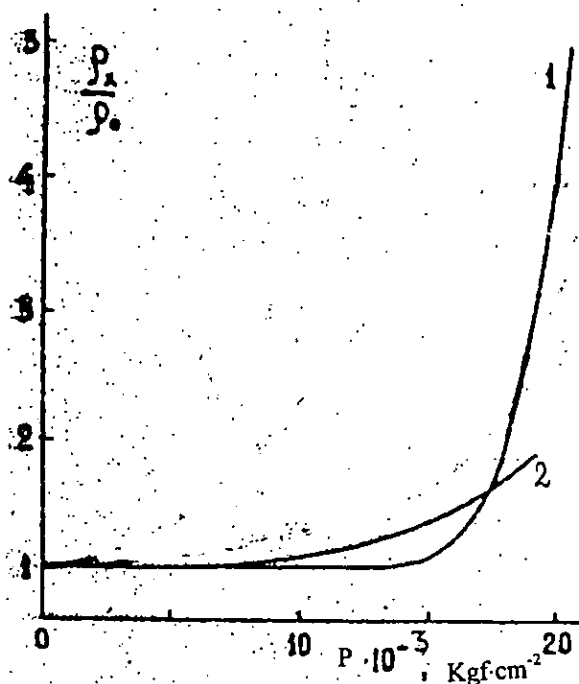


Fig.5. Variação da resistividade dum monocristal de Ge $\rho(p)/\rho(0)$, $P // j // [001]$, $T=78\text{K}$, $n_e=1,6 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-3}$.

Entretanto, se a distância entre os L_1 e os Δ_1 mínimos diminuir significativamente, será possível a transição dos electrões para os $\langle 100 \rangle$ mínimos, o que deverá provocar o surgimento do novo efeito da piezoresistência descrito pela primeira vez em [28].

Se tal suposição for válida, então pode-se esperar que no caso das temperaturas do ambiente esta piezoresistência manifestar-se-á.

Sob os valores mais baixos da tensão P , resultados experimentais confirmaram esta suposição (curva 2 da fig.5).

A convicção adicional sobre a hipótese feita, poderia ser obtida ainda aumentando o limite superior das tensões mecânicas o que permitiria não só igualar os L_1 e Δ_1 mínimos na escala da energia, mas também redistribuir os electrões dos quatro $\langle 111 \rangle$ mínimos para os dois $\langle 100 \rangle$ mínimos (inversão $\langle 111 \rangle \rightarrow \langle 100 \rangle$ mínimos). Nestas condições deveria ser observada a saturação da piezoresistência se todos electrões transitassem para os Δ_1 mínimos.

Os dados experimentais obtidos com os monocristais de n-Ge com a concentração dos electrões $n_e = 1,6 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ e sob $T = 78 \text{ K}$ comprovaram com sucesso esta hipótese (curvas 1,2 da fig.6).

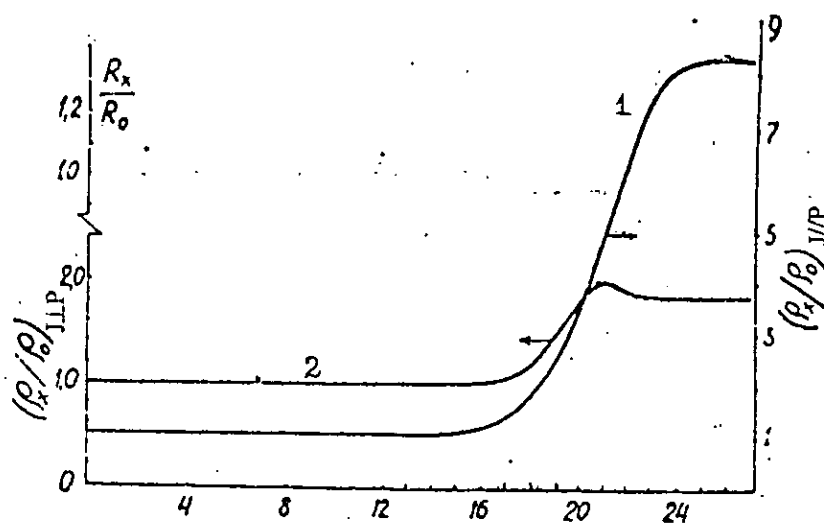


Fig.6: Variação da resistividade dum monocristal de Ge $\rho(P)/\rho(0)$, $T=78\text{K}$, $n_e=1,6 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Curva 1: $P//J//[001]$ e Curva 2: $J1P//[001]$.

É necessário sublinhar, que o mecanismo da piezoresistência de Herring-Smith foi comprovado tanto experimentalmente como teoricamente, o que permite determinar muitos parâmetros importantes da estrutura da banda, do espectro energético dos electrões e pormenores

das interacções deles com os fonões; o que contribui significativamente para a solução do problema sobre mecanismos de espalhamento dos portadores de carga.

Ausência da teoria deste fenómeno (segundo as nossas pesquisas bibliográficas), permitiu-nos tentar resolver este problema e explicar teoricamente, usando um determinado modelo, o fenómeno observado.

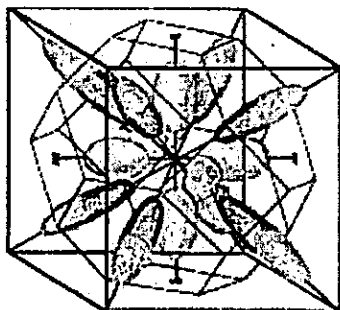
6. Escolha e discussão do modelo teórico.

Agora tentaremos justificar o modelo, que utilizaremos para os cálculos posteriores.

Em primeiro lugar, tomando os dados das tabelas 1,2 e também os resultados experimentais e teóricos [1-2,20,21,30,31], podemos supor que sob as temperaturas consideradas ($T \sim 78$ K) todos os níveis das impurezas são ionizados e, portanto, a concentração total dos portadores de carga da banda de condução é constante e não depende da tensão externa.

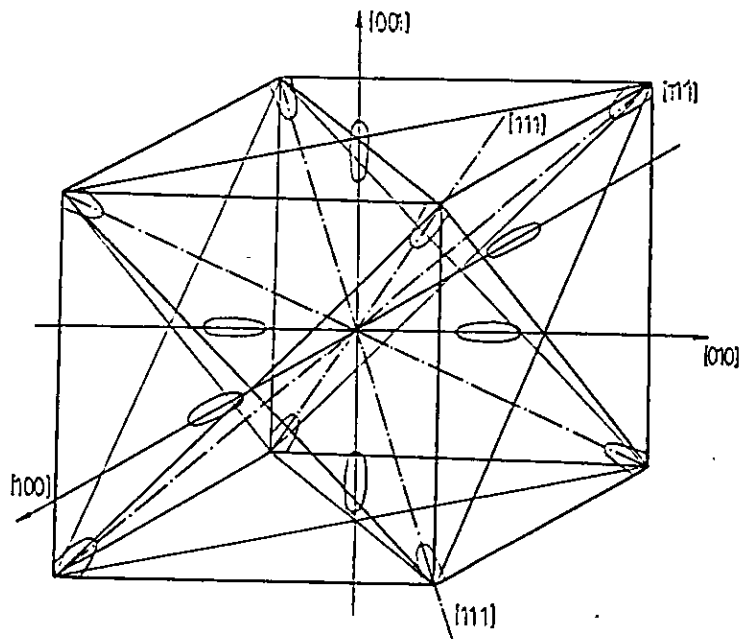
Além disso é razoável admitir, que a massa eficaz não depende da tensão, pois a variação da massa eficaz em função de P é muito pequena (Tabela.2).

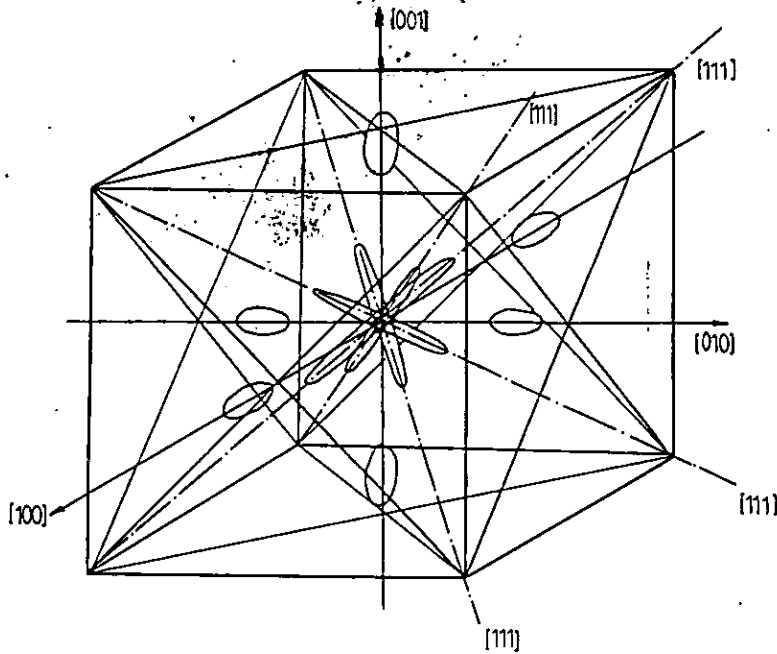
Suponhamos que neste caso também, são válidas as suposições principais da teoria do espalhamento anisotrópico [2,20], a saber, a DEU não influi para a forma do espectro de electrões num mínimo da energia, isto é, os elipsóides isoenergéticos só se deslocam na escala da energia sob acção da DEU mantendo a sua forma (figs. 7.a,b,c e 8).



(Fig.7a)

(Fig.7b) →





← (Fig.7c)

Fig.7 a,b,c: Elipsóides isoenergéticos nos pontos L_1 e Δ_1 do germânio.

No intervalo das temperaturas acima mencionado como se sabe no n-Ge os electrões interagem com os fonões acústicos. Podemos supor que esta interacção é elástica e sendo assim sem dúvidas, podemos introduzir o conceito do tempo de relaxação dos portadores de carga durante a interacção dele com os fonões.

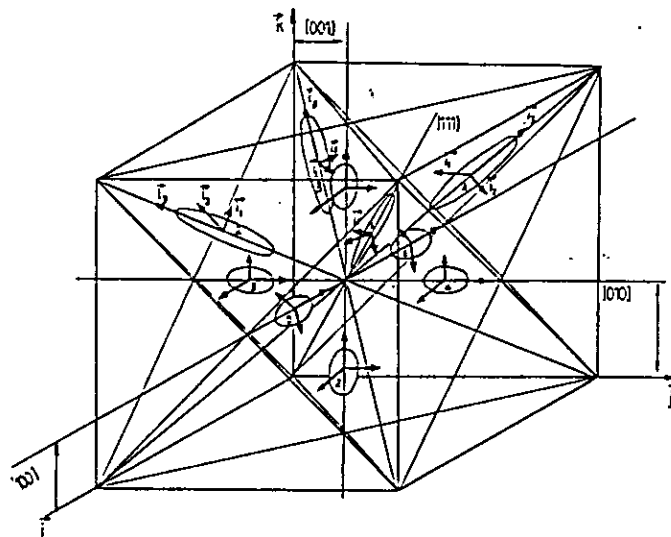


Fig.8: Orientações do referencial cristalográfico e laboratorial $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ e referenciais elipsoidais para cada elipsóide $(\vec{i}_1, \vec{i}_2, \vec{i}_3)$.

De um modo geral, a deformação influi no carácter do espectro de fonões e também influi no tempo de relaxação das interacções electrão-fonão. Por outro lado, esta influência realiza-se através das oscilações não lineares dos átomos (não linearidade ou anarmonismo é pequeno). Naturalmente, podemos supor que as variações acima mencionadas são desprezíveis. Por essa razão nos cálculos utilizaremos os tempos de relaxação electrão-fonão, que são conhecidos para os cristais não deformáveis.

Considerando os Δ_1 mínimos na 1ª aproximação admitimos que as características energéticas deles são semelhantes às do n-Si. Em princípio no caso de Δ_1 mínimos por analogia com n-Si é necessário tomar em conta "intervalley" espalhamento entre os mínimos equivalentes (evidentemente que deve ser g-espalhamento entre dois mínimos que descem, pois f-espalhamento não existe, além de outras razões, devido ao facto de quatro outros Δ_1 mínimos serem vazios) e também "intravalley" espalhamento entre L_1 e Δ_1 mínimos caso da aproximação suficiente deles na escala de energia. Na primeira aproximação nos nossos cálculos desprezaremos estes espalhamentos.

Finalmente, tomando em conta a futura comparação dos resultados teóricos esperados e dados experimentais [28], que foram obtidos com cristais com $n_e = 1,6 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, suponhamos que o gás seja não degenerado, isto é, no equilíbrio termodinâmico ele obedece a estatística de Maxwell-Boltzman.

III. Funções de distribuição, concentração dos electrões nos mínimos de energia e sua variação na presença da deformação elástica uniaxial (DEU).

Funções de distribuição, potencial químico e número de electrões nos mínimos de energia na presença da DEU.

a) Expressões gerais.

a1) Funções de distribuição.

Suponhamos que o gás de electrões seja não degenerado, o que permite-nos aplicar a estatística de Maxwell-Boltzman.

A distribuição equilibrada dos electrões do "i-ésimo" mínimo "germânico" na presença da DEU, pode ser apresentada na forma seguinte:

$$f_{\vec{k}} = \exp \left[\frac{\mu - E_i - \varepsilon_{\vec{k}}^{(i)}}{kT} \right] \quad (III.1)$$

onde,

$$\mu/kT = \bar{\mu}$$

é o potencial químico reduzido dos electrões no cristal na presença da deformação, $E_i/kT = E_i^*$ é o potencial de deformação reduzido do "i-gésimo" mínimo nos eixos principais do tensor de massa, e,

$$\varepsilon_{\vec{k}}^{(i)}/kT = \varepsilon_{\vec{k}}^{(i)*}$$

é a energia reduzida dos electrões do "i-gésimo" mínimo na ausência da deformação.

A distribuição equilibrada dos electrões do "k-gésimo" mínimo "silícico" na presença da DEU, tem a forma seguinte:

$$f_{\vec{k}} = \exp \left[\frac{\mu - \Delta E^* - E_k^* - \varepsilon_{\vec{k}}^{(k)*}}{kT} \right] \quad (III.2)$$

onde $\Delta E^* = \Delta E/kT$ é a diferença reduzida na escala da energia das posições dos mínimos "i" e "k".

a2) Número de electrões nos mínimos de energia.

Como se sabe sendo conhecida a função de distribuição $f_{\vec{k}}^{(i)}$, o número total dos electrões no "i-gésimo" mínimo da energia é

$$N_i^{(i)} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int f_{\vec{k}}^{(i)} d\tau_{\vec{k}} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \exp \left[\frac{\mu - E_i^* - \varepsilon_{\vec{k}}^{(i)*}}{kT} \right] d\tau_{\vec{k}}$$

Para calcular a última integral é necessário conhecer a lei da dispersão dos electrões no "i-gésimo" mínimo $\varepsilon_{\vec{k}}^{(i)} = \varepsilon_{\vec{k}}^{(i)*}$. No caso do n-Ge esta lei é conhecida.

Lembremos que,

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2}{m_1} + \frac{k_2^2}{m_2} + \frac{k_3^2}{m_3} \right)$$

No n-Ge as superfícies da energia constante na banda de condução são elipsóides de revolução, $m_1=m_2=m_{\perp}$ e $m_3=m_{\parallel}$, pelo que teremos:

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2}{m_{\perp}} + \frac{k_2^2}{m_{\perp}} + \frac{k_3^2}{m_{\parallel}} \right)$$

Introduziremos os quase-impulsos "deformáveis" segundo as fórmulas :

$$k_i = \lambda_i \tilde{k} \quad \text{ou} \quad \tilde{k} = k_i / \lambda_i, \quad \text{onde} \quad \lambda_i = \sqrt{m_N / m_i} \quad \text{com} \quad m_N = (m_{\perp}^2 m_{\parallel})^{1/3}$$

e anotamos que $\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = 1$. Assim a energia do electrão terá a forma que mostramos a seguir :

$$\varepsilon_{\tilde{k}} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2}{\lambda_1^2 m_{\perp}} + \frac{k_2^2}{\lambda_2^2 m_{\perp}} + \frac{k_3^2}{\lambda_3^2 m_{\parallel}} \right) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2}{\frac{m_N}{m_{\perp}} m_{\perp}} + \frac{k_2^2}{\frac{m_N}{m_{\perp}} m_{\perp}} + \frac{k_3^2}{\frac{m_N}{m_{\parallel}} m_{\parallel}} \right) = \frac{\hbar^2}{2 m_N} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)$$

Transformaremos de seguida, o elemento de volume,

$$d\tau_{\tilde{k}} = d\tilde{k}_1 d\tilde{k}_2 d\tilde{k}_3 = dk_1 dk_2 dk_3 \frac{1}{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} = dk_1 dk_2 dk_3.$$

Em seguida, calcularemos o número total dos electrões no "i-gésimo" mínimo,

$$N_1^{(i)} = \frac{2}{(2\pi)^3} \exp\left[\frac{\mu - E_i^*}{kT}\right] \int_{-\infty}^{\infty} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} dk_2 \int_{-\infty}^{\infty} dk_3 \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2m_N kT} (k_1^2 + k_2^2 + k_3^2)\right]$$

fazendo, $\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_N kT}$, teremos: $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha k_1^2) dk_1 = \sqrt{\pi/\alpha}$.

Calculando por procedimento idêntico os restantes integrais por dk_2 e por dk_3 , obteremos a expressão final referente aos L_1 mínimos situados como se sabe nos eixos do tipo [111]:

$$N_1^{(i)} = 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^2 m_{\parallel})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{\mu - E_i^*}{kT}\right) \quad (\text{III.3})$$

De maneira análoga, obteremos expressão idêntica referente aos Δ_1 mínimos ou os "silícicos", situados nos eixos do tipo [100]. Mostramos a seguir tal expressão:

$$N_2^{(k)} = 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{\mu - E_k^* - \Delta E^*}{kT}\right) \quad (\text{III.4})$$

a3) Potencial químico.

Suponhamos que a força deformável seja orientada ao longo do eixo cristalográfico [001]. Como se vê da fig.7c, o eixo da deformação é simétrico em relação aos L_1 mínimos, e, por isso todos os L_1 mínimos terão o mesmo potencial da deformação.

Quanto aos Δ_1 mínimos, da mesma fig.7c vê-se que, eles se subdividem em dois grupos, a saber: dois mínimos orientados ao longo do eixo da deformação (isto é, situados nos eixos [001] e [00 $\bar{1}$]) e quatro mínimos situados ao longo dos eixos [100], [$\bar{1}$ 00], [010] e [0 $\bar{1}$ 0]. Devido a

orientação diferente em relação ao eixo de deformação, estes dois grupos dos mínimos possuirão potenciais de deformação diferentes [2,5].

Como existem 4 L_1 mínimos ou "germânicos" ou seja $i=1,2,3,4$ e 6 Δ_1 mínimos ou "silícicos", isto é, $k=1,2,3,4,5,6$; a equação de neutralidade, para o caso em que a força deformável é paralela à direcção [001], terá a forma seguinte:

$$4 N_1^{(1,2,3,4)} + 2 N_2^{(1,2)} + 4 N_2^{(3,4,5,6)} = N_0' \quad (III. 5)$$

onde N_0' é o número total dos electrões no cristal investigado.

Tomamos em conta, que na ausência da deformação

$$N_0' = 4 N_1^0 + 6 N_2^0 \quad (III. 6)$$

Na relação (III.6), N_1^0 e N_2^0 são os números de electrões em L_1 e Δ_1 mínimos respectivamente na ausência da deformação. No cristal não deformável os potenciais da deformação $E_{i,k}=0$ e por isso das fórmulas (III.3) e (III.4) temos :

$$N_1^0 = 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp(\mu^*) \quad \text{e} \quad N_2^0 = 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp(\mu^* - \Delta E^*) .$$

Usando fórmulas (III.3), (III.4), (III.5) e (III.6), encontraremos a relação entre o potencial químico no cristal deformável e no não deformável,

$$\begin{aligned} & 4 \cdot 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\mu^* - E_i^*\right) + 2 \cdot 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\mu^* - E_k^{(1)*} - \Delta E^*\right) + \\ & + 4 \cdot 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\mu^* - E_k^{(2)*} - \Delta E^*\right) = 4 \cdot 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp(\mu^*) + \\ & + 6 \cdot 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp(\mu^* - \Delta E^*) . \end{aligned}$$

Simplificando os coeficientes numéricos, assim como a razão $(2\pi kT)^{3/2} / (\hbar)^3$ obteremos relação seguinte:

$$\begin{aligned} & 2(m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/2} \exp\left(\mu^* - E_i^*\right) + (m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2} \exp\left(\mu^* - E_k^{(1)*} - \Delta E^*\right) + 2(m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2} \exp\left(\mu^* - E_k^{(2)*} - \Delta E^*\right) = \\ & = 2(m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/2} \exp(\mu^*) + 3(m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2} \exp(\mu^* - \Delta E^*) \end{aligned}$$

Introduzimos o conceito de massa eficaz da densidade dos estados para os L_1 mínimos (do tipo [111]), através da relação seguinte :

$$m_N^{(c)} = (m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/3}$$

e para os Δ_1 mínimos (do tipo [100]), a relação seguinte:

$$m_N^{(s)} = (m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/3}$$

Teremos então,

$$\exp\left(\frac{-}{\mu}\right) = A \exp(\mu^*) \quad (III. 7)$$

Na relação (III.7), A é definido como indicamos a seguir,

$$A = \frac{2m_N^{(c)3/2} + 3m_N^{(s)3/2} \exp(-\Delta E^*)}{2m_N^{(c)} \exp(-E_i^*) + m_N^{(s)3/2} \exp(-\Delta E^*) \left[\exp(-E_k^{(1)*}) + 2 \exp(-E_k^{(2)*}) \right]} \quad (III.7a)$$

Substituímos em seguida relação (III.7) nas relações (III.1), (III.2) e obtém-se as fórmulas que determinam a distribuição dos electrões nos L_1 mínimos

$$f_{\vec{k}}^{-(i)} \equiv f_{\vec{k}}^{-(c)} = A \cdot \exp\left[\mu^* - E_i^* - \varepsilon_{\vec{k}}^{(i)} \right], \quad (III.8)$$

e nos dois Δ_1 mínimos situados ao longo do eixo da deformação, tem-se:

$$f_{\vec{k}}^{-s(1)} = A \cdot \exp\left[\mu^* - \Delta E^* - E_k^{(1)*} - \varepsilon_{\vec{k}}^{(k)*} \right], \quad (III.9)$$

e finalmente nos quatro Δ_1 mínimos perpendiculares ao eixo da deformação, tem-se:

$$f_{\vec{k}}^{-s(2)} = A \cdot \exp\left[\mu^* - \Delta E^* - E_k^{(2)*} - \varepsilon_{\vec{k}}^{(k)*} \right]. \quad (III.10)$$

Substituímos relação (III. 7), nas equações (III. 3) e (III. 4), teremos:

$$N_1^{(i)} = 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} A \cdot \exp(\mu^* - E_i^*) = A \cdot N_1^{(0)} \exp(-E_i^*), \quad (III.11)$$

$$N_2^{(1,2)} = A \cdot N_2^{(0)} \cdot \exp[-E_k^{(1)*} - \Delta E^*], \quad (III.12a)$$

$$N_2^{(3,4,5,6)} = A \cdot N_2^{(0)} \cdot \exp[-E_k^{(2)*} - \Delta E^*] \quad (III.12b)$$

b) Casos particulares

1) Seja $\Delta E^* \gg 1$, isto é, todos os electrões estão só no L_1 mínimos. Neste caso a constante A será transformada da maneira seguinte:

$$A = \frac{2m_N^{(c)3/2} + 3m_N^{(s)3/2} \exp(-\Delta E^*)}{2m_N^{(c)} \exp(-E_i^*) + m_N^{(s)3/2} \exp(-\Delta E^*) \left[\exp(-E_k^{(1)*}) + 2 \exp(-E_k^{(2)*}) \right]}$$

$$A \approx \frac{1}{\exp(-E_i^*)} = \exp(E_i^*)$$

Assim, a relação (III.7) terá a forma que mostramos a seguir:

$$\exp\left(\frac{\mu}{kT}\right) = \exp[\mu^* + E_i^*] \quad (III.13)$$

A função de distribuição dos electrões no L_1 mínimos é por conseguinte:

$$f_{\vec{k}}^{(c)} \equiv f_{\vec{k}}^{(l)} = \exp\left(\frac{\mu^* - \varepsilon_{\vec{k}}^{(l)*}}{kT}\right), \quad (III.14)$$

pois neste caso não varia com a deformação.

O número de electrões em cada elipsóide também não varia e $N_1^{(l)} = N_1^{(0)}$, o que coincide com o facto que todos os L_1 mínimos se deslocarem, devido a DEU aplicada, identicamente na escala de energia (no K espaço).

2) $\Delta E^* \ll 1$, neste caso, temos evidentemente:

$$\begin{aligned} A &= \frac{2m_N^{(c)3/2} + 3m_N^{(s)3/2}(1 - \Delta E^*)}{2m_N^{(c)} \exp(-E_i^*) + m_N^{(s)3/2}(1 - \Delta E^*) \left[\exp(-E_k^{(1)*}) + 2 \exp(-E_k^{(2)*}) \right]} = \\ &= \exp(E_i^*) \frac{1 + \frac{3}{2} \left(\frac{m_N^{(s)}}{m_N^{(c)}} \right)^{3/2} (1 - \Delta E^*)}{1 + \frac{1}{2} \left(\frac{m_N^{(s)}}{m_N^{(c)}} \right)^{3/2} \left[\exp(E_i^* - E_k^{(1)*}) + 2 \exp(E_i^* - E_k^{(2)*}) \right] (1 - \Delta E^*)} = \\ &= \exp(E_i^*) \frac{1 + \frac{3}{2} \left(\frac{m_N^{(s)}}{m_N^{(c)}} \right)^{3/2} (1 - \Delta E^*)}{1 + a - a\Delta E^*} \end{aligned}$$

Nesta última relação, o parâmetro "a", definimos da maneira seguinte:

$$a = \frac{1}{2} \left(\frac{m_N^{(s)}}{m_N^{(c)}} \right)^{3/2} \left[\exp(E_i^* - E_k^{(1)*}) + 2 \exp(E_i^* - E_k^{(2)*}) \right]$$

Tendo em conta que,

$$\frac{1}{1+a-a\Delta E^*} = \frac{1}{1+a} + \frac{a}{(1+a)^2} \Delta E^* ,$$

teremos em seguida,

$$A = \frac{1}{1+a} \left\{ 1 + \frac{3}{2} \left(\frac{m_N^{(s)}}{m_N^{(c)}} \right)^{3/2} - \left[\frac{3}{2} \left(\frac{m_N^{(s)}}{m_N^{(c)}} \right)^{3/2} - \frac{a}{1+a} - \frac{3}{2} \left(\frac{m_N^{(s)}}{m_N^{(c)}} \right)^{3/2} \cdot \frac{a}{1+a} \right] \Delta E^* \right\} \cdot \exp(E_i^*) .$$

3) $\Delta E^* = 0$, isto é, temos o modelo com dez mínimos (4+6) não equivalentes:

$$A = \frac{1 + \frac{3}{2} \left(\frac{m_N^{(s)}}{m_N^{(c)}} \right)^{3/2}}{1 + \frac{1}{2} \left(\frac{m_N^{(s)}}{m_N^{(c)}} \right)^{3/2} \left[\exp(E_i^* - E_k^{(1)*}) + 2 \exp(E_i^* - E_k^{(2)*}) \right]} \exp(E_i^*) .$$

IV. Cálculo dos potenciais de deformação .

Segundo a teoria dos potenciais de deformação para os cristais cúbicos [2,5] no sistema de coordenadas ligado com os eixos principais do tensor da massa do "i-gésimo" mínimo, tem-se:

$$E_i = C_1 (\varepsilon_{xx}^{(i)} + \varepsilon_{yy}^{(i)} + \varepsilon_{zz}^{(i)}) + C_2 \varepsilon_{zz}^{(i)} , \quad (IV.1)$$

onde C_1 e C_2 são constantes do potencial de deformação, $\varepsilon_{ij}^{(i)}$ são componentes do tensor de deformação do "i-gésimo" mínimo .

Na fórmula (IV.1) os componentes do tensor de deformação devem ser expressos no referencial ligado com os eixos principais do tensor da massa do "i-gésimo" mínimo (fig.7c).

Para o cálculo dos componentes do tensor de deformação usa-se a lei de Hooke na forma seguinte:

$$\varepsilon_{ik} = \sum_{l,m} S'_{iklm} U_{lm} , \quad (IV.2)$$

em (IV.2) U_{lm} é o tensor das tensões elásticas que possui no referencial laboratorial (que no nosso caso coincide com o cristalográfico e com o elipsoidal do primeiro Δ_1 -mínimo, orientado ao longo do eixo [001] , fig.7c) tem a forma:

$$U_{lm} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P \end{pmatrix} , \quad (IV.3)$$

e S'_{iklm} é o tensor dos módulos elásticos.

No sistema das coordenadas (i, j, k) ligado com os eixos cristalográficos (com as arestas do cubo na fig.8) o tensor dos módulos elásticos \hat{S} têm três componentes diferentes de zero [34,19].

$$S_{1111} = S_{11} ; S_{1122} = S_{12} ; S_{2323} = S_{44}/4 \equiv S_{44}^0 . \quad (IV.4)$$

Os componentes do tensor S'_{iklm} nos referenciais laboratorial e elipsoidais podem ser calculados usando a fórmula seguinte:

$$S'_{iklm} = \sum_{pqrs} a_{ip} a_{jq} a_{lr} a_{ms} S_{pqrs} , \quad (IV.5)$$

onde S_{pqrs} são componentes do tensor dos módulos elásticos no referencial laboratorial; a_{ip}, \dots, a_{ms} são componentes da matriz de transformação do referencial cristalográfico para o laboratorial. Para a transformação dos componentes do tensor da deformação ε_{ij} , expressos nos referenciais elipsoidais para o referencial laboratorial é necessário usar a fórmula seguinte:

$$\varepsilon'_{ij} = \sum_{p,q} \tilde{a}_{ip} \tilde{a}_{jq} \varepsilon_{pq} , \quad (IV.6)$$

onde \tilde{a}_{ip} são componentes da matriz da transição do referencial elipsoidal para o laboratorial (fig.8).

Portanto, como se vê, para efectuarmos os cálculos posteriores e obter os potenciais de deformação no referencial laboratorial, temos de calcular todas as grandezas físicas necessárias no mesmo referencial. Para este fim, é necessário conhecer as respectivas matrizes de transformação.

a) Matrizes da transformação (referencial elipsoidal \leftrightarrow referencial cristalográfico).

Primeiro L_1 mínimo ou mínimo "germânico"

Os vectores unitários do referencial elipsoidal estão relacionados com os do referencial cristalográfico, de modo seguinte (veja fig.8):

$$\vec{i}_3 // [111], \vec{i}_2 // [\bar{1}10] \text{ e } \vec{i}_1 = [\vec{i}_2 \times \vec{i}_3] \text{ onde } \vec{i}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}), \vec{i}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{i} - \vec{j}) \text{ e}$$

$$\vec{i}_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(-\vec{i} - \vec{j} + 2\vec{k}) .$$

Os elementos da matriz de transformação obtém-se a partir dos produtos internos, que mostramos a seguir:

$$a_{11} = \left(\vec{i} \cdot \vec{i}_1 \right) = -\frac{1}{\sqrt{6}} , \quad a_{12} = \left(\vec{i} \cdot \vec{i}_2 \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} , \quad a_{13} = \left(\vec{i} \cdot \vec{i}_3 \right) = \frac{1}{\sqrt{3}} .$$

$$a_{21} = \left(\vec{j} \cdot \vec{i}_1 \right) = -\frac{1}{\sqrt{6}} , \quad a_{22} = \left(\vec{j} \cdot \vec{i}_2 \right) = -\frac{1}{\sqrt{2}} , \quad a_{23} = \left(\vec{j} \cdot \vec{i}_3 \right) = \frac{1}{\sqrt{3}} .$$

$$a_{31} = \left(\vec{k} \cdot \vec{i}_1 \right) = \frac{2}{\sqrt{6}} , \quad a_{32} = \left(\vec{k} \cdot \vec{i}_2 \right) = 0 , \quad a_{33} = \left(\vec{k} \cdot \vec{i}_3 \right) = \frac{1}{\sqrt{3}} .$$

Assim, a matriz de transformação para o primeiro L_1 mínimo ou mínimo "germânico" será:

$$C_{ik}^{(1)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

Segundo L_1 mínimo

$$\begin{aligned} \vec{i}_3 // [\bar{1}\bar{1}1]; \vec{i}_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}); \\ \vec{i}_2 // [\bar{1}\bar{1}0]; \vec{i}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\vec{i} - \vec{j}); \\ \vec{i}_1 &= [\vec{i}_2 \times \vec{i}_3] = \frac{1}{\sqrt{6}}(-\vec{i} + \vec{j} + 2\vec{k}) \end{aligned} \quad C_{ik}^{(2)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

Cálculos análogos aos efectuados para os casos anteriores conduzem-nos à matriz seguinte referente ao terceiro L_1 mínimo

$$\begin{aligned} \vec{i}_3 // [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]; \vec{i}_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(-\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}); \\ \vec{i}_2 // [\bar{1}\bar{1}0]; \vec{i}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-\vec{i} + \vec{j}); \\ \vec{i}_1 &= [\vec{i}_2 \times \vec{i}_3] = \frac{1}{\sqrt{6}}(\vec{i} + \vec{j} + 2\vec{k}) \end{aligned} \quad e \quad C_{ik}^{(3)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

Para o quarto L_1 mínimo

$$\begin{aligned} \vec{i}_3 // [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]; \text{ou, } \vec{i}_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}); \\ \vec{i}_2 // [1\bar{1}0]; \text{ou, } \vec{i}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{i} + \vec{j}); \\ \vec{i}_1 &= [\vec{i}_2 \times \vec{i}_3] = \frac{1}{\sqrt{6}}(\vec{i} - \vec{j} + 2\vec{k}) \end{aligned} \quad e \quad C_{ik}^{(4)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

Calculamos em seguida as matrizes de transformação referentes aos Δ_1 mínimos ou mínimos "silícicos".

Para Δ_1 mínimos 1 e 2, tem-se: $\vec{i}_2 // \vec{j}$, $\vec{i}_2 = \vec{j}$, $\vec{i}_3 // \vec{k}$, $\vec{i}_3 = \vec{k}$, $\vec{i}_1 = [\vec{i}_2 \times \vec{i}_3] = \vec{i}$.

Para Δ_1 mínimos 3 e 4, tem-se: $\vec{i}_2 // \vec{i}$, $\vec{i}_2 = \vec{i}$, $\vec{i}_3 // \vec{j}$, $\vec{i}_3 = \vec{j}$, $\vec{i}_1 = [\vec{i}_2 \times \vec{i}_3] = \vec{k}$.

Para Δ_1 mínimos 5 e 6, tem-se: $\vec{i}_2 // \vec{k}$, $\vec{i}_2 = \vec{k}$, $\vec{i}_3 // \vec{i}$, $\vec{i}_3 = \vec{i}$, $\vec{i}_1 = [\vec{i}_2 \times \vec{i}_3] = \vec{j}$.

Deste modo, as matrizes de transformação do Δ_1 mínimos ou mínimos "silícicos", serão respectivamente:

$$C_{ik}^{(1,2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad C_{ik}^{(3,4)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad C_{ik}^{(5,6)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Em seguida calculamos as matrizes inversas das matrizes de transformação, tanto para os L_1 , assim como, para os Δ_1 mínimos, que mostramos a seguir:

Para L_1 mínimos temos:

$$\tilde{C}_{ik}^{(1)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad \tilde{C}_{ik}^{(2)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix},$$

$$\tilde{C}_{ik}^{(3)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad \tilde{C}_{ik}^{(4)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}.$$

Para Δ_1 mínimos temos:

$$\tilde{C}_{ik}^{(1,2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{C}_{ik}^{(3,4)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tilde{C}_{ik}^{(5,6)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

b) Transformação do tensor dos módulos elásticos.

A expressão para a transformação do tensor dos módulos elásticos apresenta a forma geral, que mostramos a seguir:

$$S'_{rpmn} = \tilde{a}_{ri} \tilde{a}_{pk} \tilde{a}_{ml} \tilde{a}_{nt} S_{iklt} \quad (IV.7)$$

Na relação (IV.7), S_{iklt} é o tensor dos módulos elásticos, que no referencial cristalográfico ligado com as arestas do cubo (fig.8), apresenta a forma seguinte:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix} \quad (IV.8)$$

Desenvolvendo a relação (IV.7) e tomando em conta a relação (IV.8), teremos:

$$\begin{aligned} S'_{r_{pmn}} = & (\tilde{a}_{r1}\tilde{a}_{p1}\tilde{a}_{m1}\tilde{a}_{n1} + \tilde{a}_{r2}\tilde{a}_{p2}\tilde{a}_{m2}\tilde{a}_{n2} + \tilde{a}_{r3}\tilde{a}_{p3}\tilde{a}_{m3}\tilde{a}_{n3}) S_{11} + (\tilde{a}_{r1}\tilde{a}_{p1}\tilde{a}_{m2}\tilde{a}_{n2} + \tilde{a}_{r1}\tilde{a}_{p1}\tilde{a}_{m3}\tilde{a}_{n2} + \\ & + \tilde{a}_{r2}\tilde{a}_{p2}\tilde{a}_{m1}\tilde{a}_{n1} + \tilde{a}_{r2}\tilde{a}_{p2}\tilde{a}_{m3}\tilde{a}_{n3} + \tilde{a}_{r3}\tilde{a}_{p3}\tilde{a}_{m1}\tilde{a}_{n1} + \tilde{a}_{r3}\tilde{a}_{p3}\tilde{a}_{m2}\tilde{a}_{n2}) S_{12} + (\tilde{a}_{r2}\tilde{a}_{p1}\tilde{a}_{m1}\tilde{a}_{n2} + \\ & + \tilde{a}_{r3}\tilde{a}_{p1}\tilde{a}_{m1}\tilde{a}_{n3} + \tilde{a}_{r2}\tilde{a}_{p1}\tilde{a}_{m2}\tilde{a}_{n1} + \tilde{a}_{r3}\tilde{a}_{p1}\tilde{a}_{m3}\tilde{a}_{n1} + \tilde{a}_{r1}\tilde{a}_{p2}\tilde{a}_{m1}\tilde{a}_{n2} + \tilde{a}_{r1}\tilde{a}_{p2}\tilde{a}_{m2}\tilde{a}_{n1} + \tilde{a}_{r3}\tilde{a}_{p2}\tilde{a}_{m2}\tilde{a}_{n3} + \\ & + \tilde{a}_{r3}\tilde{a}_{p2}\tilde{a}_{m3}\tilde{a}_{n2} + \tilde{a}_{r1}\tilde{a}_{p3}\tilde{a}_{m1}\tilde{a}_{n3} + \tilde{a}_{r2}\tilde{a}_{p3}\tilde{a}_{m2}\tilde{a}_{n3} + \tilde{a}_{r1}\tilde{a}_{p3}\tilde{a}_{m3}\tilde{a}_{n1} + \tilde{a}_{r2}\tilde{a}_{p3}\tilde{a}_{m3}\tilde{a}_{n2}) S_{44}. \end{aligned}$$

Para a contracção dos índices usam-se as relações seguintes [19,34]:

$$11 \leftrightarrow 1 ; 22 \leftrightarrow 2 ; 33 \leftrightarrow 3 ; 23 \leftrightarrow 4 ; 31 \leftrightarrow 5 ; 12 \leftrightarrow 6 .$$

Notamos que $S'_{r_{pmn}}$ é o tensor dos módulos elásticos no referencial elipsoidal e S_{iklt} é o tensor dos módulos elásticos no referencial cristalográfico.

Efectuamos em seguida os cálculos para obter os elementos de $S'_{r_{pmn}}$ aos L_1 mínimos, começando pelo primeiro:

$$\begin{aligned} S'_{1111} = S'_{11} = & (\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{12}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{12} + \tilde{a}_{13}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{13}) S_{11} + (\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{12} + \tilde{a}_{11}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{13} + \\ & + \tilde{a}_{12}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{12}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{13} + \tilde{a}_{13}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{13}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{12}) S_{12} + (\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{12} + \tilde{a}_{13}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{13} + \\ & + \tilde{a}_{12}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{13}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{11}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{12} + \tilde{a}_{11}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{13}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{13} + \tilde{a}_{13}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{12} + \\ & + \tilde{a}_{11}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{11}\tilde{a}_{13} + \tilde{a}_{12}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{12}\tilde{a}_{13} + \tilde{a}_{11}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{11} + \tilde{a}_{12}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{13}\tilde{a}_{12}) S_{44}. \end{aligned}$$

Efectuando substituições e simplificações adequadas teremos o elemento desejado:

$$S'_{11} = \frac{1}{2}S_{11} + \frac{1}{2}S_{12} + S_{44} .$$

Usando procedimento idêntico obtemos, os restantes elementos do tensor em causa referentes ainda ao primeiro L_1 mínimo. Assim :

$$S'_{12} = \frac{1}{6}S_{11} + \frac{5}{6}S_{12} - \frac{1}{3}S_{44}; S'_{13} = \frac{1}{3}S_{11} + \frac{2}{3}S_{12} - \frac{2}{3}S_{44}; S'_{14} = 0; S'_{15} = \frac{\sqrt{2}}{6}S_{11} - \frac{\sqrt{2}}{6}S_{12} - \frac{\sqrt{2}}{3}S_{44}; S'_{16} = 0.$$

$$S'_{21} = \frac{1}{6}S_{11} + \frac{5}{6}S_{12} - \frac{1}{3}S_{44}; S'_{22} = \frac{1}{3}S_{11} + \frac{1}{2}S_{12} + S_{44}; S'_{23} = \frac{1}{3}S_{11} + \frac{2}{3}S_{12} - \frac{2}{3}S_{44}; S'_{24} = 0$$

$$S'_{25} = -\frac{\sqrt{2}}{6}S_{11} + \frac{\sqrt{2}}{6}S_{12} + \frac{\sqrt{2}}{3}S_{44}; S'_{26} = 0$$

$$S'_{31} = \frac{1}{3}S_{11} + \frac{2}{3}S_{12} - \frac{2}{3}S_{44}, \quad S'_{32} = \frac{1}{3}S_{11} + \frac{2}{3}S_{12} - \frac{2}{3}S_{44}, \quad S'_{33} = \frac{1}{3}S_{11} + \frac{2}{3}S_{12} + \frac{4}{3}S_{44}$$

$$S'_{34} = S'_{35} = S'_{36} = 0$$

$$S'_{41} = 0; S'_{42} = 0; S'_{43} = 0; S'_{44} = \frac{1}{3}S_{11} - \frac{1}{3}S_{12} + \frac{1}{3}S_{44}; S'_{45} = 0; S'_{46} = -\frac{\sqrt{2}}{6}S_{11} + \frac{\sqrt{2}}{6}S_{12} + \frac{\sqrt{2}}{3}S_{44}$$

$$S'_{51} = \frac{\sqrt{2}}{6}S_{11} - \frac{\sqrt{2}}{6}S_{12} - \frac{\sqrt{2}}{3}S_{44}; S'_{52} = -\frac{\sqrt{2}}{6}S_{11} + \frac{\sqrt{2}}{6}S_{12} + \frac{\sqrt{2}}{3}S_{44}; S'_{53} = 0; S'_{54} = 0;$$

$$S'_{55} = \frac{1}{3}S_{11} - \frac{1}{3}S_{12} + \frac{1}{3}S_{44}; S'_{56} = 0.$$

$$S'_{61} = S'_{62} = S'_{63} = S'_{65} = 0, \quad S'_{64} = -\frac{\sqrt{2}}{6}S_{11} + \frac{\sqrt{2}}{6}S_{12} + \frac{\sqrt{2}}{3}S_{44}, \quad S'_{66} = \frac{1}{6}S_{11} - \frac{1}{6}S_{12} + \frac{2}{3}S_{44}.$$

Com base nestes resultados podemos escrever o tensor dos módulos elásticos do referencial elipsoidal em relação ao referencial cristalográfico, correspondente ao primeiro L_1 mínimo.

$$\hat{S}^{(1)} = \begin{pmatrix} S'_{11} & S'_{12} & S'_{13} & 0 & S'_{15} & 0 \\ S'_{12} & S'_{11} & S'_{13} & 0 & -S'_{15} & 0 \\ S'_{13} & S'_{13} & S'_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S'_{44} & 0 & -S'_{15} \\ S'_{15} & -S'_{15} & 0 & 0 & S'_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -S'_{15} & 0 & S'_{66} \end{pmatrix}. \quad (IV.9)$$

Para os restantes L_1 mínimos, isto é, o segundo, o terceiro e o quarto, tem-se a relação mostrada abaixo:

$$S^{(2)} = S^{(3)} = S^{(4)} = S^{(1)}.$$

Em relação aos Δ_1 mínimos cálculos permitem encontrar os valores seguintes, para o primeiro e o segundo mínimos:

$$S'_{11}=S_{11} ; S'_{22}=S_{12} ; S'_{13}=S_{12} ; S'_{14}=0 ; S'_{15}=0 ; S'_{16}=0$$

$$S'_{21}=S_{12} ; S'_{22}=S_{11} ; S'_{23}=S_{12} ; S'_{24}=0 ; S'_{25}=0 ; S'_{26}=0$$

$$S'_{31}=S_{12} ; S'_{32}=S_{12} ; S'_{33}=S_{11} ; S'_{34}=0 ; S'_{35}=0 ; S'_{36}=0$$

$$S'_{41}=0 ; S'_{42}=0 ; S'_{43}=0 ; S'_{44}=S_{44} ; S'_{45}=0 ; S'_{46}=0$$

$$S'_{51}=0 ; S'_{52}=0 ; S'_{53}=0 ; S'_{54}=0 ; S'_{55}=S_{44} ; S'_{56}=0$$

$$S'_{61}=0 ; S'_{62}=0 ; S'_{63}=0 ; S'_{64}=0 ; S'_{65}=0 ; S'_{66}=S_{44}$$

Escrevemos em seguida, o tensor da transformação do referencial elipsoidal para o referencial cristalográfico, correspondente aos Δ_1 mínimos; o primeiro e o segundo:

$$\hat{S}^{(1,2)'} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix} \quad (IV.10)$$

Para os restantes Δ_1 mínimos, isto é, o terceiro, o quarto, o quinto e o sexto, tem-se a relação seguinte:

$$\hat{S}^{(3,4)'} = \hat{S}^{(5,6)'} = \hat{S}^{(1,2)'}$$

c) Cálculo do tensor da deformação.

Para calcularmos os componentes do tensor da deformação no referencial elipsoidal, escreveremos a lei de Hooke na forma seguinte:

$$\epsilon_{ik}' = \sum_{l,m} S'_{iklm} U_{lm}' \quad (IV.11)$$

Na relação (IV.11), U_{lm}' é o tensor das tensões elásticas, que podemos obter usando a

relação seguinte:

$$U_{lm}' = \tilde{a}_{l3} \tilde{a}_{m3} U_{33} \quad (IV.12)$$

U'_{lm} é ligado ao referencial elipsoidal e U_{33} é elemento do tensor das tensões no referencial cristalográfico, que como já referimos e no caso da deformação uniaxial tem a forma geral seguinte:

$$U'_{lm} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.13})$$

efectuamos em seguida os cálculos, que permitem-nos obter os elementos do tensor mostrado na relação (IV.12), numa forma geral:

$$U'_{11} = \tilde{a}_{13}\tilde{a}_{13}U_{33}; \quad U'_{12} = \tilde{a}_{13}\tilde{a}_{23}U_{33}; \quad U'_{13} = \tilde{a}_{13}\tilde{a}_{33}U_{33}; \quad U'_{21} = \tilde{a}_{23}\tilde{a}_{13}U_{33}; \quad U'_{22} = \tilde{a}_{23}\tilde{a}_{23}U_{33};$$

$$U'_{23} = \tilde{a}_{23}\tilde{a}_{33}U_{33}; \quad U'_{31} = \tilde{a}_{33}\tilde{a}_{13}U_{33}; \quad U'_{32} = \tilde{a}_{33}\tilde{a}_{23}U_{33} \quad \text{e} \quad U'_{33} = \tilde{a}_{33}\tilde{a}_{33}U_{33}.$$

Para os L_1 mínimos temos depois dos cálculos relação seguinte:

$$U'_{lm}^{(1)} = U'_{lm}^{(2)} = U'_{lm}^{(3)} = U'_{lm}^{(4)}$$

onde,

$$U'_{lm}^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3}P & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{3}P & 0 & \frac{1}{3}P \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.14})$$

E para os Δ_1 mínimos temos os tensores abaixo:

$$U'_{lm}^{(1,2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P \end{pmatrix}, \quad U'_{lm}^{(3,4)} = \begin{pmatrix} P & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad U'_{lm}^{(5,6)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & P & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.15})$$

Desenvolvemos (IV.11) e encontramos as relações mostradas abaixo:

$$\varepsilon'_{11} = S'_{11}U'_{11} + S'_{16}U'_{12} + S'_{15}U'_{13} + S'_{16}U'_{21} + S'_{12}U'_{22} + S'_{14}U'_{23} + S'_{15}U'_{31} + S'_{14}U'_{32} + S'_{13}U'_{33},$$

$$\varepsilon'_{22} = S'_{21}U'_{11} + S'_{26}U'_{12} + S'_{25}U'_{13} + S'_{26}U'_{21} + S'_{22}U'_{22} + S'_{24}U'_{23} + S'_{25}U'_{31} + S'_{24}U'_{32} + S'_{23}U'_{33},$$

$$\varepsilon'_{33} = S'_{31}U'_{11} + S'_{36}U'_{12} + S'_{35}U'_{13} + S'_{36}U'_{21} + S'_{32}U'_{22} + S'_{34}U'_{23} + S'_{35}U'_{31} + S'_{34}U'_{32} + S'_{33}U'_{33},$$

Substituímos relações (IV.14) e (IV.15), nas últimas três expressões e obtemos, para os L_1 mínimos,

$$\varepsilon'_{11} = S'_{11}U'_{11} + S'_{15}(U'_{13} + U'_{31}) + S'_{13}U'_{33}, \quad \text{e}, \quad \varepsilon'_{11}^{(1)} = \varepsilon'_{11}^{(2)} = \varepsilon'_{11}^{(3)} = \varepsilon'_{11}^{(4)}.$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{11}^{(1)} &= \frac{2}{3} PS'_{11} + \frac{2\sqrt{2}}{3} PS'_{15} + \frac{1}{3} PS'_{13} = \frac{2}{3} PS'_{11} + \frac{1}{3} PS'_{12} \\ \varepsilon'_{22} &= S'_{12} U'_{11} - S'_{15} (U'_{13} + U'_{31}) + S'_{13} U'_{33}; e, \quad \varepsilon'_{22}^{(1)} = \varepsilon'_{22}^{(2)} = \varepsilon'_{22}^{(3)} = \varepsilon'_{22}^{(4)}, \\ \varepsilon_{22}^{(1)} &= \frac{2}{3} PS'_{12} - \frac{2\sqrt{2}}{3} PS'_{15} + \frac{1}{3} PS'_{13} = PS'_{12} \\ \varepsilon'_{33} &= S'_{13} U'_{11} + S'_{33} U'_{33}, e, \quad \varepsilon'_{33}^{(1)} = \varepsilon'_{33}^{(2)} = \varepsilon'_{33}^{(3)} = \varepsilon'_{33}^{(4)}, \\ \varepsilon_{33}^{(1)} &= \frac{2}{3} PS'_{13} + \frac{1}{3} PS'_{33} = \frac{1}{3} PS'_{11} + \frac{2}{3} PS'_{12}, \end{aligned}$$

e para os Δ_1 mínimos,

$$\begin{aligned} \varepsilon'_{11}^{(1,2)} &= S'_{13} U'_{33} = PS'_{12}; \quad \varepsilon'_{22}^{(1,2)} = S'_{23} U'_{33} = PS'_{12}; \quad \varepsilon'_{33}^{(1,2)} = S'_{33} U'_{33} = PS'_{11} \\ \varepsilon'_{11}^{(3,4)} &= S'_{11} U'_{11} = PS'_{11}; \quad \varepsilon'_{22}^{(3,4)} = S'_{21} U'_{11} = PS'_{12}; \quad \varepsilon'_{33}^{(2,4)} = S'_{31} U'_{11} = PS'_{12} \\ \varepsilon'_{11}^{(5,6)} &= S'_{12} U'_{22} = PS'_{12}; \quad \varepsilon'_{22}^{(5,6)} = S'_{22} U'_{22} = PS'_{11}; \quad \varepsilon'_{33}^{(5,6)} = S'_{32} U'_{22} = PS'_{12} \end{aligned}$$

d) Potenciais de deformação dos mínimos não equivalentes.

De acordo com a teoria dos potenciais de deformação, como já referimos, para cristais cúbicos no sistema de coordenadas ligado com os eixos principais do tensor da massa, do "i-gésimo" mínimo ou "k-gésimo" mínimo, tem-se:

$$E_{C,S} = C_1^{C,S} [\varepsilon_{11}^{(C,S)} + \varepsilon_{22}^{(C,S)} + \varepsilon_{33}^{(C,S)}] + C_2^{C,S} \varepsilon_{33}^{(C,S)}, \quad (IV.16)$$

onde C_1 e C_2 são constantes do potencial de deformação; $\varepsilon_{ii}^{(C,S)}$ são componentes do tensor da deformação do "i-gésimo" ou do "k-gésimo" mínimo respectivamente. Importa referirmos, que índices "C" e "S" estão ligados com L_1 e Δ_1 mínimos respectivamente.

Temos assim, os potenciais de deformação seguintes:

para L_1 mínimos ou mínimos "germânicos"

$$E^{C(1)} = E^{C(2)} = E^{C(3)} = E^{C(4)}, e, E^{C(1)} = C_1 P (S_{11} + 2S_{12}) + C_2 P [(1/3)S_{11} + (2/3)S_{12}], \quad (IV.17)$$

para Δ_1 mínimos ou mínimos "silícicos"

$$E^{S(1,2)} = C_1 P (S_{11} + 2S_{12}) + C_2 PS_{11}, \quad (IV.18)$$

$$E^{S(3,4)} = E^{S(5,6)} = C_1 P (S_{11} + 2S_{12}) + C_2 PS_{12}, \quad (IV.19)$$

Sendo assim chegamos à conclusão, que

- os mínimos "germânicos" deslocam-se idênticamente na escala de energia (as constantes dos potenciais da deformação são iguais).
- quanto aos mínimos "silícicos" vê-se, que sob $P // [001]$ eles estão subdivididos em dois grupos (1,2) e (3,4,5,6), com potenciais de deformação diferentes, deslocando-se por isso de modo diferente na escala de energia, o que provoca certamente a redistribuição dos electrões entre os mínimos da energia (Δ_1 e L_1). Tal redistribuição origina finalmente o fenómeno da Piezoresistência.

V. Números de preenchimento e sua dependência da DEU.

Sendo conhecidos os potenciais de deformação dos mínimos na banda de condução do Ge e Si, voltemos à análise das expressões para o número de portadores de carga (isto é, electrões) em cada grupo de mínimos e sua dependência em relação à deformação.

Foram obtidas as expressões seguintes :

$$N_1^{(i)} = A \cdot N_1^0 \cdot \exp(-E_i^*) ; N_2^{(1,2)} = A \cdot N_2^0 \cdot \exp(-E_k^{(i)*}) \quad e \quad N_2^{(3,4,5,6)} = A \cdot N_2^0 \cdot \exp(-E_k^{(2)*}) . \quad (V.1)$$

Os números de portadores de carga são tais que cumpre-se a igualdade seguinte :

$$4N_1^{(i)} + 2N_2^{(1,2)} + 4N_2^{(3,4,5,6)} = N_0' . \quad (V.2)$$

Dividindo última expressão por N_0' , obteremos relação seguinte:

$$4 \cdot \frac{N_1^{(i)}}{N_0'} + 2 \cdot \frac{N_2^{(1,2)}}{N_0'} + 4 \cdot \frac{N_2^{(3,4,5,6)}}{N_0'} = 1 \quad \text{ou simplesmente,} \quad 4n_1 + 2n_2 + 4n_3 = 1 \quad (V.3)$$

Pretendemos obter os números de preenchimento n_1 , n_2 e n_3 .

$$\text{Como} \quad N_1^0 = 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp(\mu^*) \quad e \quad N_2^0 = 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp(\mu^* - \Delta E^*) ,$$

e, atendendo que na ausência da deformação tem-se $N_0^0 = 4N_1^0 + 6N_2^0$, teremos para N_0' a relação seguinte:

$$N_0' = 4 \frac{(2\pi kT)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3} \left[2(m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/2} + 3(m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2} \exp(-\Delta E^*) \right] \exp(\mu^*) . \quad (V.4)$$

Calculamos em seguida n_1 , n_2 e n_3 ,

$$n_1 = \frac{N_1^{(i)}}{N_0'} = \frac{(m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/2} A \exp(-E_i^*)}{2 \left[2(m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/2} + 3(m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2} \exp(-\Delta E^*) \right]} \quad (V.5)$$

$$n_2 = \frac{N_1^{(1,2)}}{N_0} = \frac{(m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2} A \exp(-E_k^{(1)*} - \Delta E^*)}{2 \left[2(m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/2} + 3(m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2} \exp(-\Delta E^*) \right]} \quad (V.6)$$

$$n_3 = \frac{N_1^{(3,4,5,6)}}{N_0} = \frac{(m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2} A \exp(-E_k^{(2)*} - \Delta E^*)}{2 \left[2(m_{\perp}^{(i)2} m_{\parallel}^{(i)})^{1/2} + 3(m_{\perp}^{(k)2} m_{\parallel}^{(k)})^{1/2} \exp(-\Delta E^*) \right]} \quad (V.7)$$

Substituindo nas expressões (V.5), (V.6) e (V.7), a relação correspondente ao parâmetro A, fazendo simplificações adequadas encontraremos para n_1 , n_2 e n_3 as expressões explícitas seguintes:

$$n_1 = \left[4 + \left(\frac{m_N^{(S)}}{m_N^{(C)}} \right)^{3/2} \exp(E_i^* - \Delta E^*) \left[2 \exp(-E_k^{(1)*}) + 4 \exp(-E_k^{(2)*}) \right] \right]^{-1} \quad (V.8)$$

$$n_2 = \left[2 + 4 \exp(E_k^{(1)*} - E_k^{(2)*}) + 4 \left(\frac{m_N^{(C)}}{m_N^{(S)}} \right)^{3/2} \exp(\Delta E^* - E_i^* + E_k^{(1)*}) \right]^{-1} \quad (V.9)$$

$$n_3 = \left[4 + 2 \exp(E_k^{(2)*} - E_k^{(1)*}) + 4 \left(\frac{m_N^{(C)}}{m_N^{(S)}} \right)^{3/2} \exp(\Delta E^* - E_i^* + E_k^{(2)*}) \right]^{-1} \quad (V.10)$$

onde, E_i^* , $E_k^{(1)*}$, $E_k^{(2)*}$ são os potenciais de deformação reduzidos e ΔE^* é a variação de energia entre os mínimos não equivalentes, igualmente reduzida.

Elaboramos um programa específico, que permite calcular n_1 , n_2 e n_3 , mostrando também a validade da relação $4n_1 + 2n_2 + 4n_3 = 1$. Tal programa, assim como os respectivos resultados podem ser observados nos anexos do presente trabalho.

Casos particulares.

- 1) Suponhamos que não existe deformação, isto é, $P \rightarrow 0$, então neste caso os números de preenchimento serão $n_1 = 0,25$, $n_2 \rightarrow 0$ e $n_3 \rightarrow 0$, pois os potenciais E_i^* , $E_k^{(1)*}$, $E_k^{(2)*}$ são iguais a zero, enquanto $\exp(\Delta E^*)$ é um valor muito elevado.

2) Seja $P \rightarrow \infty$

Rescrevemos as relações (V.8), (V.9) e (V.10), como segue:

$$n_1 = \left[4 + \left(\frac{m_N^{(S)}}{m_N^{(C)}} \right)^{3/2} \exp(E_i^* - \Delta E^*) \left[2 \exp(-E_k^{(1)*}) + 4 \exp(-E_k^{(2)*}) \right] \right]^{-1}, \quad (\text{V.8'})$$

$$n_2 = \left[2 + 4 \exp(E_k^{(1)*} - E_k^{(2)*}) + 4 \left(\frac{m_N^{(C)}}{m_N^{(S)}} \right)^{3/2} \exp(\Delta E^* - E_i^* + E_k^{(1)*}) \right]^{-1}, \quad (\text{V.9'})$$

$$n_3 = \left[4 + 2 \exp(E_k^{(2)*} - E_k^{(1)*}) + 4 \left(\frac{m_N^{(C)}}{m_N^{(S)}} \right)^{3/2} \exp(\Delta E^* - E_i^* + E_k^{(2)*}) \right]^{-1}. \quad (\text{V.10'})$$

Procuraremos os valores da pressão a partir dos quais há transição do electrões dos mínimos "germânicos", que sobem para os dois mínimos "silícicos" que descem.

Analisaremos assim a expressão,

$$E_i - E_k^{(1)} - \Delta E \gg 0 \text{ ou } E_i - E_k^{(1)} \gg \Delta E.$$

Substituindo as expressões correspondentes a E_i e $E_k^{(1)}$ na última relação, teremos:

$$P [(S_{11} + 2S_{12})(C_1^C + 1/3C_2^C) + C_1^S S_{11} + 2C_1^S S_{12} + C_2^S S_{11}] \gg \Delta E. \quad (\text{V.11})$$

As constantes da relação (V.11) são dadas a seguir:

$$S_{11} = 0,754 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 \cdot \text{din}^{-1}; \quad S_{12} = -0,206 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2 \cdot \text{din}^{-1}; \quad C_1^C = -6,4 \text{ eV}; \quad C_2^C = 16,4 \text{ eV}; \\ C_1^S = 0,53 \text{ eV}; \quad C_2^S = 10,4 \text{ eV} \text{ e } \Delta E = 0,18 \text{ eV}.$$

Substituindo estas constantes na relação (V.11), igualando a parte esquerda da mesma relação a unidade, teremos

$P_0 \cdot Z = 1$, onde Z representa os parênteses rectos da relação (V.11). Assim:

$$P_0 \cdot 7,703 \cdot 10^{-6} = 1 \text{ ou } P_0 \approx 130000 \text{ Kgf} \cdot \text{cm}^{-2}.$$

Apartir deste valor de pressão, começa a aparecer um número significativo de electrões nos mínimos 1-2 "silícicos".

Quando a pressão $P \gg P_0$, então teremos:

$$n_1 \approx 0; n_2 \approx 1/2 \text{ e } n_3 \approx 0,$$

ou seja os electrões transitam dos mínimos "germânicos", para os mínimos "silícicos", que descem.

Recordamos que na mesma altura $E_k^{(1)} - E_k^{(2)} \ll 0$.

Nos anexos são mostrados os resultados dos cálculos dos números de preenchimento, em função da pressão e da temperatura, obtidos apartir dum programa elaborado para este fim como foi referenciado antes.

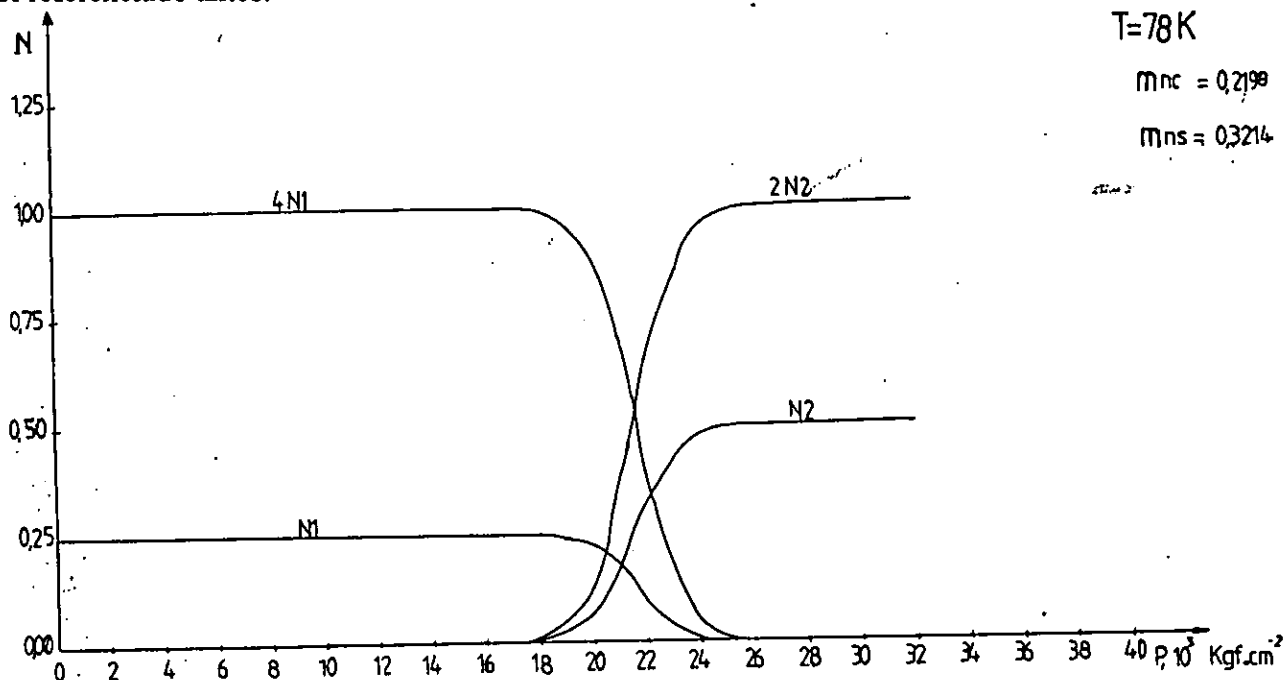


Fig.9: Números de preenchimento nos L_1 e Δ_1 mínimos em função da pressão uniaxial ($P // [001]$).

Estes resultados mostram-nos ainda, que o número de preenchimento num mínimo "germânico" decresce com o aumento da pressão, enquanto o número de preenchimento num mínimo "silícico", que desce, cresce com o aumento da pressão (fig.9).

Os resultados mostram-nos ainda, que o aumento da temperatura, permite uma transição muito mais rápida de electrões entre os mínimos de energia, devido ao movimento térmico dos mesmos, que torna-se mais intenso com a temperatura (fig.10).

Foram construídos gráficos do número de preenchimento como função da pressão e da temperatura, para uma melhor análise dos resultados obtidos. Tais gráficos podem ser observados na fig.10.

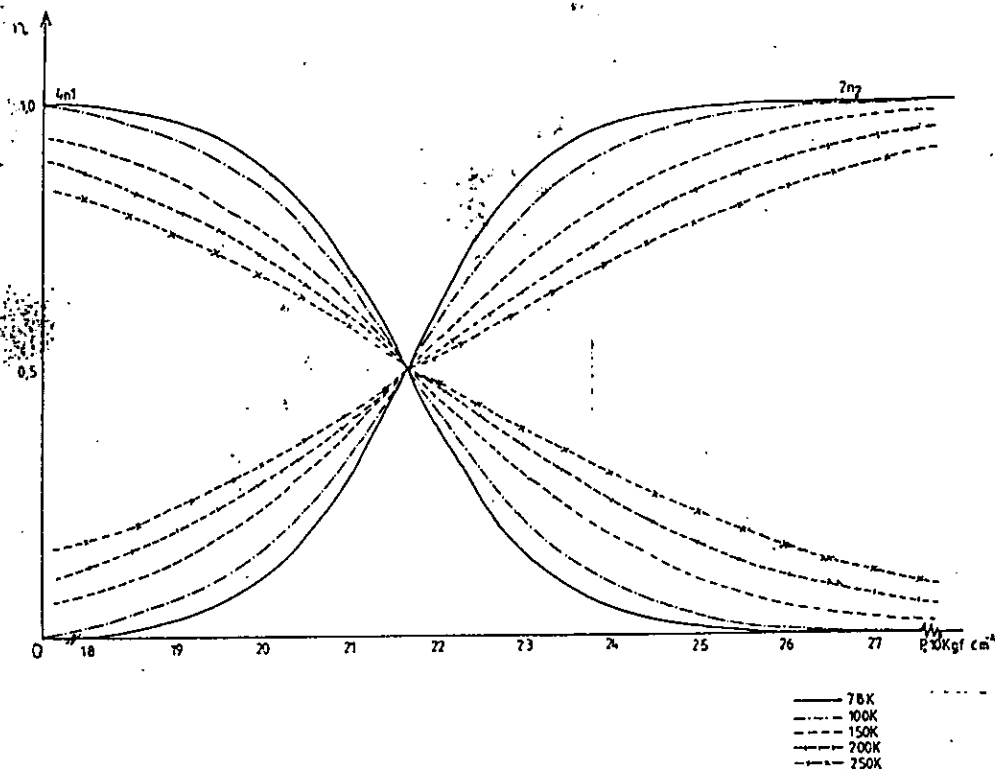


Fig.10: Números de preenchimento em função da pressão uniaxial ($P//[001]$) e da temperatura.

VI. Cinética do deslocamento dos mínimos L_1 e Δ_1 , com a pressão uniaxial ($P// [001]$).

Calculemos no início a grandeza $\Delta\epsilon$, que separa os L_1 e Δ_1 mínimos na escala de energia.

Sublinhemos que a grandeza em causa, depende unicamente da força deformável externa ($P//[001]$).

$$\begin{aligned} \Delta\epsilon(P) &= E^{\Delta(1,2)} - E^L = C_1^S P(S_{11} + 2S_{12}) + C_2^S P S_{11} - P(S_{11} + 2S_{12})(C_1^C + 1/3 C_2^C) = \\ &= P[(S_{11} + 2S_{12})(C_1^S - C_1^C - 1/3 C_2^C) + S_{11} C_2^S] \end{aligned}$$

Substituímos os valores das constantes S_{11} , S_{12} , C_1^S , C_2^S , C_1^C e C_2^C , na relação acima e obtemos:

$$\Delta\epsilon(P) = [(7,54 - 2 \cdot 2,06) \cdot 10^{-7} \cdot (0,53 + 6,4 - 5,47) + 7,54 \cdot 10^{-7} \cdot 10,4] = 83,41 \cdot 10^{-7} P$$

ou seja,

$$\Delta\epsilon(P) = 83,41 \cdot 10^{-7} P.$$

Dado que,

$$\Delta\epsilon = \Delta\epsilon_0 + \Delta\epsilon(P), \text{ em que } \Delta\epsilon_0 = 0,18 \text{ eV, teremos:}$$

$$\Delta\varepsilon = \Delta\varepsilon_0 + 83,41 \cdot 10^{-7} \cdot P, \text{ onde } P < 0.$$

Assim, se $\Delta\varepsilon = 0$, então,

$$P = \frac{\Delta\varepsilon_0}{83,41 \cdot 10^{-7}} = -0,002158 \cdot 10^7, \text{ ou seja,}$$

$$P = -21580 \text{ Kgf}\cdot\text{cm}^{-2}$$

A pressão obtida, corresponde ao ponto de viragem, ou seja, é a pressão na qual o número de portadores de carga é igual entre os mínimos não equivalentes (L_1 e Δ_1).

O gráfico mostrado na fig.11, mostra-nos como variam as energias com a pressão uniaxial $P//[001]$, para " Δ_1 " e " L_1 " mínimos.

O referido gráfico mostra-nos ainda que a "velocidade" de descida dos mínimos de energia do tipo Δ_1 é muitíssimo maior em relação a "velocidade" de subida dos L_1 mínimos. Podemos observar ainda no mesmo gráfico, que os $\Delta(3,4,5,6)$ mínimos, não tem a menor possibilidade de participar na troca dos portadores de carga, já que eles sobem mais na escala de energia.

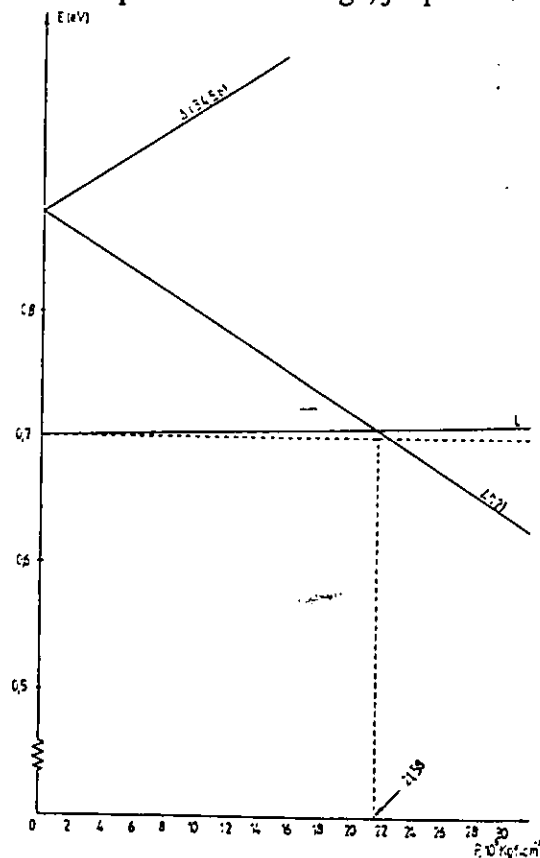


Fig.11: Cinética do deslocamento dos mínimos energéticos no n-Ge com a pressão uniaxial ($P//[001]$).

É fácil notarmos, que a pressão de "viragem", isto é, a pressão em que os portadores de carga estão em igual número, tanto nos Δ_1 mínimos assim como nos L_1 mínimos, é de facto cerca de 21580Kgf-cm^{-2} .

Portanto, na presença da deformação elástica uniaxial ($P//[001]$), os L_1 mínimos sobem lentamente, enquanto os Δ_1 mínimos descem rapidamente.

VII. Tensor da condutibilidade eléctrica.

Determinaremos a expressão para o cálculo do tensor da condutibilidade eléctrica para "r" mínimo de energia, a partir da forma geral seguinte [2,3,7-9,19]:

$$\sigma_{ik}^{(r)} = \frac{eN^{(r)} \langle \tau_{ik} \rangle}{m} \quad (\text{VII.1})$$

Na ausência do campo magnético o tensor da condutibilidade eléctrica para um mínimo de energia tem a forma [2,3,5]:

$$\sigma_{11} = d_0 \int_0^\infty dx \cdot x^{3/2} \frac{d\bar{f}_{\vec{k}}}{d\bar{x}_{\vec{k}}} \tau_{\perp} ; \sigma_{22} = d_0 \int_0^\infty dx \cdot x^{3/2} \frac{d\bar{f}_{\vec{k}}}{d\bar{x}_{\vec{k}}} \tau_{\perp} ; \sigma_{33} = d_0 \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}} \int_0^\infty dx \cdot x^{3/2} \frac{d\bar{f}_{\vec{k}}}{d\bar{x}_{\vec{k}}} \tau_{\parallel} \quad (\text{VII.2})$$

Onde,

$$d_0 = -\frac{2\sqrt{2}e^2\sqrt{m_{\parallel}}}{3\pi^2\hbar^3} (kT)^{3/2} ; \quad x = \frac{\varepsilon}{kT} ; \quad \bar{f}_{\vec{k}}^{(i)} = \exp\left(\mu - \varepsilon_{\vec{k}}^{(i)*} - E_i^*\right) = \exp\left(-\bar{x}_{\vec{k}}\right) e^{-\frac{\varepsilon_{\vec{k}} - E - \mu}{kT}} \quad (\text{VII.3})$$

No caso do espalhamento por fonões acústicos, segundo a teoria do espalhamento anisotrópico [2,5,20], tem-se:

$$\tau_{\parallel} = \frac{\tau_{0a}}{\phi_{0a}} ; \quad \tau_{\perp} = \frac{\tau_{0a}}{\phi_{1a}} ; \quad \tau_0 = \frac{\pi C'_{11} h^4}{\sqrt{2} k T C_1^2 \sqrt{m_{\perp}^2 m} \cdot \sqrt{\varepsilon_{\vec{k}}}} \quad (\text{VII.4})$$

Reescreveremos o tensor do tempo de relaxação no caso do espalhamento por fonões acústicos na forma:

$$\tau_{\parallel} = \frac{a_{\parallel}}{T\sqrt{\varepsilon}} ; \quad \tau_{\perp} = \frac{a_{\perp}}{T\sqrt{\varepsilon}} ; \quad a_{\parallel} = \frac{\pi C'_{11} h^4}{\sqrt{2} \cdot k C_1^2 \sqrt{m_{\perp}^2 m_{\parallel}}} \cdot \frac{1}{\phi_{0a}} ; \quad a_{\perp} = \frac{\pi C'_{11} h^4}{\sqrt{2} \cdot k C_1^2 \sqrt{m_{\perp}^2 m_{\parallel}}} \cdot \frac{1}{\phi_{1a}} ;$$

ϕ_{0a} e ϕ_{1a} dependem só das massas eficazes, das constantes elásticas C'_{11} e C'_{44} , e, das constantes do potencial de deformação.

Para o n-Ge tem-se [2,5,20]:

$$C'_{11}=1,592 \cdot 10^{+12} \text{ din}\cdot\text{cm}^{-2}, \quad C'_{44}=0,562 \cdot 10^{+12} \text{ din}\cdot\text{cm}^{-2}$$

As funções ϕ_{0a} e ϕ_{1a} , para os mínimos "germânicos" e "silícicos" apresentam-se na forma seguinte:

$$\left. \begin{aligned} \phi_{0a} &= 1 + 1,88 \frac{C_2}{C_1} + 1,03 \frac{C_2^2}{C_1^2} \\ \phi_{1a} &= 1 + 1,24 \frac{C_2}{C_1} + 0,870 \frac{C_2^2}{C_1^2} \end{aligned} \right\} \text{ para "Ge" e } \quad \left. \begin{aligned} \phi_{0a} &= 1 + 1,645 \frac{C_2}{C_1} + 1,03 \frac{C_2^2}{C_1^2} \\ \phi_{1a} &= 1 + 0,818 \frac{C_2}{C_1} + 0,688 \frac{C_2^2}{C_1^2} \end{aligned} \right\} \text{ para "Si"}$$

As fórmulas gerais para as funções ϕ_{0a} e ϕ_{1a} foram obtidas em [2] e são dadas a seguir:

$$\begin{aligned} \phi_{0a} &= 1 + \frac{2(1+\beta^2)}{\beta^2} \left(1 - \frac{3}{\beta^2} + \frac{3a}{\beta^3} \right) \frac{C_2}{C_1} + \\ &+ \frac{1+\beta^2}{\beta^4} \cdot \frac{C_2^2}{C_1^2} \left[\left(1 + \beta^2 \right) \left(1 - \frac{6}{\beta^2} - \frac{3}{2\beta^2(1+\beta^2)} + \frac{15a}{2\beta^3} \right) + \frac{C'_{11}}{C'_{44}} \left(2 + \frac{15}{2\beta^2} - \frac{3}{2\beta^3} (5+3\beta^2)a \right) \right] \\ \phi_{1a} &= 1 + \frac{1+\beta^2}{\beta^2} \left[2 + \frac{3}{\beta^2} - \frac{3(1+\beta^2)}{\beta^3} a \right] \frac{C_2}{C_1} + \\ &+ \frac{(1+\beta^2)}{\beta^4} \cdot \frac{C_2^2}{C_1^2} \cdot \left\{ \left(1 + \beta^2 \right) \left[1 + \frac{15}{4\beta^2} - \frac{3}{4\beta^3} (5+3\beta^2)a \right] + \frac{C'_{11}}{4C'_{44}} \left[-13 - \frac{15}{\beta^2} + \frac{3(1+\beta^2)}{\beta^3} (5+\beta^2)a \right] \right\}; \end{aligned}$$

onde,

$$a = \arctg \beta \quad \text{e} \quad \beta^2 = (m_3 - m_1) / m_1$$

Para diferentes parâmetros β , C_1 e C_2 , calcularemos ϕ_{0a} e ϕ_{1a} , mediante programas específicos, que podem ser observados nos anexos.

Nas relações (V.2) da página 41, calcularemos a derivada seguinte:

$$\frac{d \bar{f}_k}{d x_k} = -\bar{f}_k = -\exp(\bar{\mu} - E_i^*) \cdot \exp(-\varepsilon_k^{(i)*}) = -\exp(\bar{\mu} - E_i^*) \cdot \exp(-x) \quad .$$

Introduziremos a designação,

$$d_{01} = -d_0 = \frac{2\sqrt{2} \cdot e^2 \sqrt{m_{\parallel}}}{3\pi^2 h^3} (kT)^{3/2} \quad (\text{VII.5})$$

Os componentes do tensor de condutibilidade eléctrica terão a forma:

$$\sigma_{11}^{(i)} = d_{01} \cdot \exp\left(\frac{-\mu - E_i^*}{kT}\right) \int_0^\infty dx \cdot x^{3/2} \cdot \exp(-x) \cdot \tau_{\perp} ; \quad \sigma_{22}^{(i)} = d_{01} \cdot \exp\left(\frac{-\mu - E_i^*}{kT}\right) \int_0^\infty dx \cdot x^{3/2} \cdot \exp(-x) \cdot \tau_{\perp} ;$$

$$\sigma_{33}^{(i)} = d_{01} \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}} \cdot \exp\left(\frac{-\mu - E_i^*}{kT}\right) \int_0^\infty dx \cdot x^{3/2} \cdot \exp(-x) \cdot \tau_{\parallel} \quad (\text{VII.6})$$

Introduzindo a energia adimensional para os componentes do tensor do tempo de relaxação, teremos:

$$\tau_{\parallel} = \frac{a_{\parallel}}{T \sqrt{\frac{\varepsilon}{kT}} kT} = \frac{a_{\parallel}}{T \sqrt{kT}} x^{-1/2} ; \quad \tau_{\perp} = \frac{a_{\perp}}{T \sqrt{kT}} x^{-1/2} \quad (\text{VII.7})$$

Substituindo relações (V.7) em (V.6), encontraremos para os componentes do tensor da condutibilidade eléctrica σ_{ik} as expressões seguintes:

$$\sigma_{11}^{(i)} = d_{01} \exp\left(\frac{-\mu - E_i^*}{kT}\right) \cdot \frac{a_{\perp}}{T \sqrt{kT}} \int_0^\infty dx \cdot x \cdot e^{-x} = \frac{d_{01} a_{\perp}}{T \sqrt{kT}} \exp\left(\frac{-\mu - E_i^*}{kT}\right) ;$$

$$\sigma_{22}^{(i)} = \frac{d_{01} a_{\perp}}{T \sqrt{kT}} \exp\left(\frac{-\mu - E_i^*}{kT}\right) \quad \text{e} \quad \sigma_{33}^{(i)} = \frac{d_{01} a_{\parallel}}{T \sqrt{kT}} \cdot \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}} \exp\left(\frac{-\mu - E_i^*}{kT}\right) . \quad (\text{VII.8})$$

Sendo conhecidos os componentes do tensor $\hat{\sigma}$ para um mínimo de energia, poderíamos escrever o tensor da condutibilidade eléctrica para todo o cristal tomando em conta que sob a acção da deformação uniaxial ao longo do eixo [001], todos os mínimos de energia considerados ("germânicos" e "silícicos") subdividem-se em três grupos,, sendo 4 mínimos idênticos "germânicos" , 2 e 4 mínimos "silícicos" .

Assim no referencial laboratorial teremos para todo o cristal:

$$\tilde{\sigma}_{ik} = \sum_{r=1}^4 \tilde{\sigma}_{ik}^{(r)c} + \sum_{r=1}^2 \tilde{\sigma}_{ik}^{(r)s} + \sum_{r=1}^4 \tilde{\sigma}_{ik}^{(r)s} \quad (\text{VII.9})$$

Podemos reescrever relação (V.9), da maneira seguinte:

$$\tilde{\sigma}_{ik} = \tilde{\sigma}_{ik}^c + \tilde{\sigma}_{ik}^{s(1,2)} + \tilde{\sigma}_{ik}^{s(3,4,5,6)} \quad (\text{VII.9}')$$

Os componentes de $\tilde{\sigma}_{ik}^{(i)}$, podem ser calculados na base duma expressão semelhante, usada antes para transferir os componentes do tensor da deformação dum referencial para outro:

$$\tilde{\sigma}_{ik}^{(i)} = \sum_{l,m} a_{il}^{(i)} a_{km}^{(i)} \sigma_{lm}^{(i)} \quad (\text{VII.10})$$

Na relação (VII.10), a_{il} e a_{km} são matrizes de transição do referencial elipsoidal para o referencial laboratorial que coincide com o cristalográfico. Tomando em conta que no referencial elipsoidal $\tilde{\sigma}_{ik}^{(i)}$ é um tensor diagonal, relação (VII.10) tem a forma explícita seguinte:

$$\tilde{\sigma}_{ik}^{(i)} = \sum_{l,m} a_{il}^{(i)} a_{km}^{(i)} \sigma_{lm}^{(i)} = \sum_l a_{il}^{(i)} a_{kl}^{(i)} \sigma_{ll}^{(i)} = a_{i1}^{(i)} a_{k1}^{(i)} \sigma_{11}^{(i)} + a_{i2}^{(i)} a_{k2}^{(i)} \sigma_{22}^{(i)} + a_{i3}^{(i)} a_{k3}^{(i)} \sigma_{33}^{(i)} \quad (\text{VII.11})$$

Notaremos que,

$$\sigma_{11}^{(i)} = \sigma_{22}^{(i)} \neq \sigma_{33}^{(i)}.$$

Consideraremos no início os mínimos "germânicos":

1º Mínimo

$$\tilde{\sigma}_{11}^{(i)} = (a_{11}^{(i)} a_{11}^{(i)} + a_{12}^{(i)} a_{12}^{(i)}) \sigma_{11}^{(i)} + a_{13}^{(i)} a_{13}^{(i)} \sigma_{33}^{(i)} = \left(\frac{1}{6} + \frac{1}{2} \right) \sigma_{11}^{(i)} + \frac{1}{3} \sigma_{33}^{(i)} = \frac{1}{3} (2\sigma_{11}^{(i)} + \sigma_{33}^{(i)}) .$$

Cálculos idênticos, conduzem-nos aos resultados seguintes:

$$\tilde{\sigma}_{22}^{(i)} = \tilde{\sigma}_{33}^{(i)} = \frac{1}{3} (2\sigma_{11}^{(i)} + \sigma_{33}^{(i)}) \quad \text{e} \quad \tilde{\sigma}_{12}^{(i)} = \tilde{\sigma}_{13}^{(i)} = \tilde{\sigma}_{23}^{(i)} = \frac{1}{3} (-\sigma_{11}^{(i)} + \sigma_{33}^{(i)}) .$$

Segundo o princípio de Onzager, verificaremos que $\tilde{\sigma}_{ik} = \tilde{\sigma}_{ki}$. Cálculos permitem confirmar este facto, pois,

$$\tilde{\sigma}_{21}^{(i)} = \tilde{\sigma}_{31}^{(i)} = \tilde{\sigma}_{32}^{(i)} = \frac{1}{3} (-\sigma_{11}^{(i)} + \sigma_{33}^{(i)}) .$$

Nos procedimentos futuros omitiremos os índices, que numeram os mínimos na parte direita nas expressões dos componentes do tensor $\hat{\sigma}^{(i)}$ para um determinado grupo de mínimos.

A forma geral do tensor $\hat{\sigma}^{(i)}$ no referencial laboratorial é:

$$\hat{\sigma}^{(i)} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{33} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad \hat{\sigma}^{(i)} = \begin{pmatrix} \oplus & \oplus & \oplus \\ \oplus & \ominus & \oplus \\ \oplus & \oplus & \ominus \end{pmatrix} .$$

2º Mínimo

$$\tilde{\sigma}_{11}^{(2)} = \tilde{\sigma}_{22}^{(2)} = \tilde{\sigma}_{33}^{(2)} = \frac{1}{3} (2\sigma_{11}^{(2)} + \sigma_{33}^{(2)}) \quad \text{e} \quad \tilde{\sigma}_{13}^{(2)} = -\tilde{\sigma}_{12}^{(2)} = -\tilde{\sigma}_{23}^{(2)} = \frac{1}{3} (-\sigma_{11}^{(2)} + \sigma_{33}^{(2)}) .$$

A forma geral do respectivo tensor no referencial laboratorial é:

$$\hat{\sigma}^{(2)} = \begin{pmatrix} \ominus & \ominus & \oplus \\ \ominus & \ominus & \ominus \\ \oplus & \ominus & \ominus \end{pmatrix}$$

3º Mínimo

$$\overset{-}{\sigma}_{11} = \overset{-}{\sigma}_{22} = \overset{-}{\sigma}_{33} = \frac{1}{3}(2\overset{-}{\sigma}_{11}^{(3)} + \overset{-}{\sigma}_{33}^{(3)}), \quad \overset{-}{\sigma}_{12} = -\overset{-}{\sigma}_{13} = -\overset{-}{\sigma}_{23} = \frac{1}{3}(-\overset{-}{\sigma}_{11}^{(2)} + \overset{-}{\sigma}_{33}^{(2)}).$$

A forma geral do respectivo tensor no referencial laboratorial é:

$$\hat{\sigma}^{(3)} = \begin{pmatrix} \ominus & \oplus & \ominus \\ \oplus & \ominus & \ominus \\ \ominus & \ominus & \ominus \end{pmatrix}$$

4º Mínimo

$$\overset{-}{\sigma}_{11} = \overset{-}{\sigma}_{22} = \overset{-}{\sigma}_{33} = \frac{1}{3}(2\overset{-}{\sigma}_{11}^{(4)} + \overset{-}{\sigma}_{33}^{(4)}), \quad -\overset{-}{\sigma}_{13} = -\overset{-}{\sigma}_{12} = \overset{-}{\sigma}_{23} = \frac{1}{3}(-\overset{-}{\sigma}_{11}^{(4)} + \overset{-}{\sigma}_{33}^{(4)}).$$

A forma geral do tensor correspondente no referencial laboratorial é:

$$\hat{\sigma}^{(4)} = \begin{pmatrix} \ominus & \ominus & \ominus \\ \ominus & \ominus & \oplus \\ \ominus & \oplus & \ominus \end{pmatrix}$$

Consideraremos em seguida os mínimos "silícicos".

Mínimos 1 e 2.

$$\overset{-}{\sigma}_{11}^{s(1,2)} = \overset{-}{\sigma}_{22}^{s(1,2)} = \overset{-}{\sigma}_{11} \quad \text{e} \quad \overset{-}{\sigma}_{33}^{s(1,2)} = \overset{-}{\sigma}_{33}; \quad \overset{-}{\sigma}_{12}^{s(1,2)} = \overset{-}{\sigma}_{13}^{s(1,2)} = \overset{-}{\sigma}_{23}^{s(1,2)} = 0$$

Mínimos 3 e 4.

$$\overset{-}{\sigma}_{11}^{s(3,4)} = \overset{-}{\sigma}_{33}^{s(3,4)} = \overset{-}{\sigma}_{11} \quad \text{e} \quad \overset{-}{\sigma}_{22}^{s(3,4)} = \overset{-}{\sigma}_{33}; \quad \overset{-}{\sigma}_{12}^{s(3,4)} = \overset{-}{\sigma}_{13}^{s(3,4)} = \overset{-}{\sigma}_{23}^{s(3,4)} = 0$$

Mínimos 5 e 6

$$\overset{-}{\sigma}_{22}^{s(5,6)} = \overset{-}{\sigma}_{33}^{s(5,6)} = \overset{-}{\sigma}_{11} \quad \text{e} \quad \overset{-}{\sigma}_{11}^{s(5,6)} = \overset{-}{\sigma}_{33}; \quad \overset{-}{\sigma}_{12}^{s(5,6)} = \overset{-}{\sigma}_{13}^{s(5,6)} = \overset{-}{\sigma}_{23}^{s(5,6)} = 0$$

As formas gerais respectivas dos tensores para os mínimos "silícicos" serão:

$$\hat{\sigma}^{s(1,2)} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}^{s(3,4)} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{33} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{11} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \hat{\sigma}^{s(5,6)} = \begin{pmatrix} \sigma_{33} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{11} \end{pmatrix}$$

Podemos escrever agora as expressões para componentes do tensor $\hat{\sigma}$ para todo o cristal, como inteiro.

Evidentemente, é mais fácil calcular todos os componentes de cada termo na relação (VII.9).

$$\sum_{i=1}^4 \overset{\sim}{\sigma}_{ik} = \overset{\sim}{\sigma}_{1k} + \overset{\sim}{\sigma}_{2k} + \overset{\sim}{\sigma}_{3k} + \overset{\sim}{\sigma}_{4k} \equiv \overset{\sim}{\sigma} \quad \text{e} \quad \sum_{i=1}^4 \overset{\sim}{\sigma}_{11} = \frac{4}{3} (2\overset{\sim}{\sigma}_{11} + \overset{\sim}{\sigma}_{33}) = \sum_{i=1}^4 \overset{\sim}{\sigma}_{22} = \sum_{i=1}^4 \overset{\sim}{\sigma}_{33} = \overset{\sim}{\sigma}_{\parallel}$$

Dado que $\overset{\sim}{\sigma}_{11} = \overset{\sim}{\sigma}_{\perp}$ e $\overset{\sim}{\sigma}_{33} = \overset{\sim}{\sigma}_{\parallel}$, fazendo $K^c = \frac{\overset{\sim}{\sigma}_{\perp}}{\overset{\sim}{\sigma}_{\parallel}}$, teremos:

$$\overset{\sim}{\sigma}_{\parallel} = \frac{4}{3} (2\overset{\sim}{\sigma}_{11} + \overset{\sim}{\sigma}_{33}) = \frac{4}{3} \overset{\sim}{\sigma}_{33} (2K^c + 1),$$

em que K^c é o parâmetro da anisotropia dos mínimos "germânicos" ou L_1 mínimos.

Para parâmetro de anisotropia [1,2,5] no caso do espalhamento dos electrões só por fonões acústicos, teremos:

$$K^c = \frac{\frac{d_{01} a_{\perp}^c}{T \sqrt{kT}} \exp\left(\frac{\mu - E_i^{*c}}{kT}\right)}{\frac{d_{01} a_{\parallel}^c}{T \sqrt{kT}} \cdot \frac{m_{\perp}^c}{m_{\parallel}^c} \exp\left(\frac{\mu - E_i^{*c}}{kT}\right)} = \frac{a_{\perp}^c}{a_{\parallel}^c} \cdot \frac{m_{\parallel}^c}{m_{\perp}^c}$$

Sublinhemos, que de vez em quando introduz-se o parâmetro da anisotropia dos tempos de relaxação, que se define como segue [1,2,5]:

$$K_r = \frac{\tau_{\perp}}{\tau_{\parallel}},$$

que no caso dos fonões acústicos é de $K_r = \frac{a_{\perp}}{a_{\parallel}}$ e o parâmetro da anisotropia das massas eficazes

$$K_m = \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}}, \text{ por isso o parâmetro da anisotropia é } K = \frac{a_{\perp} m_{\parallel}}{a_{\parallel} m_{\perp}} = \frac{K_r}{K_m}.$$

Procuraremos obter em seguida, os componentes não diagonais relacionados com os mínimos "germânicos".

$$\overset{\sim}{\sigma}_{12} = \overset{\sim}{\sigma}_{12} + \overset{\sim}{\sigma}_{12} + \overset{\sim}{\sigma}_{12} + \overset{\sim}{\sigma}_{12} = -\frac{1}{3} \overset{\sim}{\sigma}_{11} + \frac{1}{3} \overset{\sim}{\sigma}_{33} + \frac{1}{3} \overset{\sim}{\sigma}_{11} - \frac{1}{3} \overset{\sim}{\sigma}_{33} - \frac{1}{3} \overset{\sim}{\sigma}_{11} + \frac{1}{3} \overset{\sim}{\sigma}_{33} + \frac{1}{3} \overset{\sim}{\sigma}_{11} - \frac{1}{3} \overset{\sim}{\sigma}_{33} = 0$$

Cálculos idênticos fornecem-nos o resultado seguinte:

$$\overset{\sim}{\sigma}_{13} = \overset{\sim}{\sigma}_{23} = 0$$

Assim, no referencial laboratorial temos a forma seguinte para o tensor $\overset{\sim}{\sigma}_{ik}^c$:

$$\overset{\sim}{\sigma}^c = \frac{4}{3} \overset{\sim}{\sigma}_{33}^{c(1)} (2K^c + 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Sublinha-se aqui, que $\overset{\sim}{\sigma}_{33}^{c(1)}$ é a condutibilidade eléctrica longitudinal (ao longo do eixo 3) para um mínimo de energia.

Como se vê, o tensor acima para quatro mínimos "germânicos" regenera-se ao escalar, facto que acontece, devido ao sentido da força deformável, pois sob $P// [001]$, todos os mínimos "germânicos" tornam-se equivalentes.

Encontraremos o tensor relacionado com os mínimos "silícicos" $\overset{\sim}{\sigma}^{s(1,2)}$, situados ao longo dos eixos $[001]$ e $[00\bar{1}]$, que descem na escala de energia sob a deformação uniaxial de compressão $P//[001]$.

$$\overset{\sim}{\sigma}_{ik}^{s(1,2)} = \sum_{r=1}^2 \overset{\sim}{\sigma}_{ik}^{s(r)-2} = \overset{\sim}{\sigma}_{ik}^{s(1)} + \overset{\sim}{\sigma}_{ik}^{s(2)} \quad (\text{VII.12})$$

$$\overset{\sim}{\sigma}_{11}^{s(1,2)} = \overset{\sim}{\sigma}_{22}^{s(1,2)} = \overset{\sim}{\sigma}_{11}^{s(1)} + \overset{\sim}{\sigma}_{11}^{s(2)} = \overset{\sim}{\sigma}_{11} + \overset{\sim}{\sigma}_{11} = 2\overset{\sim}{\sigma}_{11} ; \overset{\sim}{\sigma}_{33}^{s(1,2)} = 2\overset{\sim}{\sigma}_{33} , \overset{\sim}{\sigma}_{ik}^{s(1,2)} = 0 \text{ para } i \neq k .$$

Teremos portanto,

$$\overset{\sim}{\sigma}_{ik}^{s(1,2)} = 2 \begin{pmatrix} \overset{\sim}{\sigma}_{11}^{s(1)} & 0 & 0 \\ 0 & \overset{\sim}{\sigma}_{11}^{s(1)} & 0 \\ 0 & 0 & \overset{\sim}{\sigma}_{33}^{s(1)} \end{pmatrix} = 2\overset{\sim}{\sigma}_{33}^{s(1)} \begin{pmatrix} K^s & 0 & 0 \\ 0 & K^s & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} .$$

Onde $\overset{\sim}{\sigma}_{33}^{s(1)} = \sigma_{//}^{s(1)}$ é a condutibilidade eléctrica paralela (ao longo do eixo 3) para um mínimo de energia e o parâmetro de anisotropia dos mínimos "silícicos" é:

$$K^s = \frac{\overset{\sim}{\sigma}_{11}^{s(1)}}{\overset{\sim}{\sigma}_{33}^{s(1)}} = \frac{a_{\perp}^s}{a_{//}^s} \cdot \frac{m_{//}^s}{m_{\perp}^s} = \frac{K_{\tau}^s}{K_m^s} .$$

Consideraremos quatro mínimos "silícicos", situados ao longo dos eixos $[010]$, $[0\bar{1}0]$, $[100]$ e $[10\bar{0}]$.

Estes mínimos, como estabelecemos antes, sobem na escala de energia sob a deformação uniaxial de compressão $P// [001]$ e por isso ficam praticamente sem electrões.

Mas teoricamente é interessante obter a expressão analítica do tensor $\overset{\sim}{\sigma}$ tomando em conta futuras generalizações (por exemplo, os casos $P//[001]$).

$$\overset{\sim}{\sigma}_{ik}^{s(3-6)} = \sum_{r=3}^6 \overset{\sim}{\sigma}_{ik}^{s(r)} = \overset{\sim}{\sigma}_{ik}^{s(3)} + \overset{\sim}{\sigma}_{ik}^{s(4)} + \overset{\sim}{\sigma}_{ik}^{s(5)} + \overset{\sim}{\sigma}_{ik}^{s(6)}$$

$$\overset{\sim}{\sigma}_{11}^{s(3-6)} = \overset{\sim}{\sigma}_{22}^{s(3-6)} = 2\overset{\sim}{\sigma}_{11} + 2\overset{\sim}{\sigma}_{33} , \quad \overset{\sim}{\sigma}_{33}^{s(3-6)} = 4\overset{\sim}{\sigma}_{11} , \quad \overset{\sim}{\sigma}_{12}^{s(3-6)} = \overset{\sim}{\sigma}_{13}^{s(3-6)} = \overset{\sim}{\sigma}_{23}^{s(3-6)} = 0 .$$

Os elementos diagonais do tensor podem ser rescritos como segue:

$$\overset{\sim}{\sigma}_{11}^{s(3-6)} = \overset{\sim}{\sigma}_{22}^{s(3-6)} = 2\overset{\sim}{\sigma}_{33} (K^s + 1) , \quad \overset{\sim}{\sigma}_{33}^{s(3-6)} = 4\overset{\sim}{\sigma}_{33} K^s .$$

Podemos escrever na forma explícita o tensor para estes quatro mínimos:

à

$$\sigma_{ik}^{s(3-6)} = 2 \begin{pmatrix} \sigma_{11} + \sigma_{33} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} + \sigma_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 2\sigma_{33} \end{pmatrix} = 2\sigma_{33} \begin{pmatrix} K^s + 1 & 0 & 0 \\ 0 & K^s + 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2K^s \end{pmatrix}.$$

Usando agora a relação (VII.9'), obteremos os componentes do tensor $\hat{\sigma}$:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\sigma}_{11} &= \tilde{\sigma}_{11}^c + \tilde{\sigma}_{11}^{s(1,2)} + \tilde{\sigma}_{11}^{s(3-6)} = \frac{4}{3} \sigma_{33}^c (2K^c + 1) + 2\sigma_{33}^{s(1)} K^s + 2\sigma_{33}^{s(3-6)} (K^s + 1) \\ \tilde{\sigma}_{22} &= \frac{4}{3} \sigma_{33}^c (2K^c + 1) + 2\sigma_{33}^{s(1)} K^s + 2\sigma_{33}^{s(3-6)} (K^s + 1) \\ \tilde{\sigma}_{33} &= \frac{4}{3} \sigma_{33}^c (2K^c + 1) + 2\sigma_{33}^{s(1)} + 4\sigma_{33}^{s(3-6)} K^s \end{aligned} \right\} \quad (\text{VII.13})$$

Podemos reescrever as relações (V.13), sem o uso dos parâmetros de anisotropia, como indicamos a seguir:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\sigma}_{11} &= \frac{4}{3} (2\sigma_{11}^c + \sigma_{33}^c) + 2\sigma_{11}^{s(1)} + 2(\sigma_{11}^{s(3-6)} + \sigma_{33}^{s(3-6)}) \\ \tilde{\sigma}_{22} &= \frac{4}{3} (2\sigma_{11}^c + \sigma_{33}^c) + 2\sigma_{11}^{s(1)} + 2(\sigma_{11}^{s(3-6)} + \sigma_{33}^{s(3-6)}) \\ \tilde{\sigma}_{33} &= \frac{4}{3} (2\sigma_{11}^c + \sigma_{33}^c) + 2\sigma_{33}^{s(1)} + 4\sigma_{11}^{s(3-6)} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VII.14})$$

Obteremos de seguida, na forma explícita as expressões para os componentes do tensor da condutibilidade eléctrica para um mínimo "germânico" e para um mínimo "silício" :

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^c &= \frac{d_{01}^c a_{\perp}^c}{T \sqrt{kT}} \exp(\mu - E_i^*) = \frac{d_{01}^c a_{\perp}^c}{T \sqrt{kT}} e^{-E_i^*} e^{\mu} \frac{4m_N^{(c)3/2} + 6m_N^{(s)3/2} e^{-\Delta E^*}}{4m_N^{(c)3/2} e^{-E_i^*} + 2m_N^{(s)3/2} e^{-\Delta E^*} (e^{-E_i^{(1)*}} + 2e^{-E_i^{(2)*}})} = \\ &= \frac{d_{01}^c a_{\perp}^c}{T \sqrt{kT}} e^{-E_i^*} \frac{N_0 (4m_N^{(c)3/2} + 6m_N^{(s)3/2} e^{-\Delta E^*})}{4 \cdot 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(c)2} m_{\parallel}^c)^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} + 6 \cdot 2 \frac{(2\pi kT)^{3/2} (m_{\perp}^{(s)2} m_{\parallel}^s)^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\Delta E^*}} \\ & \cdot \frac{1}{4m_N^{(c)3/2} e^{-E_i^*} + 2m_N^{(s)3/2} e^{-\Delta E^*} (e^{-E_i^{(1)*}} + e^{-E_i^{(2)*}})} \end{aligned}$$

Reestruturando e simplificando obteremos expressão que mostramos a seguir:

$$\sigma_{11}^c \equiv \sigma_{22}^c = \frac{N_0 n_c e^2}{m_{\perp}^c} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\perp}^c}{T \sqrt{kT}} \quad (\text{VII.15})$$

E por analogia obtem-se o terceiro componente σ_{33}^c ,

$$\sigma_{33}^c = \frac{N_0' n_c e^2}{m_{||}^c} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{||}^c}{T \sqrt{\pi k T}} \quad (\text{VII.16})$$

Para os mínimos "silícicos", obtêm-se também por analogia os componentes $\sigma_{11}^{s(1,2)}$, $\sigma_{33}^{s(1,2)}$, $\sigma_{11}^{s(3-6)}$ e $\sigma_{33}^{s(3-6)}$, que mostramos a seguir:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{11}^{s(1,2)} &= \frac{N_0' n_1^s e^2}{m_{\perp}^s} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\perp}^s}{T \sqrt{\pi k T}} \\ \sigma_{33}^{s(1,2)} &= \frac{N_0' n_1^s e^2}{m_{||}^s} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{||}^s}{T \sqrt{\pi k T}} \\ \sigma_{11}^{s(3-6)} &= \frac{N_0' n_2^s e^2}{m_{\perp}^s} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\perp}^s}{T \sqrt{\pi k T}} \\ \sigma_{33}^{s(3-6)} &= \frac{N_0' n_2^s e^2}{m_{||}^s} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{||}^s}{T \sqrt{\pi k T}} \end{aligned} \right\} \quad (\text{VII.17})$$

Substituindo nas fórmulas (VII.14), as relações (VII.15), (VII.16) e (VII.17), obteremos as formas explícitas dos componentes do tensor da condutibilidade eléctrica:

$$\tilde{\sigma}_{11} = \frac{8}{9} \cdot \frac{N_0' e^2}{T \sqrt{\pi k T}} \cdot 2 \left(\frac{2n_c}{m_{\perp}^c} a_{\perp}^c + \frac{n_c}{m_{||}^c} a_{||}^c \right) + \frac{8}{3} \cdot \frac{N_0' e^2}{T \sqrt{\pi k T}} \cdot \frac{n_1^s}{m_{\perp}^s} a_{\perp}^s + \frac{8}{3} \cdot \frac{N_0' e^2}{T \sqrt{\pi k T}} \left(\frac{n_2^s}{m_{\perp}^s} a_{\perp}^s + \frac{n_2^s}{m_{||}^s} a_{||}^s \right)$$

Agrupando os termos semelhantes, obteremos a expressão mais resumida para este tensor da condutibilidade eléctrica:

$$\tilde{\sigma}_{11} = \frac{8}{3} \cdot \frac{N_0' e^2}{T \sqrt{\pi k T}} \left[\frac{2n_c}{3} \left(2 \frac{a_{\perp}^c}{m_{\perp}^c} + \frac{a_{||}^c}{m_{||}^c} \right) + n_1^s \frac{a_{\perp}^s}{m_{\perp}^s} + n_2^s \left(\frac{a_{\perp}^s}{m_{\perp}^s} + \frac{a_{||}^s}{m_{||}^s} \right) \right] \quad (\text{VII.18})$$

Obteremos por analogia o outro componente deste tensor:

$$\tilde{\sigma}_{33} = \frac{8}{3} \cdot \frac{N_0' e^2}{T \sqrt{\pi k T}} \left[\frac{2n_c}{3} \left(2 \frac{a_{\perp}^c}{m_{\perp}^c} + \frac{a_{||}^c}{m_{||}^c} \right) + n_1^s \frac{a_{||}^s}{m_{||}^s} + 2n_2^s \frac{a_{\perp}^s}{m_{\perp}^s} \right] \quad (\text{VII.19})$$

Sob as temperaturas do nitrogénio líquido o terceiro termo em (VII.18) e (VII.19) é desprezível, pelo que, neste intervalo de temperaturas as mesmas relações tem forma mais simples:

$$\tilde{\sigma}_{11} = \frac{8}{3} \cdot \frac{N_0' e^2}{T \sqrt{\pi k T}} \left[\frac{2n_c}{3} \left(2 \frac{a_{\perp}^c}{m_{\perp}^c} + \frac{a_{||}^c}{m_{||}^c} \right) + n_1^s \frac{a_{\perp}^s}{m_{\perp}^s} \right], \quad (\text{VII.18'})$$

$$\tilde{\sigma}_{33} = \frac{8}{3} \cdot \frac{N_0' e^2}{T \sqrt{\pi k T}} \left[\frac{2n_c}{3} \left(2 \frac{a_{\perp}^c}{m_{\perp}^c} + \frac{a_{||}^c}{m_{||}^c} \right) + n_1^s \frac{a_{||}^s}{m_{||}^s} \right], \quad (\text{VII.19'})$$

Para efectuar cálculos numéricos é necessário conhecer as constantes $a_{\perp}^{c,s}$ e $a_{\parallel}^{c,s}$.

No caso em que a condutibilidade eléctrica calcula-se na presença da deformação, introduziremos a designação $\sigma_{ik} = \sigma_{ik}(P)$ e na ausência da deformação teremos a designação $\sigma_{ik} = \sigma_{ik}(0)$.

VIII: Tensor da resistividade eléctrica.

Calcularemos os componentes do tensor da resistividade eléctrica, que como se sabe podem ser expressos através dos componentes do tensor da condutibilidade eléctrica $\hat{\sigma}$ segundo a relação:

$$\rho_{ik} = \frac{A_{ki}}{\left| \hat{\sigma} \right|}, \quad (\text{VIII.1})$$

onde A_{ki} é o complemento algébrico do elemento $\tilde{\sigma}_{ki}$ do determinante $\left| \hat{\sigma} \right|$, cujos componentes são elementos do tensor da condutibilidade eléctrica.

Sendo assim teremos:

$$\rho_{11} \equiv \rho_{22} = \frac{\tilde{\sigma}_{22} \tilde{\sigma}_{33}}{\tilde{\sigma}_{11} \tilde{\sigma}_{22} \tilde{\sigma}_{33}} = \frac{1}{\tilde{\sigma}_{11}} \quad ; \quad \rho_{33} = \frac{1}{\tilde{\sigma}_{33}}, \quad (\text{VIII.2})$$

onde $\tilde{\sigma}_{11}$ e $\tilde{\sigma}_{33}$ são dados pelas relações (VII.18) e (VII.19).

Introduziremos as designações $\rho_{ik} = \rho_{ik}(P)$ e $\rho_{ik} = \rho_{ik}(0)$, nos casos em que a resistividade eléctrica é calculada na presença ou na ausência da deformação respectivamente.

Os resultados dos cálculos teóricos estão em boa concordância qualitativa com os resultados experimentais de acordo com as figs.12 e 13.

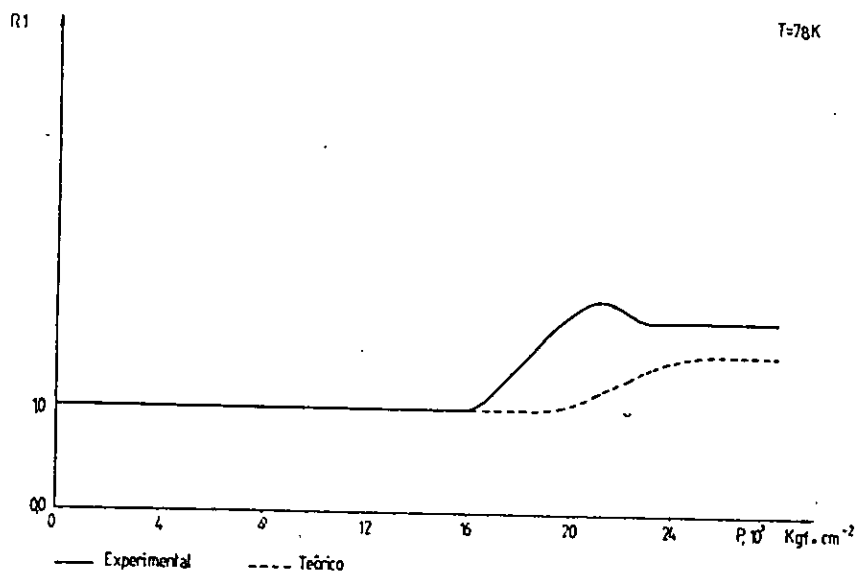


Fig.12: Gráfico da razão $\rho_{11}(p)/\rho_{11}(0)$, experimental e teórico.

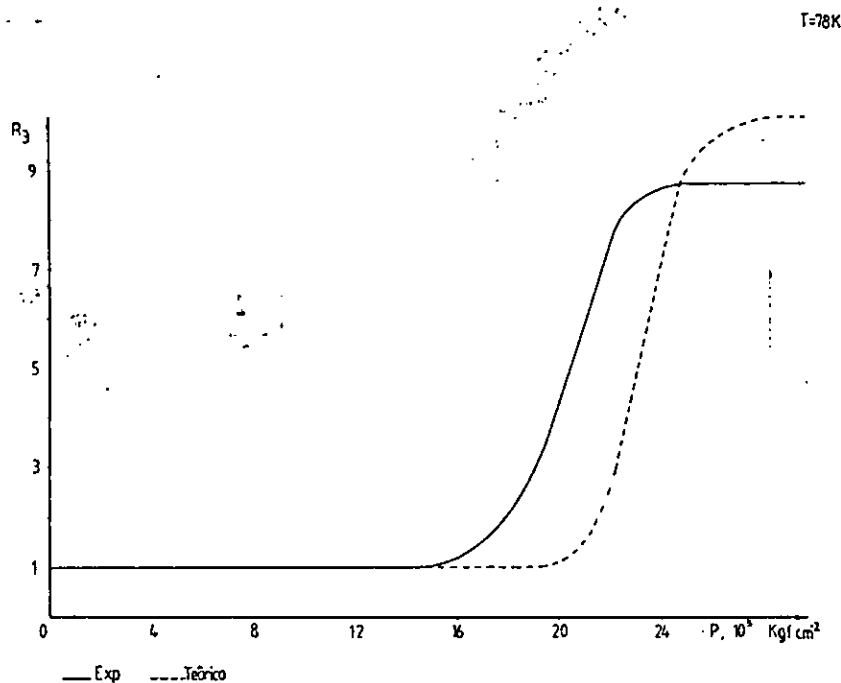


Fig.13: Gráfico da razão $\rho_{33}(p)/\rho_{33}(0)$, experimental e teórico.

IX. Conclusão.

1) Investigação bibliográfica realizada permitiu esclarecer as causas principais do surgimento da piezoresistência nos monocristais dos semicondutores clássicos com muitos mínimos na superfície de energia constante, métodos da medição da piezoresistência e aplicação prática deste efeito.

2) A deformação elástica uniaxial (DEU) dos monocristais do n-Ge orientada ao longo dos eixos assimétricos em relação aos mínimos absolutos L_1 da banda de condução provoca o deslocamento diferente destes mínimos na escala da energia e, conseqüentemente, a redistribuição dos electrões entre eles o que, por seu turno, leva o surgimento da dependência da resistividade em função da deformação aplicada, ou a piezoresistência de Herring-Smith.

3) A DEU orientada ao longo dos eixos simétricos em relação aos mínimos L_1 da banda de condução provoca o deslocamento uniforme na escala da energia dos mínimos absolutos L_1 da C-banda e deslocamento diferente dos Δ_1 mínimos o que sob tensões $P > 15000$ Kgf/cm² leva a redistribuição dos electrões entre L_1 e Δ_1 mínimos e, conseqüentemente, o surgimento da piezoresistência cujo mecanismo é diferente do conhecido da piezoresistência de Herring-Smith.

4) Foi mostrado que no caso da tensão P aplicada paralelamente aos eixos cristalográficos do tipo $[001]$ os L_1 e Δ_1 mínimos subdividem-se em três grupos:

- quatro L_1 mínimos que sobem na escala de energia,
- dois Δ_1 mínimos orientados ao longo do eixo da deformação, que descem na escala da energia,
- quatro Δ_1 mínimos perpendiculares ao eixo da deformação, que sobem na escala da energia.

5) No caso da tensão $P//[001]$ foram obtidas as expressões analíticas para os números de preenchimento dos L_1 e Δ_1 mínimos que descrevem a redistribuição dos electrões dos electrões entre diferentes grupos de mínimos em função da tensão aplicada e da temperatura.

6) Cálculos numéricos realizados permitiram analisar detalhadamente a cinética do deslocamento dos mínimos da energia na presença da DEU e investigar a possibilidade da inversão $L_1 \rightarrow \Delta_1$ mínimos.

7) Usando a teoria do espalhamento anisotrópico foram obtidas pela primeira vez e analisadas numericamente as expressões para o tensor da condutibilidade eléctrica e tensor da resistividade dos monocristais do n-Ge sujeitos a acção da DEU tomando em conta L_1 e Δ_1 mínimos.

8) Os resultados dos cálculos numéricos da resistividade supondo que os electrões espalham-se só por fonões acústicos estão em boa coincidência qualitativa com os dados experimentais.

X. Recomendações.

1. Os resultados obtidos neste trabalho podem ser usados para a explicação dos dados experimentais na área da física dos semicondutores.

2. Devido ao deslocamento na escala da energia e posterior inversão dos mínimos L_1 e Δ_1 de energia provocados pela DEU, os resultados obtidos permitem modelar o comportamento dos semicondutores mais complicados mais complicados, onde não existe até agora a teoria microscópica adequada para explicar as suas propriedades electrofísicas.

3. Na área da tecnologia e aplicação dos tensosensores os resultados obtidos representam por si um interesse especial sobretudo as dependências $\rho_{ik} = \rho_{ik}(P)$, que devem ser tomadas em conta e usadas para a construção dos tensosensores.

4. A teoria desenvolvida deve ser tomada em conta na área da tecnologia dos materiais e dispositivos semicondutores com estrutura energética mais complicada, por exemplo: heteroestruturas, elementos fotovoltaicos, com a finalidade de otimizar o seu uso.

5. A investigação realizada deve ser usada na investigação teórica posterior ligada com o estudo detalhado dos mecanismos do espalhamento dos portadores de carga no modelo considerado com o fim de obter a coincidência quantitativa das previsões teóricas e os dados experimentais, e, precisar alguns parâmetros muito importantes da estrutura de bandas.

6. Os conhecimentos adquiridos podem ser usados durante o leccionamento das disciplinas ligadas com a área das propriedades físicas da matéria condensada.

XI. Referências Bibliográficas.

- [1]. Baranskii P.I., Klochkov V.P., Potikevich I.V. **Electrónica de semicondutores**. Kiev, "Naukova Dumka", 1975.
- [2]. Baranskii P.I., Buda I.S., Dakhovskii I.V., Kolomoets V.V. **Fenómenos eléctricos e galvanomagnéticos nos semicondutores anisotrópicos**. Kiev, "Naukova Dumka", 1977.
- [3]. Herring C. **Transport properties of many-Valley Semiconductor**. Bell Syst. Techn Journ., 1955, v.34, p237.
- [4]. Smith C.S. **Piezoresistance Effect in Germanium and Silicon**. Phys. Rev., 1954, v.94, p42.
- [5]. Herring C., Vogt E. **Transport and Deformation Potencial Theory for Many-Valley Semiconductors with anisotropic scattering**. Phys. Rev., 1956, v.101, p.944.
- [6]. F.J.Morin, T.M.Geballe and C.Herring. **Temperature Dependence of the Piezoresistance of High-Purity Silicon and Germanium**. Phys. Rev, 1957, v.105 N2, p.525.
- [7]. Zeeger K. **Semiconductor Physics**, Springer-Verlag, Wien New York, 1973.
- [8]. Anselm A.I. **Introduction to Semiconductor Theory** (English translation), MIR Publisher, Moscow and Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J. 1981.
- [9]. Shyh Wang . **Fundamentals of Semiconductor Theory an Device Physics**. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, USA, 1989.
- [10]. Baranskii P.I., Buda I.S., Dakhovskii I.V. **Teoria dos fenómenos termoeléctricos e termomagnéticos em semicondutores anisotrópicos**. "Naukova Dumka", 1987.
- [11]. Buda I.S. **Theory of an anisotropic thermoelectric refrigerator in magnetic field**. J. Eng. Thermophys.(USA), v.66, N6, p.729-32 (june 1994).
- [12]. Buda I.S. **Theory of an anisotropic thermoelectric cooler in magnetic field**. Phys. Status Solidi A (Germany), v.147, N2, p.491-6 (16 Feb. 1995).
- [13]. Buda I.S. **Thermoelectric figure of merit of cubic-symmetry semiconductors in the phonon drag region**. Ukr. Fiz. Zh (Ukrainian SSR), v.35, N2, p.243-7 (Feb.1990).
- [14]. Yuheng Li (Motorolla Inc., Schaunburg, Il., USA), S. Danyluk. **Dinamic measurement of damage generation in single crystal silicon due to sliding contact with a spherical diamond**. Wear(Switzerland), v.200, N1-2, p238-43 (1996).

- [15]. K.R. Farmer, T.G. Digges. A miniature fiber sensor keeps pressure under control. *Photonic Spectra(USA)*, v.30, N18, p128-129 (1996).
- [16]. Hauptman M.A., Grattan K.T.V., Palmer A.W., Fritsch H. Silicon resonator sensor system using self-mixing interferometry. *Sens.Actuators A. Phys. (Switzerland)* v.A55, N2-3, p71-7 (1996).
- [17]. *Tensosensores Semicondutores*. Sob a redacção do M.Dina. M.-L., "Energia" (URSS), 1965.
- [18]. Arsenieva-Gueil A.N. *Aplicação dos Semicondutores em tensometria. Semicondutores em ciência e técnica*. M.-L, edição da AC URSS, 1958, 2.
- [19]. Kittel C. *Introduction to Solid State Physics*, 4th edition, John Wiley and Sons, Inc., N-Y.
- [20]. Tchernych V., Gritscutchouk V. Efeito longitudinal de Nernst-Ettingshausen. *Ciência e Tecnologia*, N11, p.13-21 (1986).
- [21]. Tchernych V., Buda I., Melnic N. Piezodistribuição dos electrões entre $\langle 100 \rangle$ e $\langle 111 \rangle$ mínimos da energia nos monocristais $Ge_{1-x}Si_x$. *Propriedades termoeléctricas dos monocristais $Ge_{1-x}Si_x$. IV Jornadas de Engenharia e Ciências Naturais de Moçambique*. Resumo das comunicações, p48 (1992).
- [22]. Craddock R. Sensors based on silicon strain gauges. IEE Colloquium on "Sensing via strain" (Digest N 1993/191), London, UK, 22 Oct. 1993 (London, UK; IEE 1993), p5/1-4.
- [23]. Davidson J.L. Electronic and sensing properties of diamond. *Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng. (USA)*, v.2151, p133-44 (1994).
- [24]. Wur D.R., Davidson J.L., Weng Poo Kang, Kinser D.L. Polycrystalline diamond pressure sensor. *J. Microelectromech. Syst. (USA)*, v.4, N1, p34-41 (1995).
- [25]. Rosenberg Z., Brar N.S. The influence of the elasto-plastic properties of piezoresistance gauge on their load/unloading characteristics as lateral shock stress transducers. *J. Appl. Phys. (USA)*, v.77, N4, p1443-8 (1995).
- [26]. Kalvesten E., Lofdahl L., Stemme G. Small piezoresistive silicon microphones specially designed for the characterization of turbulent gas flows. *Sens. Actuators A. Phys. (Switzerland)*, v.A46, N1-3, p151-5 (1995).
- [27]. Garcia-Valenzuela A., Tabib-Azar. Comparative study of piezoelectric, piezoresistive, electrostatic, magnetic and optical sensors. *Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng. (USA)*, v.2291, p125-42 (1994).
- [28]. Baranskii P.I., Kolomoets V.V., Fedosov A.V. Piezoresistance occurs in conditions of symmetrical direction of deformation axis in relation of all constant energy ellipsoids. *Physics and technics of semiconductors*, 1979, v.13, N10, p815-819 (in Russian).

- [29]. Ahmad C., Adams A., Pitt G. **Temperature dependence of the electron mobility in the Δ_1 minima of Germanium.** J. Phys. C: Solid State Phys., 1979, v.12, N10, pl 379-383.
- [30]. Cardona M. **Semiconductors under uniaxial strain.** Phys. Stat. Sol. B. (Germany), v.198, p5-21 (1996).
- [31]. Christensen N.E., Wenneker I., Svane A., Fancinlli M. **Electronic structure of semiconductors under pressure.** Phys. Stat. Sol. B. (Germany), v.198, N1, p23-34 (1996).
- [32]. Baidakov V.V., Ermakov V.N., Gorin A.E., Kolomoets V.V., Stuchinska N.V., Shenderovskii V.A., Tunstall D.P. **Metal-insulator transition in degenerated doped Si and Ge under high uniaxial pressure.** Phys. Stat. Sol. B. (Germany), v.198, N1, p149-52 (1996).
- [33]. Landau L.D. **Teoria da elasticidade**, MIR, 1986.
- [34]. Nyi. **Physical properties of crystals**, Oxford at the Clarendon Press, 1964.
- [35]. Taylor J.H. **Pressure Dependence of Resistance of Germanium** Phys. Rev. 1950, v.80, p919.
- [36]. Shockley W., Bardeen J., **Energy Bands and Mobilities in Monoatomic Semiconductors** Phys. Rev., 1950, v.77, p407..
- [37]. Paul W., Brooks H. **Pressure dependence of the Resistivity of Germanium** Phys. Rev. 1954, v.94, p1128.
- [38]. Warschauer D.M., Paul W., Brooks H., **Effect of Pressure on the Optical Absorption Edge in Silicon and Germanium.** Phys. Rev., 1955, v.98, p1193..
- [39]. Paul W., **Pressure Dependence of Resistivity of Germanium** Phys. Rev., 1953, v.90, p.336..
- [40]. Paul W., Brooks H., **Progress in Semiconductors**, 1963, v.7, p135.
- [41]. Fritzsche H., **Effect of Uniaxial Compression on Impurity Conduction in n-type Germanium**, Phys. Rev, 1962, v.125, N5, p1552-1560.
- [42]. Cardona M., Paul W., J. **A quadratic photoelectromagnetic effect in germanium** J. Phys. Chem. Solids, 1960, v.17, p138.
- [43]. Paul W., **Band structure of the intermetallic semiconductors from pressure experiments** J. Appl. Phys., 1961, v.32, p2082..
- [44]. Arizumi T, Yoshida A., Sawaki H., **Uniaxial stress effect on (000) and (100) conduction-band minima of germanium (I).** Japan Journal of Appl. Phys. 1967, v.6, p589
- [45]. Arizumi T, Yoshida A., Sawaki H., **Uniaxial stress effect on (000) and (100) conduction-band minima of germanium (II).** Japan Journal of Appl. Phys. 1969, v.8, p700-703.
- [46]. Cardona M., Paul M., Brooks H. **Dielectric constant of germanium and silicon as a function of volume.** J. Phys. Chem. Solids, 1959, v.8, p204.
- [47]. Cuevas M., Fritzsche H., **High-Stress Piezoresistance and Mobility in Degenerate Sb-Doped Germanium.** Phys. Rev., 1965, v.137, p1847.

[48]. Morin F.J., Geballe T.H., Herring C., **Temperature Dependence of Piezoresistance of High-Purity Silicon and Germanium.** Phys.Rev.,1957, v.105, p525.

[49]. Chernysh V.V., Tomo F., Burdeynyi V.M. **Piezoresistance caused by electron transition between L_1 and Δ_1 minimas of germanium.** SAIP-43rd Annual Conference(7-10 july 1998), p60.

Anexo1

Programa para cálculo de números de preenchimento, tensores de condutibilidade e resistividade em função da pressão e temperatura

```
PROGRAM TOMO (INPUT,OUTPUT);
USES PRINTER,CRT;
CONST
K=0.8625E-4;C1C=-6.4;C2C=16.4;C1S=0.53;C2S=10.4;S11=0.754E-6;S12=-0.206E-6;
dE=0.18;Mnc=0.2198;Mns=0.3214;Ko=1.38E-16;a1c=3.0072E-17;a2c=3.6209E-17;No=1.6E+13;
a1s=3.1201E-17;a2s=2.0497E-17;e=-1.6E-19;m1c=0.7642E-28;m3c=14.378E-28;m1s=1.7472E-
28;
m3s=8.19E-28;Pi=3.14;
VAR
k3,T,I:INTEGER;
ch:char;

VAR
ECR,R110,R330,
dER,EK1R,EK2R,N1,N2,N3,TOTAL,SG11,SG110,SG330,SG33,R11,R33,R1,R3:REAL;

P:ARRAY[1..100] OF INTEGER;

BEGIN
clrscr;
write('Introduza o Numero de vezes:');readln(k3);
WRITE('INTRODUZA T:');READLN(T);
FOR I:=1 TO k3 DO
BEGIN
WRITE('INTRODUZA O VALOR DE P['',I,'']=');READLN(P[I]);
END;
```


clrscr;

for i:=1 to k3 do

begin

dER:=dE/(K*T);

ECR:=(P[I]*(S11+2*S12)*(C1C+(C2C/3)))/(K*T);

EK1R:=(P[I]*(C1S*S11+2*C1S*S12+C2S*S11))/(K*T);

EK2R:=(P[I]*(C1S*S11+2*C1S*S12+C2S*S12))/(K*T);

WRITE(P[I]);

N1:=1/(4+sqrt((Mns*Mns*Mns)/(Mnc*Mnc*Mnc))*Exp(ECR-dER)*(2*Exp(-EK1R)+4*Exp(-EK2R)));

N2:=1/(2+4*Exp(EK1R-EK2R)+4*sqrt((Mnc*Mnc*Mnc)/(Mns*Mns*Mns))*Exp(dER-ECR+EK1R));

N3:=1/(4+2*Exp(EK2R-EK1R)+4*sqrt((Mnc*Mnc*Mnc)/(Mns*Mns*Mns))*Exp(dER-ECR+EK2R));

ToTal:=(4*N1+2*N2+4*N3);

Write("N1=",N1:4:8);Write("N2=",N2:4:8); Write("N3=",N3:4:8); write("Total=",Total:4:8);
WRITELN;

SG11:=(((1.0E+7)*8*No*sqr(e))/(3*T*sqrt(Pi*Ko*T))*((2*N1/3)*(2*a1c/m1c+a2c/m3c)+N2*a1s/m1s));

SG33:=(((1.0E+7)*8*No*sqr(e))/(3*T*sqrt(Pi*Ko*T))*((2*N1/3)*(2*a1c/m1c+a2c/m3c)+N2*a2s/m3s));

R11:=1/SG11;

R33:=1/SG33;

write("SG11=",SG11:1:10);write("R11=",R11:9:4);write("SG33=",SG33:1:10);write("R33=",R33:9:4);

WRITELN;

SG110:=(((1.0E+7)*8*No*sqr(e))/(3*T*sqrt(Pi*Ko*T))*(1/6)*(2*a1c/m1c+a2c/m3c));

SG330:=(((1.0E+7)*8*No*sqr(e))/(3*T*sqrt(Pi*Ko*T))*(1/6)*(2*a1c/m1c+a2c/m3c));

R110:=1/SG110;

R330:=1/SG330;

R1:=R11/R110;

R3:=R33/R330;

Write(' R1=',R1:2:9);write(' R3=',R3:2:9);

WRITELN;

end;

READLN;

END.

Anexo 2

Resultados dos números de preenchimento, tensores de condutibilidade e resistividade eléctricas em função da pressão e da temperatura, de acordo com o programa mostrado no anexo 1.

0'N1=0.25000000'N2=0.00000000'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.1031087680 'R11= 9.6985 'SG33=0.1031087680 'R33= 9.6985
'R1=1.000000000 'R3=1.000000000

-2000'N1=0.25000000'N2=0.00000000'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.1031087680 'R11= 9.6985 'SG33=0.1031087680 'R33= 9.6985
'R1=1.000000000 'R3=1.000000000

-4000'N1=0.25000000'N2=0.00000000'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.1031087679 'R11= 9.6985 'SG33=0.1031087679 'R33= 9.6985
'R1=1.000000000 'R3=1.000000000

-6000'N1=0.25000000'N2=0.00000000'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.1031087678 'R11= 9.6985 'SG33=0.1031087676 'R33= 9.6985
'R1=1.000000001 'R3=1.000000003

-8000'N1=0.24999999'N2=0.00000002'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.1031087664 'R11= 9.6985 'SG33=0.1031087639 'R33= 9.6985
'R1=1.000000015 'R3=1.000000039

-10000'N1=0.24999987'N2=0.00000026'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.1031087499 'R11= 9.6985 'SG33=0.1031087198 'R33= 9.6985
'R1=1.000000175 'R3=1.000000467

-12000'N1=0.24999846'N2=0.00000307'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.1031085521 'R11= 9.6985 'SG33=0.1031081925 'R33= 9.6986
'R1=1.000002093 'R3=1.000005581

-14000'N1=0.24998164'N2=0.00003671'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.1031061908 'R11= 9.6987 'SG33=0.1031018968 'R33= 9.6991
'R1=1.000024995 'R3=1.000066645

-16000'N1=0.24978097'N2=0.00043805'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.1030780183 'R11= 9.7014 'SG33=0.1030267839 'R33= 9.7062
'R1=1.000298314 'R3=1.000795754

-18000'N1=0.24740940'N2=0.00518120'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.1027450693 'R11= 9.7328 'SG33=0.1021390818 'R33= 9.7906
'R1=1.003539816 'R3=1.009493782

-20000'N1=0.22221543'N2=0.05556915'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.0992080469 'R11= 10.0798 'SG33=0.0927087439 'R33= 10.7865
'R1=1.039318595 'R3=1.112179538

-21580'N1=0.13248950'N2=0.23502100'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.0866112801 'R11= 11.5458 'SG33=0.0591234968 'R33= 16.9137
'R1=1.190477359 'R3=1.743955846

-22000'N1=0.10027873'N2=0.29944254'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.0820891580 'R11= 12.1819 'SG33=0.0470667056 'R33= 21.2464
'R1=1.256058297 'R3=2.190694391

-24000'N1=0.01327760'N2=0.47344480'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.0698749295 'R11= 14.3113 'SG33=0.0145013747 'R33= 68.9590
'R1=1.475618920 'R3=7.110275406

-26000'N1=0.00116880'N2=0.49766240'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.0681749557 'R11= 14.6681 'SG33=0.0099689388 'R33= 100.3116
'R1=1.512414154 'R3=10.343003415

-28000'N1=0.00009830'N2=0.49980340'N3=0.00000000 'Total=1.00000000
'SG11=0.0680246668 'R11= 14.7005 'SG33=0.0095682415 'R33= 104.5124
'R1=1.515755575 'R3=10.776146026