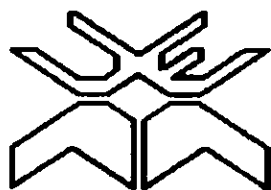


F13-35



UNIVERSIDADE EDUARDO

MONDLANE

FACULDADE DE CIÊNCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TRABALHO DE LICENCIATURA

INVESTIGAÇÃO DO ESPALHAMENTO DOS ELECTRÕES

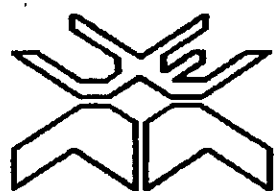
EM L_1 E Δ_1 MÍNIMOS DE GERMÂNIO

AUTOR:

NHANALA, JOAQUIM FRANCISCO

Maputo, Junho de 1999

S39
NHA
3602



UNIVERSIDADE EDUARDO

MONDLANE

FACULDADE DE CIÊNCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TRABALHO DE LICENCIATURA

INVESTIGAÇÃO DO ESPALHAMENTO DOS ELECTRÕES

EM L_1 E Δ_1 MÍNIMOS DE GERMÂNIO

SUPERVISOR:

PROF. DOUTOR TCHERNYCH V.

Maputo, Junho de 1999

À minha esposa Filomena Nhabinde Nhanala,

Aos meus filhos

Lalucha, Leta e Júnior.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho , também resultou da ajuda moral e material que tive, daqueles que depositaram confiança na minha formação. Por conseguinte, 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.

*À Direcção do Departamento de Física, nas pessoas do dr. Hermínio Tembe e da dr^a Mayra de Hernandez de Sousa, pela agilidade no desbloqueamento de todos os aspectos burocráticos.

*A todos aqueles que foram meus professores ao longo do curso, particularmente ao Prof. Dr. Burdeynyi V.M., ao Prof. Dr. Yuri Rakov, ao Prof. Dr. Rogério Utui, ao Prof. Dr. Boaventura Cuamba, Prof. Dr. Mapossa, Prof. Dr. Akil, dr. Genito, dr. Naran, dr. Dombo pelas suas maneiras simples e coerentes de estar na ciência e por serem a fonte da minha projecção, no campo científico.

*Ao dr. Félix Tomo, pelos pontos de vista e opiniões que me concedeu durante a execução deste trabalho.

*À todos os meus colegas do curso, particularmente Alfredo Mahoche, Enoque Malate, António Saide e Cândida Cumbe, pelo apoio que me prestaram ao longo do curso.

*À todos os funcionários do Departamento de Física, com maior destaque os senhores Jorge, Macamo, Santos, Baptista, Narciso; senhoras Rosa, Etelevina, Otilia, pela ajuda que deram ao longo da minha formação.

*À toda a minha família, especialmente ao meu pai Francisco Nhanala, à minha mãe Laura Mabuie, à tia Rosa, pelo encorajamento e apoio que me deram ao longo de toda a duração do curso.

• *À toda a família Nhabinde e Novela, particularmente aos meus sogros Manuel Nhabinde e Rute Novela, por terem me dado apoio moral ao longo de todo o curso.

*À todos os meus irmãos, destacando Leonardo , Armando e Samuel pelo apoio moral e material que me concederam ao longo de todos os anos da minha formação.

*À minha cunhada Judite Nhantumbo e ao meu cunhado Paulo Nhabinde, pelo apoio moral e material que me prestaram ao longo de todo o curso.

*Aos meus primos, Gil Nhantumbo, Juma, Eduardo Chechene, Júlio Paruque, Francisco Manjate e suas famílias, pelo apoio moral e material que me deram ao longo do curso.

*Aos meus amigos Alberto Pelembe, Lourenço Wate, sr. Jeremias Nhantumbo, Ana Miambo, sr. Henriqueta, Romeu Dimande, Laura Guiliche, Natércia, Isaac Amade e suas famílias pelo apoio que deram durante o curso.

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, Maio de 1999

O autor

Joaquim Francisco Nhanala

(Joaquim Francisco Nhanala)

Resumo

A investigação das propriedades dos electrões nos mínimos energéticos, relativamente afastados na escala da energia em relação aos mínimos energéticos absolutos na banda de Brillouin, adquiriu um interesse especial devido à investigação dos fenómenos de esquentamento dos portadores de carga. A deformação elástica uniaxial (DEU) dos cristais permite criar condições experimentais favoráveis para medição directa das propriedades dos electrões nestes mínimos.

No trabalho apresentado considera-se teoricamente $L_1 - \Delta_1$ modelo do Germânio. A DEU aplicada ao longo da direcção cristalográfica [001] permite considerar a inversão dos L_1 e Δ_1 mínimos do Germânio e assim permite investigar o espalhamento dos electrões em L_1 e Δ_1 mínimos separadamente.

Baseando na teoria de espalhamento anisotrópico (TEA), tinham sido obtidos e analisados numericamente as expressões para o tensor da conductibilidade eléctrica, tensor da resistividade eléctrica e mobilidade dos electrões, no modelo considerado (n-Ge) nas condições do espalhamento dos electrões por fonões acústicos e iões de impurezas (espalhamento misto), usando os programas em Pascal especialmente elaborados para este fim.

A comparação dos resultados teóricos e os dados experimentais permitiu determinar as massas eficazes dos electrões, constantes dos potenciais de deformação e o parâmetro da anisotropia em Δ_1 mínimos do Germânio.

INDICE

I. INTRODUÇÃO.....	3
II. NOÇÕES PRINCIPAIS DA TEORIA DE ESPALHAMENTO ANISOTRÓPICO.	6
1. Conceito sobre espalhamento anisotrópico.....	6
2. Equação cinética e sua resolução. Resolventa.....	7
3. Tensor de conductibilidade eléctrica para um mínimo de energia.....	9
4. Tensor de conductibilidade eléctrica para muitos mínimos.....	10
5. Quase-impulsos deformados. Transformação das componentes das velocidades.....	10
6. Quase-impulsos deformados. Transformação do termo de campo.....	12
7. Representação do tensor da conductibilidade eléctrica através da resolventa.....	13
8. Ligação entre a resolventa e o tensor do tempo de relaxação.....	16
9. Tensor da conductibilidade eléctrica.....	17
III. ESPALHAMENTO DOS ELECTRÕES EM L_1 E Δ_1 MÍNIMOS DO	
GERMÂNIO.....	18
1. Espalhamento por fonões acústicos em L_1 e Δ_1 mínimos do Ge.....	19
a. Números de preenchimento.....	19
b. Tensor da conductibilidade eléctrica.....	20
2. Espalhamento de electrões por iões de impurezas em L_1 e Δ_1 mínimos.....	24
Espalhamento misto.....	25
3. Mobilidade dos electrões e parâmetro de anisotropia.....	29
IV. DETERMINAÇÃO DAS CONSTANTES DOS POTENCIAIS DE DEFORMAÇÃO	
E DAS MASSAS EFICAZES PARA OS Δ_1 MÍNIMOS DO GERMÂNIO.	36
V. CONCLUSÕES.....	45
VI. RECOMENDAÇÕES.....	46
VII. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	46

I. INTRODUÇÃO

A investigação dos fenómenos de transporte adquiriu nos últimos tempos grande importância prática motivada pela larga utilização dos métodos de transformação directa de energia térmica (incluindo a irradiação solar) em energia eléctrica e ampla utilização dos diferentes dispositivos semicondutores na microelectrónica e técnica contemporânea.

A ampla utilização do n-Ge e ligas na base do Germânio na construção de diferentes dispositivos semicondutores, determinou a sua escolha como objecto de investigação.

Os factos testemunham que os dispositivos electrónicos funcionam frequentemente na presença das deformações externas, o que conduz a necessidade do estudo do comportamento dos efeitos cinéticos (isto é, a resistividade, conductibilidade eléctrica e outros) nestas condições.

A deformação elástica uniaxial dos semicondutores com muitos mínimos, na superfície de energia constante, na banda de condução (como por exemplo no n-Ge, n-Si), realizada ao longo das direcções assimétricas em relação aos mínimos de energia, leva à redistribuição dos portadores de carga (os electrões) entre os mínimos de energia sob a concentração total constante dos portadores.

As superfícies da energia constante perto dos mínimos da energia, no caso de n-Ge e n-Si, são elipsóides de revolução, por isso daqui em diante chamaremos simplesmente "elipsóides". No futuro quando falarmos sobre "mínimos da energia" teremos em conta superfícies isoenergéticas perto dos mínimos respectivos.

Uma vez que as massas efectivas dos electrões e suas mobilidades são grandezas anisotrópicas isto leva a alteração significativa dos efeitos cinéticos quantitativa e qualitativamente em comparação com os mesmos efeitos, na ausência da deformação [1-4]. Por exemplo, sendo a mobilidade dos electrões uma grandeza escalar na ausência da deformação elástica uniaxial nos cristais considerados (devido a simetria cúbica do n-Ge e n-Si), estará o tensor de segunda ordem no caso da presença da deformação elástica ao longo dos eixos assimétricos em relação aos mínimos de energia (isto é, os eixos considerados [111] e [110] para o n-Ge e os eixos [100] e [110] para o n-Si).

Tomando em conta o comportamento destes fenómenos, isto representa não só um interesse científico mas também prático [5-9].

De um modo geral, a deformação influi no carácter do espectro de fonões e também no tempo de relaxação das interações electrões-fonões.

Por outro lado, esta influência realiza-se através das oscilações não lineares dos átomos. Assim, podemos supor que as variações acima mencionadas são desprezáveis. Por isso, nos cálculos usam-se os tempos de relaxação electrões-fonões que são conhecidas para os cristais não deformados. Deste modo, a deformação elástica uniaxial provoca apenas o deslocamento relativo (na escala de energia) de alguns elipsóides, na banda de condução, em relação aos outros, o que provoca a redistribuição dos electrões entre os elipsóides.

Ao investigar os fenómenos de transporte nos semicondutores temos de ter em conta as impurezas, pois estas são fontes dos portadores em excesso. Portanto, as impurezas variam a conductibilidade eléctrica dos semicondutores.

O espalhamento dos electrões é provocado pela perturbação do campo periódico da rede cristalina, isto é, todos os defeitos da rede cristalina são os centros de espalhamento. Portanto, o espalhamento dos electrões pode ser provocado, no caso mais simples, por iões de impurezas e pelas oscilações da rede cristalina.

O espalhamento dos electrões por fonões acústicos não varia a energia dos portadores, daí a validade da aproximação do tempo de relaxação, ou seja, espalhamento elástico.

Em muitas investigações considerou-se o modelo do Ge onde foram tomadas em conta só oito semi-elipsóides (ou quatro elipsóides) em L_1 pontos da banda de Brillouin (tal chamado L_1 modelo do Ge) [1-4,10-16].

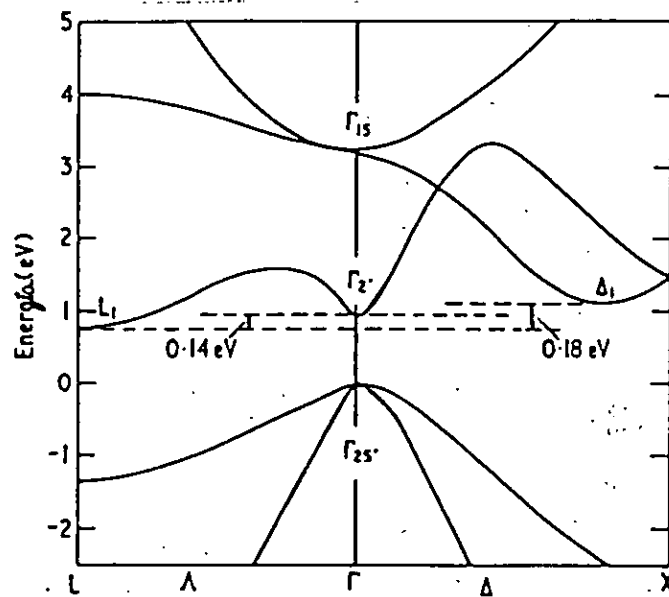


Figura 1. Estrutura energética do germânio (Ge).

Para muitos fins práticos (presença dos campos eléctricos fortes, grandes deformações elásticas) é importante considerar também os mínimos da energia situados acima dos L_1 mínimos na escala da

energia, na banda de Brillouin. Tais mínimos mais próximos (distantes 0,18 eV em relação `a L_1 mínimos) são seis Δ_1 mínimos (fig.1). O mínimo no ponto Γ não se considera devido a sua pequena densidade de estados nele[17-20]. Nós não consideraremos o mínimo em Γ ponto na banda de condução e por outra razão, a saber, na presença da deformação elástica uniaxial da compressão ao longo de $[001]$ ele sobe rapidamente na escala da energia (veja fig.2) [17,19-22].

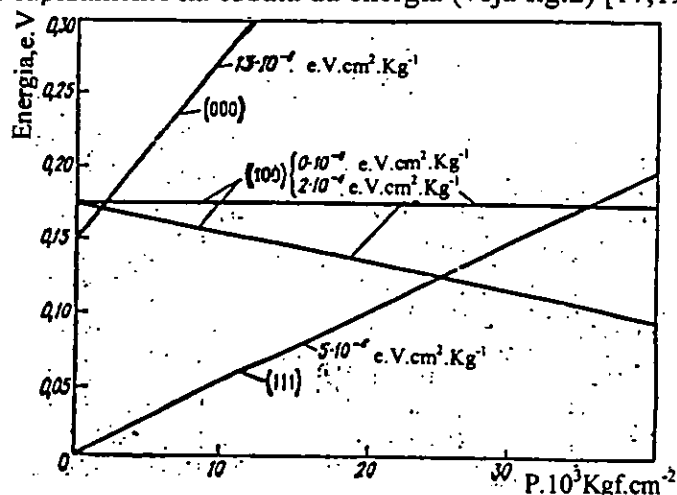


Figura 2. Deslocamento dos mínimos no n-Ge com a pressão uniaxial ($P//[001]$).

Por isso, neste trabalho consideraremos o tal chamado L_1 - Δ_1 modelo do Ge, constituído por quatro mínimos da energia nos pontos L_1 e seis mínimos da energia nos pontos Δ_1 . Todos os mínimos são elipsóides da revolução. Sendo as superfícies da energia constante perto dos mínimos da energia nos pontos Δ_1 são semelhantes às perto dos mínimos da energia na banda de condução do Si[1,17] e por isso, as vezes, são denominados como "silícicos", enquanto que os mínimos nos pontos L_1 são denominados como os "germânicos".

II. NOÇÕES PRINCIPAIS DA TEORIA DE ESPALHAMENTO ANISOTRÓPICO

1. Conceito de espalhamento anisotrópico

Em resultado do espalhamento elástico, a energia do electrão ϵ não varia, somente varia o sentido do seu quase-impulso, que podemos caracterizar por ângulos ϑ e φ . Assim, a probabilidade de espalhamento é

$$W_{\vec{k}\vec{k}'} = W(\epsilon; \vartheta, \varphi; \vartheta', \varphi');$$

onde ϑ e φ determinam o sentido do quase-impulso antes do espalhamento e ϑ' e φ' determinam o sentido do quase impulso depois do espalhamento; ϵ é um parâmetro.

Suponhamos que a probabilidade do espalhamento depende do ângulo do espalhamento θ , isto é;

$$W_{\vec{k}\vec{k}'} = W(\cos\theta)$$

onde

$$\cos\theta = \cos\vartheta \cos\vartheta' + \sin\vartheta \sin\vartheta' \cos(\varphi - \varphi')$$

Neste caso a probabilidade do espalhamento não depende da orientação do sistema formado pelos vectores \vec{k} e \vec{k}' , (fig.3). Tal espalhamento definiremos como "espalhamento isotrópico".

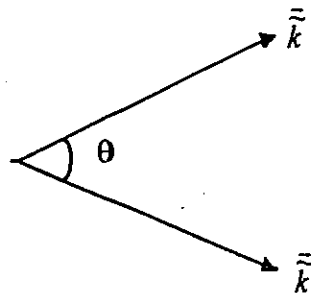


Figura 3- Esquema do espalhamento.

Entende-se por espalhamento anisotrópico, quando a probabilidade do espalhamento não só depende do ângulo de espalhamento θ , mas também dos sentidos dos vectores \vec{k} e \vec{k}' , isto é, neste caso $W_{\vec{k}\vec{k}'}$ não pode ser expressa só através do ângulo de espalhamento θ , que se determina pela relação acima escrita, mas também depende separadamente dos ângulos ϑ , φ , ϑ' , φ' [1-4].

Nos casos considerados a anisotropia do espalhamento determina-se pela anisotropia do espectro energético. Daqui segue que a sua consideração na teoria dos fenómenos de transporte, em muitos casos, é necessária.

2. Equação cinética e sua resolução. Resolventa.

Suponhamos que se considera um semiconductor homogéneo, sobre o qual é aplicado um campo eléctrico externo. A equação cinética que descreve o comportamento dos electrões, devido a acção do campo eléctrico externo e colisões, nas condições estacionárias, para um mínimo de energia, tem a seguinte forma [12-13,23]:

$$\left(\frac{\partial \bar{f}_{\vec{k}}}{\partial t} \right)_{\text{campo}} + \left(\frac{\partial \bar{f}_{\vec{k}}}{\partial t} \right)_{\text{colisão}} = 0 \quad \text{II.2.1)}$$

O primeiro e segundo termos designam a variação da função de distribuição devido a acção do campo eléctrico externo e a colisões.

Aqui $\bar{f}_{\vec{k}}$ é a função de distribuição de electrões na presença da deformação externa do cristal e campo eléctrico externo, isto é, função desequilibrada.

Nas condições do equilíbrio termodinâmico e gás de electrões não degenerado a função de distribuição é a função de Maxwell-Boltzman

$$\bar{f}_{\vec{k}}^0 = e^{\frac{\bar{\mu} - \bar{\epsilon}_{\vec{k}} - E^{(s)}}{KT}} \quad \text{(II.2.2)}$$

onde $\bar{\mu}$ é o potencial químico do cristal na presença da deformação, $\bar{\epsilon}_{\vec{k}}$ é a energia do electrão com quase-impulso \vec{k} , $E^{(s)}$ é o potencial de deformação do mínimo de energia número "s"; T é temperatura e K é a constante de Boltzman.

Admitimos que a perturbação ligada a acção do campo eléctrico externo é pequena. Nesta condição a função desequilibrada de distribuição é cómodo apresentar na forma[1-4,12,13,16,23]

$$\bar{f}_{\vec{k}} = \bar{f}_{\vec{k}}^0 + \frac{\partial \bar{f}_{\vec{k}}^0}{\partial \bar{x}_{\vec{k}}} \bar{\phi}(\vec{k}, \vec{r}) \quad \text{(II.2.3)}$$

assumindo que

$$\bar{x}_{\vec{k}} = \frac{\bar{\epsilon}_{\vec{k}} + E^{(s)} - \bar{\mu}}{KT} \quad \text{(II.2.3')}$$

e o segundo termo em (II.2.3) apresenta por si uma correcção desequilibrada para a função equilibrada $\bar{f}_{\vec{k}}^0$.

Introduzimos os operadores \hat{D}_e e \hat{L} [2,4] que descrevem as acções do campo eléctrico externo e colisões, respectivamente. O operador \hat{D}_e descreve a variação da função de distribuição no ponto (\vec{r}, \vec{k}) do espaço de fase devido ao deslocamento de electrões sob a acção do campo eléctrico externo.

O operador \hat{L} descreve a variação da função de distribuição ligada com o espalhamento de electrões provocado por colisões. Este apresenta por si um operador integral que actua para a função $\bar{f}_{\vec{k}}$. Por isso a equação (II.2.1) na aproximação linear pode ser escrita na forma

$$\hat{D}_e \bar{f}_{\vec{k}}^0 + \hat{L} \bar{\Phi}_{\vec{k}} = 0 \quad (\text{II.2.4})$$

em que

$$\hat{D}_e \bar{f}_{\vec{k}}^0 = -\frac{e}{KT} \cdot \frac{d\bar{f}_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}} \cdot (\vec{v}_{\vec{k}} \cdot \vec{E}) = -\frac{e}{KT} \cdot \frac{d\bar{f}_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}} \sum_{\beta} v_{\vec{k}\beta} E_{\beta} \quad (\text{II.2.5})$$

A equação (II.2.4) as vezes escreve-se na forma mais cómoda para aplicações posteriores [2,4]

$$\hat{D}_e \bar{f}_{\vec{k}}^0 + \sum_{\vec{k}'} L_{\vec{k}\vec{k}'} \bar{\Phi}_{\vec{k}'} = 0 \quad (\text{II.2.6})$$

Matriz $L_{\vec{k}\vec{k}'}$ chama-se "matriz de espalhamento". Definimos o operador resolventa $R_{\vec{k}\vec{k}'}$ [2,4] que satisfaz a equação

$$\sum_{\vec{k}'} R_{\vec{k}\vec{k}'} L_{\vec{k}'\vec{k}''} = \delta_{\vec{k}\vec{k}''} \quad (\text{II.2.7})$$

Substituindo \vec{k} por \vec{k}' e \vec{k}' por \vec{k}'' , na equação (II.2.6), multiplicando esta por $R_{\vec{k}\vec{k}'}$ e somando por quase-impulsos \vec{k}' devido a definição (II.2.7) teremos

$$\sum_{\vec{k}'} R_{\vec{k}\vec{k}'} \hat{D}_e \bar{f}_{\vec{k}'}^0 + \sum_{\vec{k}'} \sum_{\vec{k}''} R_{\vec{k}\vec{k}'} L_{\vec{k}'\vec{k}''} \bar{\Phi}_{\vec{k}''} = 0$$

Usando a resolventa, a solução formal da equação cinética (II.2.6) pode ser apresentada na forma

$$\sum_{\vec{k}'} R_{\vec{k}\vec{k}'} \hat{D}_e \bar{f}_{\vec{k}'}^0 + \sum_{\vec{k}'} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \bar{\Phi}_{\vec{k}'} = 0$$

e finalmente teremos a correcção desequilibrada expressa assim

$$\bar{\Phi}_{\vec{k}} = -\sum_{\vec{k}'} R_{\vec{k}\vec{k}'} \hat{D}_e \bar{f}_{\vec{k}'}^0 \quad (\text{II.2.8})$$

3. Tensor da conductibilidade eléctrica para um mínimo da energia.

Usando o operador $R_{\vec{k}\vec{k}'}$, podemos encontrar os componentes do tensor da conductibilidade eléctrica $\sigma_{\alpha\beta}$. Com efeito, segundo a definição, os componentes do vector da densidade da corrente eléctrica podem ser escritos como[2-4,12,13,16,23]

$$J_\alpha = \frac{2e}{V} \sum_{\vec{k}} \Phi_{\vec{k}} \frac{d\vec{f}_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}} v_{\vec{k}\alpha}, \quad (\text{II.3.1})$$

tomando em conta (II.2.8), segue

$$J_\alpha = -\frac{2e}{V} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} R_{\vec{k}\vec{k}'} \hat{D}_{\vec{k}\vec{k}'} \vec{f}_{\vec{k}'}^0 \frac{d\vec{f}_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}} v_{\vec{k}\alpha}, \quad (\text{II.3.2})$$

substituindo (II.2.5), nesta expressão, teremos

$$J_\alpha = \frac{2e^2}{VKT} \sum_{\vec{k}\vec{k}',\beta} R_{\vec{k}\vec{k}'} v_{\vec{k}\alpha} v_{\vec{k}'\beta} \frac{d\vec{f}_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}} \frac{d\vec{f}_{\vec{k}'}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}'}} \cdot E_\beta. \quad (\text{II.3.3})$$

Como se sabe, a lei de Ohm para meios anisotrópicos tem a forma[24]

$$J_\alpha = \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta} E_\beta \quad (\text{II.3.4})$$

Comparando as duas últimas expressões, obtém-se a expressão para componentes do tensor da conductibilidade eléctrica, isto é,

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{2e^2}{VKT} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} R_{\vec{k}\vec{k}'} v_{\vec{k}\alpha} v_{\vec{k}'\beta} \frac{d\vec{f}_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}} \frac{d\vec{f}_{\vec{k}'}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}'}} \quad (\text{II.3.5})$$

4. Tensor da conductibilidade eléctrica para muitos mínimos de energia

Os resultados obtidos acima permitem calcular os componentes da conductibilidade eléctrica (II.3.5) $\sigma_{\alpha\beta}^{(i)}$ para um mínimo da energia. No caso da existência de vários mínimos é necessário realizar o somatório por todos esses mínimos e obtermos assim uma componente da densidade da corrente eléctrica que resulta da contribuição de todos os mínimos, de modo seguinte:

$$J_\alpha = \sum_i J_\alpha^i = \sum_{i,\beta} \sigma_{\alpha\beta}^{(i)} E_\beta = \sum_{\beta} \left(\sum_i \sigma_{\alpha\beta}^{(i)} \right) E_\beta \quad (\text{II.4.1})$$

de onde para os componentes do tensor da conductibilidade eléctrica total $\sigma_{\alpha\beta}$ teremos

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sum_i \sigma_{\alpha\beta}^i \quad (\text{II.4.2})$$

Sublinhemos que os componentes do tensor da conductibilidade $\sigma_{\alpha\beta}^i$ para cada mínimo devem ser escritos no mesmo sistema de coordenadas, ou seja, no mesmo referencial. Este referencial, como regra, denomina-se "referencial laboratorial", que pode ou não coincidir com o referencial ligado com os eixos principais do elipsóide de massa(segundo referimos na introdução, a forma das superfícies de energia constante num mínimo na banda de condução do Ge, é elipsóide de revolução [2,4,12,16]). O referencial ligado com os eixos principais dum elipsóide de massa denominaremos o elipsoidal.

Para obter os componentes de um tensor(no caso concreto os do tensor de conductibilidade eléctrica) no referencial laboratorial utiliza-se a transformação

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)} = \sum_{\gamma,\delta} a_{\alpha\gamma}^{(i)} a_{\beta\delta}^{(i)} \sigma_{\gamma\delta}^i \quad (\text{II.4.3})$$

onde $\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^i$ e $\sigma_{\gamma\delta}^i$ são componentes do tensor da conductibilidade eléctrica do i -ésimo mínimo num referencial laboratorial e no referencial elipsoidal, respectivamente, $a_{\alpha\gamma}$ e $a_{\beta\delta}$ são matrizes da transição do referencial elipsoidal para o laboratorial[21] e são dadas em apêndice-I. Para o caso do $L_1 - \Delta_1$ modelo do n-Ge e quando o referencial laboratorial é ligado com os eixos cristalográficos, as matrizes de transformação foram calculadas no trabalho de "Investigação da piezoresistência causada pela redistribuição dos electrões em L_1 e Δ_1 mínimos do Ge[21], e para facilitar a leitura, estão dadas em apêndice-I.

Anotemos também que os resultados obtidos nos parágrafos anteriores são válidos para espectro energético arbitrário. Tomando em conta a aplicação dos resultados obtidos para o caso concreto do n-Ge, consideremos a relação que segue, entre a energia e quase-impulso,

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\tilde{k}_1^2}{m_1} + \frac{\tilde{k}_2^2}{m_1} + \frac{\tilde{k}_3^2}{m_3} \right) \quad (\text{II.4.4})$$

Entretanto, o método usado é válido para o caso geral da lei de dispersão não parabólica de tipo Keyn[2]

$$\varepsilon_{\bar{k}} = f\left(\frac{\tilde{k}_x^2}{m_x} + \frac{\tilde{k}_y^2}{m_y} + \frac{\tilde{k}_z^2}{m_z}\right) \quad (\text{II.4.5})$$

quando as superfícies isoenergéticas continuam a ser elipsóides e a função f é arbitrária.

5. Quase impulsos deformados. Transformação das componentes das velocidades.

Para cálculos posteriores do tensor da conductibilidade eléctrica é cómodo introduzir os quase impulsos "deformados" dos electrões \bar{k} que estão ligados com quase impulsos \tilde{k} pela relação

$$\bar{k} = \lambda_i \tilde{k} \quad (\text{II.5.1})$$

$$\text{onde } \lambda_i = \sqrt{m_N / m_i} \quad m_N = (m_1 m_2 m_3)^{1/3} \quad ; \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 = 1 \quad (\text{II.5.2})$$

m_N é a massa eficaz da densidade dos estados.

Seguidamente procedemos o desenvolvimento de todas as grandezas, que dependem do sentido do vector \bar{k} , em série em relação às harmónicas esféricas dos ângulos do mesmo vector.

Transformaremos os componentes do vector da velocidade do electrão, segundo (II.5.1).

O espectro da energia dos electrões em L_1 e Δ_1 mínimos em relação aos eixos principais do elipsóide de massa tem a forma

$$\varepsilon_{\bar{k}} = \sum_i \frac{\hbar^2 \tilde{k}_i^2}{2m_i} \quad (i=1,2,3) \quad (\text{II.5.3})$$

No espaço dos quase impulsos deformados o espectro (II.5.3) torna-se esférico;

$$\varepsilon_{\bar{k}} \equiv \varepsilon_{\tilde{k}} = \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\tilde{k}_i^2}{m_i} = \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{k_i^2}{\lambda_i^2 m_i} = \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{k_i^2}{\frac{m_N}{m_i}} = \frac{\hbar^2}{2m_N} \sum_i k_i^2 \quad (\text{II.5.4})$$

Para os componentes das velocidades temos

$$v_{\bar{k}_i} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\bar{k}}}{\partial \tilde{k}_i} = \frac{\lambda_i}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\tilde{k}}}{\partial k_i} = \frac{\hbar \lambda_i}{m_N} k_i \quad (\text{II.5.5})$$

usando (II.5.4) e introduzindo os ângulos esféricos ϑ e φ do quase impulso \bar{k} obteremos

$$\begin{aligned} v_{\bar{k}_1} &= \lambda_1 \sqrt{\frac{2 \cdot \varepsilon_{\bar{k}}}{m_N}} \cdot \text{sen} \vartheta \cos \varphi \\ v_{\bar{k}_2} &= \lambda_2 \sqrt{\frac{2 \cdot \varepsilon_{\bar{k}}}{m_N}} \cdot \text{sen} \vartheta \text{sen} \varphi \end{aligned} \quad (\text{II.5.6})$$

$$v_{\bar{k}3} = \lambda_3 \sqrt{\frac{2 \cdot \epsilon_{\bar{k}}}{m_N}} \cdot \cos \vartheta$$

As funções trigonométricas em (II.5.6), podem ser expressas através das funções esféricas normalizadas $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ [25]:

$$\begin{aligned} \sin \vartheta \cos \varphi &= -\sqrt{\frac{2\pi}{3}} [Y_{11}(\vartheta, \varphi) - Y_{1-1}(\vartheta, \varphi)] \\ \sin \vartheta \sin \varphi &= i\sqrt{\frac{2\pi}{3}} [Y_{11}(\vartheta, \varphi) + Y_{1-1}(\vartheta, \varphi)] \\ \cos \vartheta &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}(\vartheta, \varphi) \end{aligned} \quad (\text{II.5.7})$$

Usando estas fórmulas os componentes das velocidades podem ser apresentadas na forma [2]:

$$v_{\bar{k}i} = \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_{\bar{k}}}{3m_N}} \sum_{m=-1}^{m=1} \gamma_{im} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (\text{II.5.8})$$

onde a matriz γ_{im} tem a forma

$$\gamma_{im} = \begin{pmatrix} \gamma_{1-1} & \gamma_{10} & \gamma_{11} \\ \gamma_{2-1} & \gamma_{20} & \gamma_{21} \\ \gamma_{3-1} & \gamma_{30} & \gamma_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & -\lambda_1 \\ i\lambda_2 & 0 & i\lambda_2 \\ 0 & \sqrt{2}\lambda_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.5.9})$$

$$i=1,2,3 ; m=-1,0,1$$

Para fins posteriores escrevemos a matriz γ_{im}^*

$$\gamma_{im}^* = \begin{pmatrix} \gamma_{1-1}^* & \gamma_{10}^* & \gamma_{11}^* \\ \gamma_{2-1}^* & \gamma_{20}^* & \gamma_{21}^* \\ \gamma_{3-1}^* & \gamma_{30}^* & \gamma_{31}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & -\lambda_1 \\ -i\lambda_2 & 0 & -i\lambda_2 \\ 0 & \sqrt{2}\lambda_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.5.10})$$

6. Quase-impulsos deformados. Transformação do termo de campo.

Exprimimos agora o termo de campo (II.2.5) da equação cinética (II.2.4) através dos quase-impulsos deformados [2,4,16].

De acordo com a relação (II.2.5) temos

$$\hat{D}_e \bar{f}_{\bar{k}}^0 = -\frac{e}{KT} \frac{d\bar{f}_{\bar{k}}^0}{d\bar{x}_{\bar{k}}} \sum_{\beta} v_{\bar{k}\beta} E_{\beta} \quad (\text{II.6.1})$$

Substituindo aqui $v_{\bar{k}\beta}$ da fórmula (II.5.8), e tomando em conta (II.2.4) teremos

$$\hat{D}_e \bar{f}_{\bar{k}}^0 = \sum_m \left\{ -\frac{e}{KT} \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_R}{3m_N}} \frac{d\bar{f}_{\bar{k}}^0}{d\bar{x}_{\bar{k}}} \sum_{\beta} \gamma_{\beta m} E_{\beta} \right\} Y_{1m}(\vartheta, \varphi) \quad (\text{II.6.2})$$

Designaremos a expressão entre chavetas como D_m , isto é,

$$D_m = -\frac{e}{KT} \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_R}{3m_N}} \frac{d\bar{f}_{\bar{k}}^0}{d\bar{x}_{\bar{k}}} \sum_{\beta} \gamma_{\beta m} E_{\beta} \quad (\text{II.6.3})$$

Então o termo do campo tomará a forma

$$\hat{D}_e \bar{f}_{\bar{k}} = \sum_m D_m Y_{1m}(\vartheta, \varphi) \quad (\text{II.6.4})$$

7. Representação do tensor da conductibilidade eléctrica através da resolventa

Para efectuar os cálculos concretos posteriores, os operadores $L_{\bar{k}\bar{k}'}$ e $R_{\bar{k}\bar{k}'}$ devem ser desenvolvidos em série por funções esféricas $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ que dependem do sentido dos quase-impulsos deformados \bar{k} e \bar{k}' .

Durante os cálculos é necessário passar dos índices discretos \bar{k} e \bar{k}' para os contínuos.

Para $\delta_{\bar{k}\bar{k}'}$ e $\sum_{\bar{k}}$ as regras da passagem, como se sabe, são as seguintes:

$$\begin{aligned} \delta_{\bar{k}\bar{k}'} &\rightarrow \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\bar{k}' - \bar{k}) \\ \sum_{\bar{k}'} &\rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int \dots d\tau_{\bar{k}'} \\ \delta_{\bar{k}\bar{k}'} \sum_{\bar{k}'} &\rightarrow \delta(\bar{k}' - \bar{k}) \int \dots d\tau_{\bar{k}'} \end{aligned} \quad (\text{II.7.1})$$

Como foi mostrado em [2-4,10], o desenvolvimento dos operadores $L_{\bar{k}\bar{k}'}$ e $R_{\bar{k}\bar{k}'}$ em série por funções harmónicas esféricas tem a forma

$$L_{\bar{k}\bar{k}'} = \delta(\bar{k} - \bar{k}') \sum_{l'mm'} L_{l'mm'}^{mm'} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}^*(\vartheta', \varphi') \quad (\text{II.7.2})$$

$$R_{\bar{k}\bar{k}'} = \delta(\bar{k} - \bar{k}') \sum_{l'mm'} R_{l'mm'}^{mm'} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}^*(\vartheta', \varphi') \quad (\text{II.7.3})$$

Mostraremos agora, que no caso das superfícies elipsoidais isoenergéticas para o cálculo dos componentes do tensor da conductibilidade eléctrica (II.3.5) não é necessário conhecer todos os coeficientes $R_{l'mm'}^{mm'}$, mas sim é bastante conhecer só $R_{11}^{mm'}$. Este resultado está associado com o facto de

que, segundo (II.5.8) as velocidades são expressas só através das funções harmónicas esféricas da 1ª ordem $Y_{1m}(\vartheta, \varphi)$.

Representaremos o tensor da conductibilidade eléctrica através dos coeficientes do desenvolvimento da resolvente por harmónicas esféricas. Para este fim, reescrevemos a fórmula (II.3.5) para componentes do tensor da conductibilidade eléctrica $\sigma_{\alpha\beta}$ tomando em conta (II.7.1) da seguinte maneira:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2 V}{32\pi^6 K T} \iint R_{\vec{k}\vec{k}'} v_{\vec{k}\alpha} v_{\vec{k}'\beta} \frac{df_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}} \frac{df_{\vec{k}'}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}'}} d\tau_{\vec{k}} d\tau_{\vec{k}'}. \quad (\text{II.7.4})$$

Passemos à integração por quase-impulsos deformados, tendo em vista (II.5.1,2) e que

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

então

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2 V}{32\pi^6 K T} \iint R_{\vec{k}\vec{k}'} v_{\vec{k}\alpha} v_{\vec{k}'\beta} \frac{df_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}} \frac{df_{\vec{k}'}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}'}} d\tau_{\vec{k}} d\tau_{\vec{k}'}. \quad (\text{II.7.5})$$

Substituímos nesta expressão, as fórmulas (II.5.8) e (II.7.3), passemos as coordenadas esféricas e realizaremos a integração por k' e ângulos $\vartheta, \varphi, \vartheta', \varphi'$. Tomemos em conta a condição da normalização das funções esféricas[25]:

$$\int Y_{1m}^*(\vartheta, \varphi) Y_{1m'}(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (\text{II.7.6})$$

Então teremos

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} &= \frac{e^2 V}{32\pi^6 K T} \sum_{ll'mm'} \iint \delta(k' - k) R_{ll'}^{mm'} Y_{1m}(\vartheta, \varphi) Y_{1m'}^*(\vartheta', \varphi') \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_{\vec{k}}}{3m_N}} \sum_{m''=-1}^{m''=1} \gamma_{\alpha m''} Y_{1m''}(\vartheta, \varphi) \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_{\vec{k}'}}{3m_N}} \\ &\sum_{m''=-1}^{m''=1} \gamma_{\beta m''} Y_{1m''}(\vartheta', \varphi') \frac{df_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}} \frac{df_{\vec{k}'}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}'}} k^2 dK \sin \vartheta d\vartheta d\varphi k'^2 dk' \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi' = \frac{e^2 V \cdot 4\pi}{32\pi^6 K T 3m_N} \sum_{ll'mm'} \gamma_{\alpha m''} \gamma_{\beta m''} \int_0^\infty R_{ll'}^{mm'} \\ &\left(\frac{df_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}} \right)^2 \epsilon_{\vec{k}} \cdot k^4 dk \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} Y_{1m}(\vartheta, \varphi) Y_{1m'}^*(\vartheta, \varphi) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} Y_{1m''}^*(\vartheta', \varphi') Y_{1m''}(\vartheta', \varphi') \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi' = \\ &\frac{e^2 V}{24\pi^5 K T m_N} \sum_{ll'mm'} \gamma_{\alpha m''} \gamma_{\beta m''} \int_0^\infty R_{ll'}^{mm'} \left(\frac{df_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}} \right)^2 \epsilon_{\vec{k}} \cdot k^4 dk \cdot \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{l'l'} \delta_{m'm''} = \frac{e^2 V}{24 K T \pi^5 m_N} \sum_{ll'mm'} \gamma_{\alpha m''} \gamma_{\beta m''} \int_0^\infty R_{ll'}^{mm'} \left(\frac{df_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}} \right)^2 \\ &\epsilon_{\vec{k}} \cdot k^4 dk \end{aligned}$$

Segundo a fórmula (II.5.4)

$\varepsilon_{\bar{R}} = \frac{\hbar^2}{2m_N} \sum_i k_i^2 = \frac{\hbar^2}{2m_N} k^2$ e, portanto a última fórmula deve ter a forma que segue:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2 \hbar^2 V}{48KT \pi^5 m_N^2} \sum_{mm'} \gamma_{\alpha m}^* \gamma_{\beta m'} \int_0^\infty dk \cdot k^6 \left(\frac{d\bar{f}_{\bar{R}}^0}{d\bar{x}_{\bar{R}}} \right)^2 R_{11}^{mm'} \quad (\text{II.7.7})$$

Foi mostrado [2,3] que no caso da forma elipsoidal da superfície isoenergética e na ausência do campo magnético os coeficientes do desenvolvimento em (II.7.2,3) são diagonais em relação ao índice m , isto é;

$$L_{ll'}^{mm'} = L_{ll'}^m \delta_{mm'}; R_{ll'}^{mm'} = R_{ll'}^m \delta_{mm'} \quad (\text{II.7.8})$$

Nestas circunstâncias a expressão para o tensor da conductibilidade eléctrica terá a forma

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2 \hbar^2 V}{48KT \pi^5 m_N^2} \sum_m \gamma_{\alpha m}^* \gamma_{\beta m} \int_0^\infty dk \cdot k^6 \left(\frac{d\bar{f}_{\bar{R}}^0}{d\bar{x}_{\bar{R}}} \right)^2 \cdot R_{11}^m \quad (\text{II.7.9})$$

Na base da equação (II.2.7), e usando os resultados obtidos em (II.7.1), podemos mostrar que os coeficientes do desenvolvimento da resolventa R_{11}^m podem ser expressidos através dos coeficientes do desenvolvimento do operador do espalhamento L_{11}^m no caso considerado (superfícies isoenergéticas elipsoidais e ausência do campo magnético) da seguinte maneira:

$$R_{11}^m = \frac{G}{L_{11}^m} \quad (\text{II.7.10})$$

onde
$$G = \frac{(2\pi)^6}{V^2 k^4} \quad (\text{II.7.11})$$

8. Ligação entre a resolventa e o tensor do tempo de relaxação

É de notar que os coeficientes cinéticos habitualmente são expressos através do tensor dos tempos de relaxação $\tau_{\alpha\beta}$ [12,13,23]. Por isso, estabelecemos a relação entre o tensor do tempo de relaxação $\tau_{\alpha\beta}$ e os coeficientes R_{11}^m do desenvolvimento da resolventa em série por harmónicas esféricas.

Por essa razão reescrevemos (II.7.9) assim:

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{e^2 \hbar^2}{3KT \pi^2 \cdot m_N^2} \lambda_\beta^2 \int_0^\infty dk \cdot k^4 \frac{d\bar{f}_{\bar{R}}^0}{d\bar{x}_{\bar{R}}} \left[-\frac{V \cdot k^2}{2(2\pi)^3 \cdot \lambda_\beta^2} \frac{d\bar{f}_{\bar{R}}^0}{d\bar{x}_{\bar{R}}} \cdot \sum_m \gamma_{\alpha m}^* \gamma_{\beta m} \cdot R_{11}^m \right]$$

Por (II.7.11) segue

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{e^2 \hbar^2 \lambda_p^2}{3\pi^2 KT m_N^2} \int_0^\infty dk k^4 \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \left[-\frac{1}{2\sqrt{G} \lambda_p^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \sum_m \gamma_{\alpha m}^* \gamma_{\beta m} R_{11}^m \right] \quad (\text{II.8.1})$$

Designaremos o termo entre colchetes de modo seguinte:

$$\tau_{\alpha\beta} = -\frac{1}{2\sqrt{G} \lambda_p^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \sum_m \gamma_{\alpha m}^* \gamma_{\beta m} R_{11}^m \quad (\text{II.8.2})$$

assim, (II.8.1) toma a forma

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{e^2 \hbar^2 \lambda_p^2}{3\pi^2 KT m_N^2} \int_0^\infty dk k^4 \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \tau_{\alpha\beta} \quad (\text{II.8.3})$$

Na teoria dos coeficientes cinéticos é mais cómodo realizar a integração por energia [2,4,12,13,23], por isso em (II.8.3), fazemos a seguinte substituição

$$\varepsilon_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_N}; \quad k^2 = \frac{2m_N}{\hbar^2} \varepsilon_R; \quad dk = \sqrt{\frac{2m_N}{\hbar^2}} \frac{1}{2} \varepsilon^{-1/2} d\varepsilon$$

e obteremos

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{e^2 \hbar^2 \lambda_p^2}{3\pi^2 KT m_N} \sqrt{\frac{2m_N}{\hbar^2}} \left(\frac{2m_N}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{2} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{3/2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \tau_{\alpha\beta} \quad (\text{II.8.4})$$

Introduzindo a energia reduzida $x = \frac{\varepsilon}{KT}$, a última expressão terá a forma

$$\sigma_{\alpha\beta} = -\frac{e^2 \lambda_p^2 (2KT)^{3/2} \sqrt{m_N}}{3\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dx x^{3/2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \tau_{\alpha\beta} \quad (\text{II.8.5})$$

Anotemos que $\sigma_{\alpha\beta}$ é o tensor da conductibilidade eléctrica dum mínimo nos eixos principais do elipsóide das massas. O tensor $\tau_{\alpha\beta}$ com componentes dados pela fórmula (II.8.2) dá-nos a expressão para o tensor do tempo de relaxação através dos coeficientes do desenvolvimento da resolventa.

Conhecendo $\gamma_{\alpha m}$ é fácil passar da resolventa para o tensor do tempo de relaxação.

Quando a superfície isoenergética é elipsóide de revolução e na ausência do campo magnético, partindo das fórmulas (II.7.10) para resolventa e (II.8.2) para $\tau_{\alpha\beta}$, facilmente obtemos

$$\tau_{\alpha\beta} = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_p^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \sum_m \frac{\gamma_{\alpha m}^* \gamma_{\beta m}}{L_{11}^m} \quad (\text{II.8.6})$$

Usando a fórmula (II.5.9-10) é fácil calcular a soma em (II.8.6) e obter os componentes do tensor do tempo de relaxação (sublinhemos que [2,16], $L_{11}^{-1} = L_{11}^1$), como segue:

$$\tau_{11} = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_p^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \left(\frac{\gamma_{1-1}^* \gamma_{1-1}}{L_{11}^{-1}} + \frac{\gamma_{10}^* \gamma_{10}}{L_{11}^0} + \frac{\gamma_{11}^* \gamma_{11}}{L_{11}^1} \right) = -\sqrt{G} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \frac{1}{L_{11}^1}$$

$$\tau_{12} = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_2^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \left(\frac{\gamma_{1-1} \cdot \gamma_{2-1}}{L_{11}^1} + \frac{\gamma_{10} \cdot \gamma_{20}}{L_{11}^0} + \frac{\gamma_{11} \cdot \gamma_{21}}{L_{11}^1} \right) = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_2^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \frac{1}{L_{11}^1} (-i\lambda_1\lambda_2 + i\lambda_1\lambda_2) = 0$$

$$\tau_{13} = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_3^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \left(\frac{\gamma_{1-1} \cdot \gamma_{3-1}}{L_{11}^1} + \frac{\gamma_{10} \cdot \gamma_{30}}{L_{11}^0} + \frac{\gamma_{11} \cdot \gamma_{31}}{L_{11}^1} \right) = 0$$

$$\tau_{21} = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_1^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \left(\frac{\gamma_{2-1} \cdot \gamma_{1-1}}{L_{11}^1} + \frac{\gamma_{20} \cdot \gamma_{10}}{L_{11}^0} + \frac{\gamma_{21} \cdot \gamma_{11}}{L_{11}^1} \right) = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_1^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \frac{1}{L_{11}^1} (-i\lambda_2\lambda_1 + i\lambda_2\lambda_1) = 0$$

$$\tau_{22} = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_2^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \left(\frac{\gamma_{2-1} \cdot \gamma_{2-1}}{L_{11}^1} + \frac{\gamma_{20} \cdot \gamma_{20}}{L_{11}^0} + \frac{\gamma_{21} \cdot \gamma_{21}}{L_{11}^1} \right) = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_2^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \frac{1}{L_{11}^1} (\lambda_2^2 + \lambda_2^2) = -\sqrt{G} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \frac{1}{L_{11}^1} = \tau_{11}$$

$$\tau_{23} = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_3^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \left(\frac{\gamma_{2-1} \cdot \gamma_{3-1}}{L_{11}^1} + \frac{\gamma_{20} \cdot \gamma_{30}}{L_{11}^0} + \frac{\gamma_{21} \cdot \gamma_{31}}{L_{11}^1} \right) = 0$$

$$\tau_{31} = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_1^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \left(\frac{\gamma_{3-1} \cdot \gamma_{1-1}}{L_{11}^1} + \frac{\gamma_{30} \cdot \gamma_{10}}{L_{11}^0} + \frac{\gamma_{31} \cdot \gamma_{11}}{L_{11}^1} \right) = 0$$

$$\tau_{32} = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_2^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \left(\frac{\gamma_{3-1} \cdot \gamma_{2-1}}{L_{11}^1} + \frac{\gamma_{30} \cdot \gamma_{20}}{L_{11}^0} + \frac{\gamma_{31} \cdot \gamma_{21}}{L_{11}^1} \right) = 0$$

$$\tau_{33} = -\frac{\sqrt{G}}{2\lambda_3^2} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \left(\frac{\gamma_{3-1} \cdot \gamma_{3-1}}{L_{11}^1} + \frac{\gamma_{30} \cdot \gamma_{30}}{L_{11}^0} + \frac{\gamma_{31} \cdot \gamma_{31}}{L_{11}^1} \right) = -\sqrt{G} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \frac{1}{L_{11}^0}$$

Designando $\tau_{11} = \tau_{22} = \tau_{\perp}$; $\tau_{33} = \tau_{\parallel}$, obteremos

$$\tau_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \tau_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \tau_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{\parallel} \end{pmatrix} \quad (\text{II.8.7})$$

onde
$$\tau_{\perp} = -\frac{\sqrt{G}}{L_{11}^1} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R}; \tau_{\parallel} = -\frac{\sqrt{G}}{L_{11}^0} \frac{d\bar{f}_R^0}{d\bar{x}_R} \quad (\text{II.8.8})$$

Sublinhemos que o tensor dos tempos de relaxação, para diferentes mecanismos de espalhamento dos electrões, pode ser calculado usando os métodos da teoria de espalhamento[23], em particular, os métodos da teoria do espalhamento anisotrópico (TEA)[2,22].

9. Tensor da conductibilidade eléctrica

Como já foi determinada a relação entre o tensor da conductibilidade eléctrica e o tensor do tempo de relaxação, fórmula (II.8.2), e sabendo que o tensor do tempo de relaxação é diagonal, já é fácil concluir que o tensor da conductibilidade eléctrica é também diagonal.

Escrevemos os componentes do tensor $\tilde{\sigma}$ assim,

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} \equiv \sigma_{\perp} = -\frac{e^2 (2KT)^{3/2} \cdot m_{\parallel}^{1/2}}{3\pi^2 \cdot \hbar^3} \int_0^{\infty} dx \cdot x^{3/2} \frac{df_{\bar{K}}^0}{d\bar{x}_{\bar{K}}} \tau_{\perp} \quad (\text{II.9.1})$$

$$\sigma_{33} \equiv \sigma_{\parallel} = -\frac{e^2 (2KT)^{3/2} \cdot m_{\parallel}^{1/2}}{3\pi^2 \cdot \hbar^3} \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}} \int_0^{\infty} dx \cdot x^{3/2} \frac{df_{\bar{K}}^0}{d\bar{x}_{\bar{K}}} \cdot \tau_{\parallel} \quad (\text{II.9.2})$$

Introduzimos a designação

$$d_0 = -\frac{e^2 (2KT)^{3/2} \cdot m_{\parallel}^{1/2}}{3\pi^2 \hbar^3} = -d_{01} \quad (\text{II.9.3})$$

Além disso tomemos em conta, segundo (II.2.2), que $\bar{f}_{\bar{K}}^0 = e^{\frac{\bar{\mu} - \epsilon_{\bar{K}} - E^{(s)}}{KT}}$ ou, por (II.2.3'), $\bar{f}_{\bar{K}}^0 = e^{-\bar{x}_{\bar{K}}}$, portanto,

$$\frac{df_{\bar{K}}^0}{d\bar{x}_{\bar{K}}} = -e^{-\bar{x}_{\bar{K}}} = -e^{\frac{\bar{\mu} - E^{(s)}}{KT}} \cdot e^{-x} \quad (\text{II.9.4})$$

Daí que o tensor de conductibilidade eléctrica para um mínimo arbitrário, por exemplo, "s"-gésimo terá a forma:

$$\sigma_{\perp}^{(s)} = d_{01} \cdot e^{\frac{\bar{\mu} - E^{(s)}}{KT}} \int_0^{\infty} dx \cdot x^{3/2} e^{-x} \cdot \tau_{\perp} \quad (\text{II.9.5})$$

$$\sigma_{\parallel}^{(s)} = d_{01} \cdot \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}} e^{\frac{\bar{\mu} - E^{(s)}}{KT}} \int_0^{\infty} dx \cdot x^{3/2} e^{-x} \cdot \tau_{\parallel} \quad (\text{II.9.6})$$

É de salientar, mais uma vez, que para calcular o tensor de conductibilidade eléctrica para um cristal é necessário realizar o somatório por todos os mínimos considerados no modelo escolhido segundo as fórmulas (II.4.2) e (II.4.3).

III. Espalhamento dos electrões em L_1 e Δ_1 mínimos modelo Germânio

Neste capítulo, consideraremos os mecanismos principais de espalhamento de electrões no modelo considerado de Germânio[22].

Obteremos as expressões analíticas para os componentes do tensor da conductibilidade eléctrica para um mínimo da energia e os do tensor da conductibilidade eléctrica total do cristal.

1. Espalhamento por fonões acústicos em L_1 e Δ_1 mínimos de Germânio

a. Números de preenchimento

Sendo conhecidos os potenciais da deformação dos mínimos na banda de condução do Ge e Si, analizaremos em breve as expressões para o número de portadores de carga (electrões), em cada grupo de mínimos, $N_1^{(i)}$, $N_2^{(1,2)}$, $N_2^{(3-6)}$ e sua dependência em relação a deformação [21,26].

Foram obtidos as expressões seguintes:

$$N_1^{(i)} = AN_1^0 \exp(-E_i^*) ; N_2^{(1,2)} = AN_2^0 \exp(-E_k^{(1)*}) ; N_2^{(3,4,5,6)} = AN_2^0 \exp(-E_k^{(2)*}) \quad (\text{III-1a})$$

(onde, a expressão correspondente ao coeficiente A está apresentada no apêndice-II)

Os números dos portadores de carga são tais que cumpre-se a equação de neutralidade seguinte:

$$4N_1^{(i)} + 2N_2^{(1,2)} + 4N_2^{(3,4,5,6)} = N'_0 \quad (\text{III-1b})$$

Dividindo a última equação por N'_0 tem-se $n_1 = \frac{N_1^{(i)}}{N'_0}$, $n_2 = \frac{N_2^{(1,2)}}{N'_0}$ e $n_3 = \frac{N_2^{(3-6)}}{N'_0}$ então (III-1b) toma a

$$\text{forma} \quad 4n_1 + 2n_2 + 4n_3 = 1 \quad (\text{III-1c})$$

onde n_1 , n_2 e n_3 são denominados números de preenchimento.

Na ausência da deformação, N'_0 (concentração total dos portadores) é dada pela expressão:

$$N'_0 = 4N_1^0 + 6N_2^0$$

Sendo conhecidos N_1^0 e N_2^0 , os cálculos dos números de preenchimento n_1 , n_2 e n_3 são os seguintes:

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

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

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

onde E_i^* , $E_k^{(1)*}$ e $E_k^{(2)*}$ são os potenciais de deformação reduzidos e ΔE^* é a variação de energia reduzida, entre os mínimos não equivalentes, $m_N^{(S)}$ e $m_N^{(C)}$ são as massas eficazes da densidade de estados em Δ_1 e L_1 mínimos, respectivamente.

Os números de preenchimento (n_1, n_2, n_3) estão calculados numericamente através do programa elaborado em "Pascal", assim como a verificação da equação da neutralidade (veja o anexo-I).

b. Tensor da conductibilidade eléctrica

Determinaremos a expressão para o cálculo do tensor da conductibilidade eléctrica para o "r" mínimo da energia, partindo da forma geral seguinte:

$$\sigma_{\alpha\beta}^{(r)} = \frac{e^2 N^{(r)}}{m} \langle \tau_{\alpha\beta} \rangle \quad (\text{III.1.1})$$

Componentes do tensor da conductibilidade σ_{ii} , para um mínimo de energia, foram definidos em [II.3.5].

Quando se trata de espalhamento por fonões acústicos, segundo a teoria de espalhamento anisotrópico [2,16,21,22,26]

$$\text{temos} \quad \tau_{\parallel} = \frac{\tau_{0a}}{\phi_{0a}}; \tau_{\perp} = \frac{\tau_{0a}}{\phi_{1a}} \text{ com } \tau_0 = \frac{\pi C'_{11} \hbar^4}{\sqrt{2KTC_1^2 \sqrt{m_{\perp}^2 m_{\parallel}} \sqrt{\epsilon_{\bar{k}}}}} \quad (\text{III.1.2})$$

Assim, o tensor do tempo de relaxação tem a forma

$$\tau_{\parallel} = \frac{a_{\parallel}}{T\sqrt{\epsilon}}; \tau_{\perp} = \frac{a_{\perp}}{T\sqrt{\epsilon}}; a_{\parallel} = \frac{\pi \cdot C'_{11} \hbar^4}{\sqrt{2KC_1^2 \sqrt{m_{\perp}^2 m_{\parallel}}}} \cdot \frac{1}{\phi_{0a}}; a_{\perp} = \frac{\pi \cdot C'_{11} \hbar^4}{\sqrt{2KC_1^2 \sqrt{m_{\perp}^2 m_{\parallel}}}} \cdot \frac{1}{\phi_{1a}}$$

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

Para o n-Ge, valores das constantes:

$$C'_{44} = 0,562 \cdot 10^{+12} \text{ dines.cm}^{-2}$$

$$C'_{11} = 1,592 \cdot 10^{+12} \text{ dines.cm}^{-2}$$

A seguir temos as expressões das funções ϕ_{0a} e ϕ_{1a} , para os mínimos L_1 (germânicos) e Δ_1 (silícicos), respectivamente [2] e (no caso dos Δ_1 mínimos escrevemos as expressões gerais, pois os valores das massas eficazes e constantes dos potenciais da deformação não são bem conhecidas e no futuro teremos de determiná-las).

$$L_1: \quad \phi_{0a} = 1 + 1,88 \frac{C_2}{C_1} + 1,03 \frac{C_2^2}{C_1^2}; \quad \phi_{1a} = 1 + 1,24 \frac{C_2}{C_1} + 0,870 \frac{C_2^2}{C_1^2}$$

$$\phi_{0a} = 1 + \frac{2(1+\beta^2)}{\beta^2} \left(1 - \frac{3}{\beta^2} + \frac{3a}{\beta^3} \right) \frac{C_2}{C_1} + \frac{1+\beta^2}{\beta^4} \cdot \frac{C_2^2}{C_1^2}$$

$$\Delta_1: \left[(1+\beta^2) \left(1 - \frac{6}{\beta^2} - \frac{3}{2\beta^2(1+\beta^2)} + \frac{15a}{2\beta^3} \right) + \frac{C'_{11}}{C'_{44}} \left(2 + \frac{15}{2\beta^2} - \frac{3}{2\beta^3} (5+3\beta^2)a \right) \right]$$

$$\phi_{1a} = 1 + \frac{1+\beta^2}{\beta^2} \left[2 + \frac{3}{\alpha^2} - \frac{3(1+\beta^2)}{\beta^3} \cdot a \right] \frac{C_2}{C_1} + \frac{(1+\beta^2)}{\beta^4} \cdot \frac{C_2^2}{C_1^2}$$

$$\left\{ (1+\beta^2) \left[1 + \frac{15}{4\beta^2} - \frac{3}{4\beta^3} (5+3\beta^2)a \right] + \frac{C'_{11}}{4C'_{44}} \left[-13 - \frac{15}{\beta^2} + \frac{3(1+\beta^2)}{\beta^3} (5+\beta^2)a \right] \right\}$$

tendo em conta que: $a = \arctg \beta$ e $\beta^2 = (m_3 - m_1) / m_1$

Variando os valores de β , C_1 e C_2 , podemos determinar ϕ_{0a} e ϕ_{1a} com base em programas elaborados para este fim (veja anexo-I).

No capítulo (II.9.4), determinamos a derivada $\frac{df_{\vec{k}}^0}{d\vec{x}_{\vec{k}}}$; tomando em conta a designação (II.9.3) teremos

os componentes do tensor da conductibilidade eléctrica (II.9.5,6).

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

$$\tau_{||} = \frac{a_{||}}{T \sqrt{\frac{\epsilon}{KT}} KT} = \frac{a_{||}}{T \sqrt{KT}} x^{-1/2}; \quad \tau_{\perp} = \frac{a_{\perp}}{T \sqrt{\frac{\epsilon}{KT}} KT} = \frac{a_{\perp}}{T \sqrt{KT}} x^{-1/2} \quad (\text{III.1.3})$$

Substituindo (III.1.3) em (II.9.5,6) obtemos

$$\sigma_{11}^{(S)} = \sigma_{22}^{(S)} = d_{01} \cdot \exp(\bar{\mu}^* - E_i^*) \frac{a_{\perp}}{T \sqrt{KT}} \int_0^{\infty} dx \cdot x \cdot e^{-x} = \frac{d_{01}}{T \sqrt{KT}} a_{\perp} \exp(\bar{\mu}^* - E_i^*)$$

$$\sigma_{33}^{(S)} = \frac{d_{01} \cdot a_{||}}{T \sqrt{KT}} \cdot \frac{m_{\perp}}{m_{||}} \exp(\bar{\mu}^* - E_i^*) \quad (\text{III.1.4})$$

Tomando em conta a deformação uniaxial ao longo do eixo [001], o tensor da conductibilidade eléctrica para todo o cristal, será como segue (lembrando que os mínimos da energia do Ge dividem-se em quatro mínimos L_1 idênticos, dois e quatro mínimos Δ_1 "silícicos"), no referencial laboratorial:

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta} = \sum_{S=1}^4 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(S)C} + \sum_{S=1}^2 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(S)S} + \sum_{S=1}^4 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(S)S} \quad (\text{III.1.5})$$

ou na forma

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta} = \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^C + \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{S(1,2)} + \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{S(3-6)} \quad (\text{III.1.6})$$

Usando matrizes de transição $a_{\alpha\gamma}$ e $a_{\beta\delta}$ do referencial elipsoidal para o laboratorial, podemos calcular os componentes do tensor da conductibilidade eléctrica $\sigma_{\alpha\beta}^{(i)}$; isto é :

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)} = \sum_{\gamma,\delta} a_{\alpha\gamma}^{(i)} a_{\beta\delta}^{(i)} \sigma_{\gamma\delta}^{(i)} \quad (\text{III.1.7})$$

de modo semelhante a (II.4.3); transformação já vista.

O tensor da conductibilidade eléctrica tem a forma diagonal no referencial elipsoidal, segundo referimos no parágrafo (9.), capítulo (II), por isso realizando somatório em (III.1.7) temos

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)} = \sum_{\gamma,\delta} a_{\alpha\gamma}^{(i)} a_{\beta\delta}^{(i)} \sigma_{\gamma\delta}^{(i)} = \sum_{\gamma} a_{\alpha\gamma}^{(i)} a_{\beta\gamma}^{(i)} \sigma_{\gamma\gamma}^{(i)} = a_{\alpha 1}^{(i)} a_{\beta 1}^{(i)} \sigma_{11} + a_{\alpha 2}^{(i)} a_{\beta 2}^{(i)} \sigma_{22} + a_{\alpha 3}^{(i)} a_{\beta 3}^{(i)} \sigma_{33} \quad (\text{III.1.8})$$

Salientamos que matrizes da transição estão dadas em apêndice-I.

O tensor da conductibilidade eléctrica total do cristal tem a forma

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^4 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)L_1} + \sum_{i=1}^2 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)\Delta_1} + \sum_{i=1}^4 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)\Delta_2} \quad (\text{III.1.9})$$

onde $\sum_{i=1}^4 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)L_1} = \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(1)L_1} + \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(2)L_1} + \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(3)L_1} + \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(4)L_1}$, neste último somatório os termos são todos iguais

entre si, por isso, cálculos realizados mostram que

$$\sum_{i=1}^4 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)L_1} = \frac{4}{3} (2\sigma_{11} + \sigma_{33}) = \frac{4}{3} \sigma_{33} (2\kappa^C + 1);$$

o segundo termo de (III.1.9) tem o resultado

$$\sum_{i=1}^2 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)\Delta_1} = \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(1)} + \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(2)}; \quad \tilde{\sigma}_{11}^{\Delta(1,2)} = \tilde{\sigma}_{22}^{\Delta(1,2)} = \tilde{\sigma}_{11}^{\Delta(1)} + \tilde{\sigma}_{11}^{\Delta(2)} = 2\sigma_{11}; \quad \tilde{\sigma}_{33}^{\Delta(1,2)} = 2\sigma_{33}$$

e o terceiro termo

$$\sum_{i=1}^4 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)\Delta_2} = \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(3)} + \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(4)} + \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(5)} + \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(6)}; \quad \tilde{\sigma}_{11}^{\Delta_1(3-6)} = \tilde{\sigma}_{22}^{\Delta_1(3-6)} = 2\sigma_{11} + 2\sigma_{33}; \quad \tilde{\sigma}_{33}^{\Delta_1(3-6)} = 4\sigma_{11}$$

Destes cálculos, concluímos que os componentes diagonais são iguais entre si. E quanto aos componentes não diagonais, cálculos realizados mostram que estes anulam-se. Esta conclusão deve-se ao sentido da força de deformação, isto é, acção $P_{//}$ [001]; assim o tensor da conductibilidade eléctrica para os mínimos germânicos transforma-se num escalar, portanto, todos os mínimos tornam-se equivalentes;

$$\hat{\sigma}^C = \frac{4}{3} \sigma_{33}^{C(1)} (2\kappa^C + 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ onde}$$

($\kappa^C = \frac{\sigma_{\perp}}{\sigma_{\parallel}}$) denomina-se parâmetro de anisotropia dos mínimos germânicos, e $\sigma_{33}^{C(1)}$ é a conductibilidade eléctrica longitudinal (ao longo do maior eixo do elipsóide da revolução) para um mínimo de energia.

Pelo procedimento idêntico, foi calculado o tensor ligado com Δ_1 mínimos silícicos, e obteve-se

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{S(1,2)} = 2\sigma_{33}^{S(1)} \begin{pmatrix} \kappa^S & 0 & 0 \\ 0 & \kappa^S & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ para os dois mínimos que descem e}$$

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{S(3-6)} = 2\sigma_{33} \begin{pmatrix} \kappa^S + 1 & 0 & 0 \\ 0 & \kappa^S + 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2\kappa^S \end{pmatrix} \text{ para os quatro mínimos que sobem,}$$

sendo $\kappa^S = \frac{\sigma_{\perp}}{\sigma_{\parallel}}$ parâmetro da anisotropia.

Com base na fórmula (III.1.6) escrevemos os componentes do tensor da conductibilidade eléctrica, sem tomar em conta o parâmetro de anisotropia, assim

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{11} = \tilde{\sigma}_{22} &= \frac{4}{3} (2\sigma_{11}^C + \sigma_{33}^C) + 2\sigma_{11}^{S(1)} + 2(\sigma_{11}^{S(3-6)} + \sigma_{33}^{S(3-6)}) \\ \tilde{\sigma}_{33} &= \frac{4}{3} (2\sigma_{11}^C + \sigma_{33}^C) + 2\sigma_{33}^{S(1)} + 4\sigma_{11}^{S(3-6)} \end{aligned} \quad (\text{III.1.10})$$

Tomando em conta a expressão para $e^{\frac{\mu}{kT}}$ [21,26] (veja apêndice-II) e relação (III.1.4) no caso dos mínimos germânicos, as componentes diagonais σ_{ii} exprimem-se da seguinte maneira:

$$\sigma_{11}^C \equiv \sigma_{22}^C = \frac{N'_0 n_C e^2}{m_{\perp}^C} \frac{4}{3} \frac{a_{\perp}^C}{T \sqrt{\pi} K T} \quad (\text{III.1.11})$$

$$\sigma_{33}^C = \frac{N'_0 n_C e^2}{m_{\parallel}^C} \frac{4}{3} \frac{a_{\parallel}^C}{T \sqrt{\mu} K T} \quad (\text{III.1.12})$$

Para os mínimos silícicos, obtém-se os componentes, também por analogia

$$\sigma_{11}^{S(1,2)} = \frac{N'_0 n_1^S e^2}{m_{\perp}^S} \frac{4}{3} \frac{a_{\perp}^S}{T\sqrt{\pi}KT}; \sigma_{33}^{S(1,2)} = \frac{N'_0 n_1^S e^2}{m_{\parallel}^S} \frac{4}{3} \frac{a_{\parallel}^S}{T\sqrt{\pi}KT}$$

$$\sigma_{11}^{S(3-6)} = \frac{N'_0 n_2^S e^2}{m_{\perp}^S} \frac{4}{3} \frac{a_{\perp}^S}{T\sqrt{\pi}KT}; \sigma_{33}^{S(3-6)} = \frac{N'_0 n_2^S e^2}{m_{\parallel}^S} \frac{4}{3} \frac{a_{\parallel}^S}{T\sqrt{\pi}KT} \quad (\text{III.1.13})$$

Substituindo em (III.1.10) as relações (III.1.11,12,13), teremos as expressões correspondentes aos componentes do tensor da conductibilidade[21,26];

$$\tilde{\sigma}_{11} = \frac{8}{3} \frac{N'_0 e^2}{T\sqrt{\pi}KT} \left[\frac{2n_C}{3} \left(2 \frac{a_{\perp}^C}{m_{\perp}^C} + \frac{a_{\parallel}^C}{m_{\parallel}^C} \right) + n_1^S \frac{a_{\perp}^S}{m_{\perp}^S} + n_2^S \left(\frac{a_{\perp}^S}{m_{\perp}^S} + \frac{a_{\parallel}^S}{m_{\parallel}^S} \right) \right], \quad (\text{III.1.14})$$

$$\tilde{\sigma}_{33} = \frac{8}{3} \frac{N'_0 e^2}{T\sqrt{\pi}KT} \left[\frac{2n_C}{3} \left(2 \frac{a_{\perp}^C}{m_{\perp}^C} + \frac{a_{\parallel}^C}{m_{\parallel}^C} \right) + n_1^S \frac{a_{\parallel}^S}{m_{\parallel}^S} + 2n_2^S \frac{a_{\perp}^S}{m_{\perp}^S} \right] \quad (\text{III.1.15})$$

O cálculo destes, faz-se numericamente mediante o programa elaborado em Pascal(veja o anexo-I).

2. Espalhamento por iões de impurezas em L_1 e Δ_1 mínimos. Espalhamento misto.

O tensor dos tempos de relaxação; neste caso, também tem a forma diagonal (II.8.7), com componentes[2,22]:

$$\tau_{\perp} = \frac{\tau_{0i}}{\phi_{1i}} \quad ; \quad \tau_{\parallel} = \frac{\tau_{0i}}{\phi_{0i}} \quad (\text{III.2.1})$$

No caso da ausência da degeneração as funções ϕ_{0i} e ϕ_{1i} tem a forma[2,22]:

$$\phi_{0i} = \frac{3}{2\beta^3} \left\{ \left(\frac{\beta}{1+\beta^2} - a \right) \ln \gamma^2 - a \ln(1+\beta^2) + 2L(a) + \frac{\beta\gamma^2}{2} \left[\frac{\beta^2-1}{\beta^2+1} + \frac{a}{\beta} (\beta^2+1) \right] \right\} \quad (\text{III.2.2})$$

$$\phi_{1i} = \frac{3}{4\beta^3} \left\{ \left[(1-\beta^2)a - \beta \right] \ln \gamma^2 + 2(\beta^2-1)L(a) - 2a\beta^2 - (\beta^2-1)a \ln(1+\beta^2) + \frac{\gamma^2}{2} \left[\beta(1+3\beta^2) + a(-1+2\beta^2+3\beta^4) \right] \right\} \quad (\text{III.2.3})$$

Nestas fórmulas são introduzidas as designações seguintes:

$L(a)$ é a função de Lobachevskyi

$$L(x) = - \int_0^x \ln(\cos \varphi) d\varphi \quad ; \quad \beta^2 = \frac{m_{\parallel} - m_{\perp}}{m_{\perp}} \quad ; \quad a = \text{arctg } \beta \quad ; \quad \gamma^2 = \frac{\hbar^2}{8m_{\parallel}\mathfrak{R}_0\epsilon} \quad ;$$

\mathfrak{R}_0 é o raio de blindagem;

$$\tau_{0i} = \frac{\sqrt{2}m_{\perp}E_0^2\varepsilon^{3/2}}{\pi \cdot Ne^4\sqrt{m_{\parallel}}}; \quad E_0 \text{ é a permissividade dieléctrica } (E_0=16 \text{ para n-Ge}), N \text{ é a}$$

concentração dos electrões, ε é a energia dos electrões. O raio de blindagem calcula-se segundo a fórmula conhecida[11,12,13]:

$$\mathfrak{R}_0^{-2} = \frac{4\pi \cdot e^2 n'}{E_0 KT}; \quad \text{onde } n' = n_e + (n_e + N_a) \left(1 - \frac{n_e + N_a}{N_d}\right)$$

Aqui n_e é a concentração dos electrões na banda de condução, N_a e N_d são as concentrações das impurezas aceitadoras e doadoras, respectivamente. A grandeza n' toma em conta a influência das impurezas de compensação para a blindagem.

Supondo que $n_e = N_d$ (impurezas doadoras são ionizadas completamente $N_a=0$, não há compensação, isto é, o cristal é puro), teremos $n' = n_e \equiv N$.

Reescrevemos agora as fórmulas acima mencionadas introduzindo a energia adimensional

$$x = \frac{\varepsilon}{KT},$$

$$\gamma^2 = \frac{\hbar^2}{8m_{\parallel}\mathfrak{R}_0^2\varepsilon} = \frac{\hbar^2}{8m_{\parallel}\mathfrak{R}_0^2KT} \cdot \frac{1}{x} \quad (\text{III.2.4})$$

$$\tau_{0i} = \frac{\sqrt{2}m_{\perp}E_0^2\varepsilon^{3/2}}{\pi \cdot N \cdot e^4 \sqrt{m_{\parallel}}} = \frac{\sqrt{2}m_{\perp}E_0^2(KT)^{3/2}}{\pi \cdot N \cdot e^4 \sqrt{m_{\parallel}}} \cdot x^{3/2} = \tau'_{0i} \frac{T^{3/2}}{N} \cdot x^{3/2} \quad (\text{III.2.5})$$

$$\text{onde} \quad \tau'_{0i} = \frac{\sqrt{2}E_0^2 K^{3/2}}{\pi \cdot e^4} \cdot \frac{m_{\perp}}{\sqrt{m_{\parallel}}} \quad (\text{III.2.5a})$$

Consideremos o "Espalhamento misto" (por fónões acústicos e por iões das impurezas). O tempo de relaxação será:

$$\frac{1}{\tau_{\parallel}} = \frac{1}{\tau_{\parallel a}} + \frac{1}{\tau_{\parallel i}}; \quad \frac{1}{\tau_{\perp}} = \frac{1}{\tau_{\perp a}} + \frac{1}{\tau_{\perp i}} \quad (\text{III.2.6})$$

Recordemos que segundo os dados do parágrafo anterior (III.1.3), segue

$$\tau_{\parallel a} = \frac{a_{\parallel}}{T\sqrt{KT} \cdot \sqrt{x}}, \tau_{\perp a} = \frac{a_{\perp}}{T\sqrt{KT} \cdot \sqrt{x}}; \quad a_{\parallel} = \frac{\pi \cdot C'_{\parallel} \cdot \hbar^4}{K \cdot C_1^2 \sqrt{2m_{\parallel}m_{\perp}^2}} \cdot \frac{1}{\phi_{0a}};$$

$$a_{\perp} = \frac{\pi \cdot C'_{\perp} \cdot \hbar^4}{K C_1^2 \sqrt{2m_{\parallel}m_{\perp}^2}} \cdot \frac{1}{\phi_{1a}} \quad (\text{III.2.7})$$

Todas as designações coincidem com as anteriores. Para os inversos dos tempos de relaxação, obteremos, usando as fórmulas deste parágrafo;

$$\frac{1}{\tau_{II}} = \frac{1}{\tau_{IIa}} + \frac{1}{\tau_{III}} = \frac{x^2 + \frac{a_{II} \cdot \phi_{0i} \cdot N}{\tau'_{0i} \cdot T^{5/2} \sqrt{KT}}}{\frac{a_{II}}{T\sqrt{KT}} \cdot x^{3/2}} = \frac{x^2 + b_0}{\frac{a_{II}}{T\sqrt{KT}} \cdot x^{3/2}};$$

onde
$$b_0 = \frac{a_{II} \cdot \phi_{0i} \cdot N}{\tau'_{0i} \cdot T^{5/2} \sqrt{KT}} \quad \text{III.2.8)}$$

$$\tau_{II} = \frac{a_{II}}{T\sqrt{KT}} \cdot \frac{x^{3/2}}{x^2 + b_0} \quad \text{(III.2.9)}$$

$$\tau_{\perp} = \frac{a_{\perp}}{T\sqrt{KT}} \cdot \frac{x^{3/2}}{x^2 + b_1} \quad \text{(III.2.10)}$$

$$b_1 = \frac{a_{\perp}}{T\sqrt{KT}} \cdot \frac{\phi_{1i} \cdot N}{\tau'_{0i} \cdot T^{3/2}} \quad \text{(III.2.11)}$$

Apresentemos as grandezas b_0 e b_1 na forma mais pormenorizada para facilitar a análise e os cálculos numéricos posteriores, substituindo τ'_{0i}

$$b_0 = \frac{a_{II} \cdot N}{\tau'_{0i} \cdot T^{5/2} \sqrt{KT}} \cdot \phi_{0i} = \frac{a_{II} \cdot N}{\sqrt{K} \cdot \tau'_{0i} \cdot T^3} \cdot \phi_{0i} = \frac{\pi \cdot e^4 \cdot \sqrt{m_{II}}}{\sqrt{2K^2 E_0^2} \cdot m_{\perp}} \cdot a_{II} \cdot \frac{N}{T^3} \phi_{0i} \quad \text{(III.2.12)}$$

$$b_1 = \frac{a_{\perp}}{T\sqrt{KT}} \cdot \frac{N}{T^{3/2}} \cdot \frac{1}{\tau'_{0i}} \cdot \phi_{1i} = \frac{a_{\perp}}{T\sqrt{KT}} \cdot \frac{N}{T^{3/2}} \cdot \frac{\pi \cdot e^4 \cdot \sqrt{m_{II}}}{\sqrt{2 \cdot E_0^2 \cdot K^{3/2} \cdot m_{II}}} \cdot \phi_{1i} = \frac{\pi \cdot e^4}{\sqrt{2 \cdot K^2 \cdot E_0^2}} \cdot \frac{\sqrt{m_{II}}}{m_{\perp}} \cdot a_{\perp} \cdot \frac{N}{T^3} \phi_{1i} \quad \text{(III.2.13)}$$

Sublinhemos que as grandezas a_{II} , a_{\perp} , ϕ_{0i} e ϕ_{1i} dependem das massas eficazes dos electrões, e além disso, a_{II} e a_{\perp} dependem das constantes dos potenciais de deformação dos mínimos respectivos.

Como se sabe, as características dos L_1 mínimos do Ge (isto é, as massas eficazes e as constantes dos potenciais de deformação) são bem conhecidos e por isso para estes mínimos da energia, grandezas b_0 e b_1 podem ser escritas na forma reduzida, substituindo os valores das massas eficazes e as constantes dos potenciais de deformação:

$$b_0 = 2,65 \cdot 10^5 \frac{a_{II}^L \cdot N}{T^3} \left(32 + \ln \frac{x \cdot T^2}{N} + 1,26 \cdot 10^{-14} \cdot \frac{N}{x \cdot T^2} \right);$$

$$b_1 = 3,23 \cdot 10^6 \frac{a_{\perp}^L \cdot N}{T^3} \left(31 + \ln \frac{x \cdot T^2}{N} + 2,8 \cdot 10^{-14} \cdot \frac{N}{x \cdot T^2} \right) \quad \text{(III.2.14)}$$

Quanto aos Δ_1 mínimos, a situação é mais complicada, uma vez que para este tipo dos mínimos, em n-Ge até agora ainda não foram estabelecidas definitivamente as massas eficazes bem como as constantes

dos potenciais de deformação. Por isso, nos cálculos numéricos posteriores, será necessário variar estas grandezas para atingir a coincidência quantitativa dos dados experimentais com as previsões teóricas, e portanto, as grandezas b_0 e b_1 para Δ_1 mínimos devem ser calculados através das fórmulas (III.2.2,3,4,12,13).

O tensor da conductibilidade eléctrica para um mínimo é dado pelas fórmulas (II.9.5,6). Sendo substituídas nestas expressões as fórmulas, para os tempos de relaxação, respectivas (III.2.9,10), obtemos :

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} \equiv \sigma_{\perp} = d_{01} e^{\frac{\bar{\mu} - E^{(s)}}{KT}} \cdot \frac{a_{\perp}}{T\sqrt{KT}} \cdot \int_0^{\infty} dx \cdot \frac{x^3 \cdot e^{-x}}{x^2 + b_1} \quad (\text{III.2.15})$$

$$\sigma_{33} \equiv \sigma_{\parallel} = d_{01} e^{\frac{\bar{\mu} - E^{(s)}}{KT}} \cdot \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}} \cdot \frac{a_{\parallel}}{T\sqrt{KT}} \cdot \int_0^{\infty} dx \cdot \frac{x^3 \cdot e^{-x}}{x^2 + b_0} \quad (\text{III.2.16})$$

Tomando em conta a expressão para $e^{\frac{\bar{\mu}}{KT}}$ (veja apêndice-II) para os componentes σ_{ii} é fácil obter;

$$\sigma_{11} = \frac{N \cdot n_i \cdot e^2}{m_{\perp}} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\perp}}{T\sqrt{KT} \cdot \pi} \cdot \int_0^{\infty} dx \cdot \frac{x^3 \cdot e^{-x}}{x^2 + b_1} = \frac{N \cdot n_i \cdot e^2}{m_{\perp}} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\perp}}{T\sqrt{\pi \cdot KT}} \cdot J_1 \quad (\text{III.2.17})$$

$$\sigma_{33} = \frac{N \cdot n_i \cdot e^2}{m_{\parallel}} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\parallel}}{T\sqrt{\pi \cdot KT}} \cdot \int_0^{\infty} dx \cdot \frac{x^3 \cdot e^{-x}}{x^2 + b_0} = \frac{N \cdot n_i \cdot e^2}{m_{\parallel}} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\parallel}}{T\sqrt{\pi \cdot KT}} \cdot J_0 \quad (\text{III.2.18})$$

Nas fórmulas: $J_1 = \int_0^{\infty} dx \cdot \frac{x^3 \cdot e^{-x}}{x^2 + b_1}$; $J_0 = \int_0^{\infty} dx \cdot \frac{x^3 \cdot e^{-x}}{x^2 + b_0}$ (III.2.19)

N é a concentração total dos portadores de carga, n_i é o número de preenchimento, que segundo a definição (III.1a), $n_i = N_i / N$, onde N_i é o número de electrões em i -ésimo mínimo.

Sendo conhecidos os componentes do tensor $\tilde{\sigma}$ para um mínimo da energia, podemos escrever a expressão para o tensor da conductibilidade eléctrica total do cristal, tomando em conta que como foi mostrado em (III.1.5), sob a acção da deformação uniaxial ao longo do eixo [001] todos os mínimos considerados de energia subdividem-se em três grupos, recordando:

- Quatro mínimos do tipo L_1
- Dois mínimos do tipo Δ_1
- Quatro mínimos do tipo Δ_1

Então
$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^4 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)L_1} + \sum_{i=1}^2 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)\Delta_1} + \sum_{i=1}^4 \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)\Delta_1} \quad (\text{III.2.20})$$

Na expressão escrita $\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}$ são os componentes do tensor $\tilde{\sigma}$ no referencial laboratorial.

A última fórmula pode ser reescrita designando os termos com o símbolo da soma, por uma letra σ , de maneira seguinte:

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta} = \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{L_1} + \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{\Delta_1(1,2)} + \tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{\Delta_1(3-6)} \quad (\text{III.2.21})$$

Os componentes $\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)}$ podem ser calculadas na base da expressão

$$\tilde{\sigma}_{\alpha\beta}^{(i)} = \sum_{e,m} a_{\alpha e}^{(i)} a_{\beta m}^{(i)} \sigma_{em}^{(i)} \quad (\text{III.2.22})$$

onde $a_{\alpha e}^{(i)}$ são matrizes de transição do referencial elipsoidal para o cristalográfico. A forma explícita destas matrizes foi calculada em (III.1), e para simplificar a leitura e os cálculos respectivos, está dada em apêndice-I.

Realizando o somatório por elipsóides de maneira completamente análoga aos cálculos feitos em parágrafo (1) deste capítulo, a fórmula (III.2.21) passa a ser :

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{11} = \tilde{\sigma}_{22} &= \frac{4}{3} (2\sigma_{11}^{L_1} + \sigma_{33}^{L_1}) + 2\sigma_{11}^{\Delta_1(1,2)} + 2(\sigma_{11}^{\Delta_1(3-6)} + \sigma_{33}^{\Delta_1(3-6)}) \\ \tilde{\sigma}_{33} &= \frac{4}{3} (2\sigma_{11}^{L_1} + \sigma_{33}^{L_1}) + 2\sigma_{33}^{\Delta_1(1,2)} + 4\sigma_{33}^{\Delta_1(3-6)} \end{aligned} \quad (\text{III.2.23})$$

Nas últimas duas expressões temos:

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^{L_1} &= \frac{N.n_1.e^2}{m_{\perp}^{L_1}} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\perp}^{L_1}}{T\sqrt{\pi.KT}} \cdot J_1^{L_1}; & \sigma_{33}^{L_1} &= \frac{N.n_1.e^2}{m_{\parallel}^{L_1}} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\parallel}^{L_1}}{T\sqrt{\pi.KT}} \cdot J_0^{L_1} \\ \sigma_{11}^{\Delta_1(1,2)} &= \frac{N.n_2.e^2}{m_{\perp}^{\Delta_1}} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{T\sqrt{\pi.KT}} \cdot J_1^{\Delta_1}; & \sigma_{33}^{\Delta_1(1,2)} &= \frac{N.n_2.e^2}{m_{\parallel}^{\Delta_1}} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\parallel}^{\Delta_1}}{T\sqrt{\pi.KT}} \cdot J_0^{\Delta_1} \\ \sigma_{11}^{\Delta_1(3-6)} &= \frac{N.n_3.e^2}{m_{\perp}^{\Delta_1}} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{T\sqrt{\pi.KT}} \cdot J_1^{\Delta_1}; & \sigma_{33}^{\Delta_1(3-6)} &= \frac{N.n_3.e^2}{m_{\parallel}^{\Delta_1}} \cdot \frac{4}{3} \cdot \frac{a_{\parallel}^{\Delta_1}}{T\sqrt{\pi.KT}} \cdot J_0^{\Delta_1} \end{aligned} \quad (\text{III.2.24})$$

Em (III.1a) definimos os números de preenchimento respectivos aos mínimos do tipo L_1 e Δ_1 .

Tomando em conta as definições destes números de preenchimento, as fórmulas(III.2.23) tomarão a forma:

$$\tilde{\sigma}_{11} = \frac{8}{3} \frac{N.e^2}{T\sqrt{\pi.KT}} \left\{ \frac{2n_1}{3} \left(2 \frac{a_{\perp}^{L_1}}{m_{\perp}^{L_1}} J_1^{L_1} + \frac{a_{\parallel}^{L_1}}{m_{\parallel}^{L_1}} J_0^{L_1} \right) + n_2 \frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{m_{\perp}^{\Delta_1}} J_1^{\Delta_1} + n_3 \left(\frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{m_{\perp}^{\Delta_1}} J_1^{\Delta_1} + \frac{a_{\parallel}^{\Delta_1}}{m_{\parallel}^{\Delta_1}} J_0^{\Delta_1} \right) \right\} \quad (\text{III.2.26})$$

$$\tilde{\sigma}_{33} = \frac{8}{3} \frac{N.e^2}{T\sqrt{\pi.KT}} \left\{ \frac{2n_1}{3} \left(2 \frac{a_{\perp}^{L_1}}{m_{\perp}^{L_1}} J_1^{L_1} + \frac{a_{\parallel}^{L_1}}{m_{\parallel}^{L_1}} J_0^{L_1} \right) + n_2 \frac{a_{\parallel}^{\Delta_1}}{m_{\parallel}^{\Delta_1}} J_0^{\Delta_1} + 2n_3 \frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{m_{\perp}^{\Delta_1}} J_1^{\Delta_1} \right\} \quad (\text{III.2.27})$$

É de salientar que as integrais inseridas nestas expressões só se calculam numericamente, segundo programa elaborado para este fim (anexo-I).

3. Mobilidade e parâmetro da anisotropia

Como se sabe [23,28,29], a concentração (N_0) dos electrões de condução nos semicondutores é uma função muito sensível em relação à temperatura e a presença das impurezas (doadoras ou aceitadoras) do cristal. Por isso, para a descrição das propriedades físicas dos cristais na ausência do campo magnético, em vez da conductibilidade eléctrica (cujo valor pode variar em centenas de vezes de um até outro cristal devido a variação de N_0) é cómodo usar o conceito da mobilidade μ , que se determina através da conductibilidade eléctrica, de modo seguinte:

$$\mu = \frac{\sigma}{N_0 e} \quad (\text{III.3.1})$$

É sabido [12], que a mobilidade μ está ligado com a velocidade média do deslocamento (da deriva) dos electrões, num cristal, submetido a acção de um campo eléctrico E , pela relação;

$$v_d = \mu E \quad (\text{III.3.2})$$

de onde segue que

$$\mu = \frac{v_d}{E} \quad (\text{III.3.3})$$

isto é, numericamente, a mobilidade é igual à velocidade do deslocamento (da deriva) dos electrões num campo eléctrico $E=1$.

Por esta razão, a grandeza μ definida pela fórmula (III.3.3), chama-se mobilidade de deriva.

As fórmulas (III.3.1 e 3), no caso dum cristal isotrópico podem ser obtidas usando um raciocínio muito simples. A densidade da corrente eléctrica pode ser, por um lado, expressa através da velocidade do deslocamento (da deriva) assim;

$$j = N_0 \cdot e \cdot v_d$$

e, por outro lado, é válida a lei de Ohm :

$$j = \sigma \cdot E$$

Igualando as partes direitas das duas últimas expressões, teremos;

$$v_d = \frac{\sigma}{N_0 \cdot e} E = \mu \cdot E$$

de onde, imediatamente seguem as fórmulas (III.3.1 e 3).

Sendo

$$\sigma = \frac{N_0 \cdot e^2 \langle \tau \rangle}{m}$$

a mobilidade pode ser expressa através do tempo de relaxação médio, assim:

$$\mu = \frac{e \cdot \langle \tau \rangle}{m} \quad (\text{III.3.4})$$

e vê-se que depende dos processos do espalhamento e massas eficazes dos portadores de carga.

As fórmulas citadas, facilmente podem ser generalizadas para o caso dos cristais anisotrópicos, pois, sabe-se que a conductibilidade eléctrica é um tensor da segunda ordem nos meios anisotrópicos e, portanto, a mobilidade da deriva dos portadores também deve ser tensor da segunda ordem, isto é,

$$\mu_{ik} = \frac{\sigma_{ik}}{N_0 \cdot e} = e \cdot m_{ie}^{-1} \langle \tau_{ek} \rangle \quad (\text{III.3.5})$$

$$v_{di} = \mu_{ik} \cdot E_k \quad (\text{III.3.6})$$

Tomando em conta as fórmulas (III.2.26 e 27) e definição (III.3.5), as expressões para os componentes do tensor da mobilidade no caso do L_1 - Δ_1 modelo do Ge, na presença da deformação elástica ao longo da direcção cristalográfica [001], terão a forma;

$$\mu_{11} = \mu_{22} = \frac{8}{3} \frac{e}{T \sqrt{\pi k T}} \left\{ \frac{2}{3} n_1 \left(2 \frac{a_{\perp}^{L_1}}{m_{\perp}^{L_1}} J_1^{L_1} + \frac{a_{\parallel}^{L_1}}{m_{\parallel}^{L_1}} J_0^{L_1} \right) + n_2 \frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{m_{\perp}^{\Delta_1}} J_1^{\Delta_1} + n_3 \left(\frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{m_{\perp}^{\Delta_1}} J_1^{\Delta_1} + \frac{a_{\parallel}^{\Delta_1}}{m_{\parallel}^{\Delta_1}} J_0^{\Delta_1} \right) \right\} \quad (\text{III.3.7})$$

$$\mu_{33} = \frac{8}{3} \frac{e}{T \sqrt{\pi k T}} \left\{ \frac{2}{3} n_1 \left(2 \frac{a_{\perp}^{L_1}}{m_{\perp}^{L_1}} J_1^{L_1} + \frac{a_{\parallel}^{L_1}}{m_{\parallel}^{L_1}} J_0^{L_1} \right) + n_2 \frac{a_{\parallel}^{\Delta_1}}{m_{\parallel}^{\Delta_1}} J_0^{\Delta_1} + 2 n_3 \frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{m_{\perp}^{\Delta_1}} J_1^{\Delta_1} \right\} \quad (\text{III.3.8})$$

Sublinhemos que as fórmulas (III.3.7 e 8) são válidas para o caso do espalhamento misto dos electrões, isto é, por fonões acústicos e por iões de impurezas. No caso do espalhamento dos electrões só por fonões acústicos, aquelas expressões são válidas assumindo que

$$J_1^{L_1} = J_0^{L_1} = J_1^{\Delta_1} = J_0^{\Delta_1} = 1$$

A razão das mobilidades $\frac{\mu_{11}}{\mu_{33}} \equiv \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}}$ ao longo dos eixos principais do tensor das massas

eficazes para os electrões dum mínimo de energia, chama-se parâmetro da anisotropia (κ) [2,12,16], isto é,

$$\kappa = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} = \frac{m_{\parallel} \langle \tau_{\perp} \rangle}{m_{\perp} \langle \tau_{\parallel} \rangle} \quad (\text{III.3.9})$$

$$\kappa = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} = \frac{m_{\parallel} \langle \tau_{\perp} \rangle}{m_{\perp} \langle \tau_{\parallel} \rangle} \quad (\text{III.3.9})$$

onde

$$\langle \tau_{\parallel, \perp} \rangle = \int_0^{\infty} dx \cdot x^{3/2} \frac{df}{dx} \cdot \tau_{\parallel, \perp} \quad (\text{III.3.10})$$

As vezes o parâmetro da anisotropia tem sido apresentado na forma:

$$\kappa = \frac{\kappa_m}{\kappa_r} \quad (\text{III.3.11})$$

em que $\kappa_m = \frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}}$ é o parâmetro da anisotropia das massas e $\kappa_r = \frac{\langle \tau_{\parallel} \rangle}{\langle \tau_{\perp} \rangle}$ é o parâmetro da anisotropia do espalhamento.

No caso do espalhamento misto, o parâmetro da anisotropia κ pode ser apresentado na forma (tomando em conta (III.2.9 e 10), (III.3.9 e 10) e (III.2.19)):

$$\kappa_i = \frac{m_{\parallel} a_{\perp} J_1}{m_{\perp} a_{\parallel} J_0} = \kappa_a \frac{J_1}{J_0} \quad (\text{III.3.12})$$

onde $\kappa_a = \frac{m_{\parallel} a_{\perp}}{m_{\perp} a_{\parallel}}$ é o parâmetro da anisotropia do espalhamento por fonões acústicos; grandezas a_{\parallel} e a_{\perp} são definidas pelas fórmulas (III.2.7).

Anotemos que os parâmetros da anisotropia para L_1 e Δ_1 mínimos são diferentes, uma vez que as massas eficazes e as condições do espalhamento dos electrões são diferentes e por isso atribuímos a estes parâmetros os índices L_1 e Δ_1 , respectivamente, isto é, escrevemos κ^{L_1} e κ^{Δ_1} .

As fórmulas (III.3.7 e 8) para as mobilidades de deriva é cómodo reescrevermos através dos parâmetros da anisotropia κ^{L_1} e κ^{Δ_1} , definidas pelas relações (III.3.9 e 12), assim:

$$\mu_{11} = \mu_{22} = \frac{8}{3} \frac{e}{T \sqrt{\pi K T}} \left\{ \frac{2}{3} n_1 \frac{a_{\parallel}^{L_1}}{m_{\parallel}^{L_1}} J_0^{L_1} (2\kappa^{L_1} + 1) + n_2 \frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{m_{\perp}^{\Delta_1}} J_1^{\Delta_1} + n_3 \frac{a_{\parallel}^{\Delta_1}}{m_{\parallel}^{\Delta_1}} J_0^{\Delta_1} (\kappa^{\Delta_1} + 1) \right\} \quad (\text{III.3.13})$$

$$\mu_{33} = \frac{8}{3} \frac{e}{T \sqrt{\pi K T}} \left\{ \frac{2}{3} n_1 \frac{a_{\parallel}^{L_1}}{m_{\parallel}^{L_1}} J_0^{L_1} (2\kappa^{L_1} + 1) + n_2 \frac{a_{\parallel}^{\Delta_1}}{m_{\parallel}^{\Delta_1}} J_0^{\Delta_1} + 2n_3 \frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{m_{\perp}^{\Delta_1}} J_1^{\Delta_1} \right\} \quad (\text{III.3.14})$$

No caso do espalhamento só por fonões acústicos, conforme já salientamos, as integrais nas expressões anteriores são iguais a unidade, isto é,

$$J_0^{L_1} = J_1^{L_1} = J_0^{\Delta_1} = J_1^{\Delta_1} = 1$$

assim as expressões (III.3.13 e 14) tomam a forma:

$$\mu_{11} = \mu_{22} = \frac{8}{3} \frac{e}{T\sqrt{\pi}KT} \left\{ \frac{2}{3} n_1 \frac{a_{||}^{L_1}}{m_{||}^{L_1}} (2\kappa_a^{L_1} + 1) + n_2 \frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{m_{\perp}^{\Delta_1}} + n_3 \frac{a_{||}^{\Delta_1}}{m_{||}^{\Delta_1}} (\kappa_a^{\Delta_1} + 1) \right\} \quad (\text{III.3.15})$$

$$\mu_{33} = \frac{8}{3} \frac{e}{T\sqrt{\pi}KT} \left\{ \frac{2}{3} n_1 \frac{a_{||}^{L_1}}{m_{||}^{L_1}} (2\kappa_a^{L_1} + 1) + n_2 \frac{a_{||}^{\Delta_1}}{m_{||}^{\Delta_1}} + 2n_3 \frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{m_{\perp}^{\Delta_1}} \right\} \quad (\text{III.3.16})$$

Na ausência da deformação ($P=0$) ou mesmo quando a pressão $P < 15.10^3$ kgf/cm², praticamente os electrões estão em quatro L_1 mínimos, pois a distância entre L_1 e Δ_1 mínimos, sob $P=0$, é igual a $E_0=0.18\text{eV}$ (veja a figura 1).

Portanto para o cristal não deformado $n_1=1/4$, $n_2 \approx n_3 \approx 0$ e as expressões para a mobilidade de deriva tornam-se igual a ;

$$\mu_{11} = \mu_{22} = \mu_{33} \equiv \mu = \frac{4}{9} \frac{e}{m_{||}^{L_1}} \frac{a_{||}^{L_1}}{T\sqrt{\pi}KT} (2\kappa_a^{L_1} + 1) \quad (\text{III.3.17})$$

Das fórmulas apresentadas acima, vê-se ainda que a mobilidade dos electrões, num mínimo, é anisotrópico, veja (III.3.9). Devido ao somatório por mínimos simetricamente situados na zona de Brillouin, a mobilidade completa dos portadores de carga será isotrópica. É fácil verificar usando as fórmulas (III.3.13 e 16) que esta afirmação é válida tanto para L_1 mínimos como para Δ_1 mínimos no cristal não deformado.

Para a estatística não degenerada dos portadores de carga, a integral (III.3.10) toma a forma

$$\langle \tau_{\perp||} \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx x^{3/2} e^{-x} \cdot \tau_{\perp||} \quad (\text{III.3.18})$$

Substituindo nela as fórmulas (III.1.3), obteremos

$$\langle \tau_{\perp||} \rangle = \frac{4a_{\perp||}}{3T\sqrt{\pi}KT} \quad (\text{III.3.19})$$

e, então, a fórmula (III.3.17) reescreve-se da seguinte maneira:

$$\mu_{11} = \mu_{22} = \mu_{33} = \mu = \frac{e \langle \tau_{||} \rangle}{3m_{||}^{L_1}} (2\kappa_a^{L_1} + 1) \quad (\text{III.3.20})$$

No caso do espalhamento isotrópico $\kappa_a=1$ e

$$\mu = \frac{e \langle \tau \rangle}{m} \quad (\text{III.3.21})$$

Sublinhemos que no caso do espalhamento misto, na ausência da deformação, teremos uma expressão semelhante a (III.3.20), isto é,

$$\mu_{11} = \mu_{22} = \mu_{33} = \mu = \frac{e \langle \tau_{//}^{L_1} \rangle_i}{3 m_{//}^{L_1}} (2\kappa_i + 1) \quad (\text{III.3.22})$$

onde

$$\langle \tau_{//}^{L_1} \rangle_i = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{a_{//}^{L_1}}{T\sqrt{KT}} J_0^{L_1} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{a_{//}^{L_1}}{T\sqrt{KT}} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{3/2} \cdot e^{-x}}{x^2 + b_0^{L_1}} \quad (\text{III.3.23})$$

No caso do espalhamento isotrópico ($\kappa_i = 1$) obtém-se a expressão semelhante a (III.3.21);

$$\mu = \frac{e \langle \tau \rangle_i}{m} \quad (\text{III.3.24})$$

O outro caso limite refere-se a deformação forte do cristal, (recordando que o primeiro foi o caso do cristal não deformado), quando praticamente todos os electrões são transferidos para os dois Δ_1 mínimos situados, nestas condições, abaixo dos L_1 mínimos, na escala da energia. Esta inversão dos mínimos realiza-se sob $P \approx (2.2 \div 2.4) \cdot 10^4 \text{ Kg/cm}^2$, e já para pressão $P > 28000 \text{ Kg/cm}^2$, praticamente todos os electrões estão nos dois Δ_1 mínimos. Nestas condições, $n_1 \approx 0$, $n_3 = 0$ e $n_2 = 1/2$.

Das fórmulas (III.3.13 e 14) teremos, tomando em conta (III.3.12):

$$\mu_{11} = \mu_{22} = \frac{8}{3} \frac{e}{T\sqrt{\pi KT}} \frac{1}{2} \frac{a_{\perp}^{\Delta_1}}{m_{\perp}^{\Delta_1}} J_1^{\Delta_1} = \frac{4}{3} \frac{e}{T\sqrt{\pi KT}} \frac{a_{//}^{\Delta_1}}{m_{//}^{\Delta_1}} \kappa_i J_0^{\Delta_1} \quad (\text{III.3.25})$$

$$\mu_{33} = \frac{4}{3} \frac{e}{T\sqrt{\pi KT}} \frac{a_{//}^{\Delta_1}}{m_{//}^{\Delta_1}} J_0^{\Delta_1} \quad (\text{III.3.26})$$

Das últimas fórmulas vê-se que devido a assimetria das posições dos mínimos em relação ao eixo da deformação, (recordemos que estes mínimos estão situados ao longo do eixo da deformação), a mobilidade nestes dois mínimos (Δ_1) é anisotrópica.

No caso do espalhamento dos electrões só por fonões acústicos, $J_0^{\Delta_1} = 1$ e $\kappa_i = \kappa_a$, isto é,

$$\mu_{11} = \mu_{22} = \frac{4}{3} \frac{e}{T\sqrt{\pi KT}} \frac{a_{//}^{\Delta_1}}{m_{//}^{\Delta_1}} \kappa_a \quad (\text{III.3.27})$$

$$\mu_{33} = \frac{4}{3} \frac{e}{T\sqrt{\pi KT}} \frac{a_{//}^{\Delta_1}}{m_{//}^{\Delta_1}} \quad (\text{III.3.28})$$

Nas condições do espalhamento isotrópico, $\kappa_a = 1$, usando (III.3.19), obteremos de novo

$$\mu = \frac{e \langle \tau^{\Delta_1} \rangle}{m^{\Delta_1}} \quad (\text{III.3.29})$$

No fim deste parágrafo, analizaremos os resultados dos cálculos numéricos da mobilidade em L_1 e Δ_1 mínimos nas condições do espalhamento misto dos electrões e tentaremos comparar os dados teóricos e os resultados da experiência.

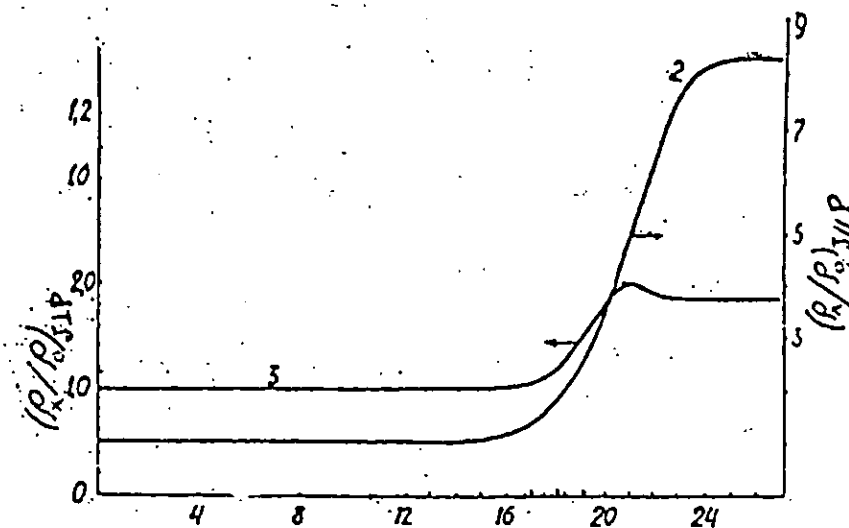


Figura 4. Variação da piezoresistência longitudinal $\frac{\rho_{33}(P)}{\rho_{33}(0)}$ e a transversal $\frac{\rho_{11}(P)}{\rho_{11}(0)}$ para n-Ge, $P//[001]$,

$T=78K$, $N_0=1,6 \cdot 10^{13}$.

Escreveremos a conductibilidade eléctrica, segundo (III.3.1), através da mobilidade, assim;

$$\sigma_{11} = e \cdot N_0 \cdot \mu_{11}, \quad \sigma_{33} = e \cdot N_0 \cdot \mu_{33} \quad (\text{III.3.30})$$

Na experiência, segundo os gráficos da figura 4, mede-se a grandeza $\rho(P)/\rho(0)$. Expressimos esta razão através das mobilidades

$$Z_2 = \frac{\rho_{33}(P)}{\rho_{33}(0)} = \frac{\frac{1}{\sigma_{33}(P)}}{\frac{1}{\sigma_{33}(0)}} = \frac{\sigma_{33}(0)}{\sigma_{33}(P)} = \frac{e N_0 \mu_{33}(0)}{e N_0 \mu_{33}(P)} = \frac{\mu_{33}(0)}{\mu_{33}(P)} \quad (\text{III.3.31})$$

Analogamente
$$Z_1 = \frac{\rho_{11}(P)}{\rho_{11}(0)} = \frac{\mu_{11}(0)}{\mu_{11}(P)} \quad (\text{III.3.32})$$

Grandezas $\mu_{11}(0)$ e $\mu_{33}(0)$, na ausência da deformação, determinam as mobilidades dos electrões em L_1 mínimos.

Todos os parâmetros dos L_1 mínimos são bem conhecidos [2,4,16], o que permite, usando as fórmulas (III.3.13-17), realizar os cálculos numéricos da mobilidade dos electrões na ausência da deformação, usando o programa apresentado em anexo -I.

Sendo obtidos os resultados experimentais da piezoresistência para os cristais com concentração dos portadores de carga $N_0 = 1,6 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ e para as temperaturas $T=78 \text{ K}$, os cálculos numéricos para as mesmas condições levam ao resultado seguintes:

$$\text{-Espalhamento por fonões acústicos} \rightarrow \mu_a^{L_1} = 4,179 \cdot 10^4 \text{ cm}^2 / V.s$$

$$\text{-Espalhamento misto (fonões acústicos e iões de impurezas)} \rightarrow \mu_i^{L_1} = 3,9 \cdot 10^4 \text{ cm}^2 / V.s$$

O valor numérico da mobilidade obtido na experiência com os cristais mais puros sob a temperatura $T=77,4 \text{ K}$ é $\mu^{L_1} = 4,14 \cdot 10^4 \text{ cm}^2 / V.s$ [30].

Os cálculos teóricos sob a mesma temperatura dão os seguintes resultados:

$$\mu_a^{L_1} = 42265 \text{ cm}^2 / V.s$$

$$\mu_i^{L_1} = 39431 \text{ cm}^2 / V.s$$

A coincidência dos dados experimentais e os resultados dos cálculos numéricos da mobilidade em L_1 mínimos, permite determinar, usando dados experimentais da medição da piezoresistência sob pressão $P \approx 2,8 \cdot 10^4 \text{ Kgf.cm}^{-2}$, os valores experimentais da mobilidade em Δ_1 mínimos.

Com efeito, das fórmulas (III.3.31-32) determinaremos a mobilidade $\mu(P)$, assim:

$$\mu_{33}(P) = \frac{\mu_{33}(0)}{Z_2} \quad (\text{III.3.33})$$

$$\mu_{11}(P) = \frac{\mu_{11}(0)}{Z_1} \quad (\text{III.3.34})$$

Os resultados experimentais, (fig.4), mostram que $Z_2=8,25$ e $Z_1=1,83$ sob a pressão $P \approx 2,8 \cdot 10^4 \text{ Kgf/cm}^2$.

Nestas condições, salientamos mais uma vez que, praticamente todos os electrões estão em dois Δ_1 mínimos. Por isso, o valor experimental da mobilidade em Δ_1 mínimos será:

$$\mu_{33}^{\Delta_1} \approx \frac{41400}{8,25} \approx 5018 \frac{\text{cm}^2}{V.s}; \quad (\text{III.3.35})$$

$$\mu_{11}^{\Delta_1} \approx \frac{41400}{1,83} \approx 22623 \frac{\text{cm}^2}{V.s} \quad (\text{III.3.36})$$

Anotemos que no artigo [29], o valor da mobilidade em Δ_1 mínimos, sob $T=120 \text{ K}$, obtido experimentalmente, é de $6400 \text{ cm}^2/V.s$.

Os valores teóricos esperados, devem ser próximos dos dados experimentais, isto é,

$$\mu_{33(a)}^{\Delta_1} = \frac{41790}{8,25} = 5065 \frac{cm^2}{V.s}; \quad \mu_{33(i)}^{\Delta_1} = \frac{3900}{8,25} = 4727 \frac{cm^2}{V.s} \quad (III.3.37)$$

$$\mu_{11(a)}^{\Delta_1} = \frac{41790}{1,83} = 22836 \frac{cm^2}{V.s}; \quad \mu_{11(i)}^{\Delta_1} = \frac{39000}{1,83} = 21311 \frac{cm^2}{V.s} \quad (III.3.38)$$

Sendo conhecidos os valores experimentais de Z_1 e Z_2 , a saber;

$$Z_1 = \frac{\rho_{11}(P)}{\rho_{11}(0)} \quad \text{e} \quad Z_2 = \frac{\rho_{33}(P)}{\rho_{33}(0)}$$

podemos estabelecer o valor experimental do parâmetro da anisotropia κ .

É fácil ver que, por um lado

$$\kappa = \frac{\mu_{\perp\perp}(P)}{\mu_{\parallel}(P)} \equiv \frac{\mu_{11}(P)}{\mu_{33}(P)} = \frac{\sigma_{11}(P)}{\sigma_{33}(P)};$$

por outro lado, sendo $\rho_{11}(0) = \rho_{33}(0)$, temos

$$\frac{\rho_{33}(P)}{\rho_{11}(0)} = \frac{\rho_{33}(P)}{\rho_{11}(P)} = \frac{\sigma_{11}(P)}{\sigma_{33}(P)}$$

Usando os dados experimentais de

$$Z_2 = \frac{\rho_{33}(P)}{\rho_{33}(0)} = 8,25 \quad \text{e} \quad Z_1 = \frac{\rho_{11}(P)}{\rho_{11}(0)} = 1,83$$

encontramos

$$\kappa = \frac{Z_2}{Z_1} = \frac{8,25}{1,83} \approx 4,5 \quad (III.3.39)$$

No capítulo a seguir, utilizaremos estes dados experimentais para encontrar possíveis valores das massas eficazes e constantes do potencial de deformação para Δ_1 mínimos de germânio.

IV. Determinação das constantes do potencial de deformação e das massas eficazes para Δ_1 mínimos do Germânio.

O estudo da contribuição dos Δ_1 mínimos para os fenómenos de transporte em n-Ge, submetido à acção das deformações elásticas fortes, que levam a inversão dos mínimos $L_1 \rightarrow \Delta_1$, permite determinar o valor de alguns parâmetros destes mínimos, o que por seu turno, vai permitir a realização dos cálculos quantitativos dos diferentes efeitos, onde esta contribuição é importante, por exemplo, em

fenómenos ligados com o aquecimento dos portadores de carga nos campos eléctricos fortes e em fenómenos na presença da deformação elástica uniaxial (ou hidroestática) forte.

A comparação dos valores dos diferentes parâmetros em L_1 e Δ_1 mínimos, que está apresentada na Tabela 1, mostra que os valores dos parâmetros para Δ_1 mínimos do Ge e Δ_1 mínimos do Si, tem menor diferença entre si, em comparação com os respectivos valores dos parâmetros para L_1 e Δ_1 mínimos da banda de condução do Ge.

Tabela 1. Parâmetros dos L_1 e Δ_1 mínimos do Ge e Si.

Parâmetro	Designação	Banda de condução do Ge		Banda de condução do Si
		L_1 -mínimos	Δ_1 -mínimos	Δ_1 -mínimos
massas eficazes dos electrões	$m_{ }^*$	1,58 [31]	1,353[17,18,29] 2,0 [32] 0,8 [33]	0,9163 [31]
	m_{\perp}^*	0,082[31]	0,288[17,18,29] 0,45 [32] 0,2 [33]	0,1905 [31]
Anisotropia das massas eficazes	$\kappa_m = \frac{m_{ }}{m_{\perp}}$	19,3[31]	4,7 [17,18,29] 4,4 [32] 4,0 [33]	4,8 [31]
Anisotropia da mobilidade de (espalhamento por fonões acústicos)	$\kappa = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{ }}$	16 [2,30]	4,4 [17,32]	6,33 [2]
Constantes dos potenciais da deformação	C_1	16,4 [1,2]	10,4 [32] 11,4 [33]	9,3 [1,2] 11,4 [11]
	C_2	-6,4 [1,2]	0,53 [32] 0,6 [33]	-

Como tentativa para determinarmos as massas eficazes e as constantes dos potenciais da deformação dos Δ_1 mínimos do Ge, como primeiro passo utilizaremos os valores das massas eficazes válidas para Δ_1 mínimos do Silício, isto é, $m_3^{\Delta_1} \equiv m_{\parallel} \approx 0,9m_0$, $m_1^{\Delta_1} \equiv m_{\perp} = 0,192m_0$.

Quanto aos potenciais da deformação, utilizaremos os valores encontrados em [32], isto é, $C_1^S = 0,53eV$, $C_2^S = 10,4eV$. Os gráficos $\frac{\rho_{33}(P)}{\rho_{33}(0)} = Z_2(P)$ e $\frac{\rho_{11}(P)}{\rho_{11}(0)} = Z_1(P)$ no caso do

espalhamento dos electrões por fonões acústicos (curva "a") e espalhamento misto (curva "b") são mostrados na fig.5. Como podemos ver, existe coincidência qualitativa, mas no caso do espalhamento misto a aproximação aos resultados experimentais é melhor. É por isso que, para a futura análise, todos os cálculos realizaremos nas condições do espalhamento misto dos electrões.

Agora, consideremos o cristal com concentração dos portadores na banda de condução, $N_0 = 1,6 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ no futuro, podemos considerar cristais com maior concentração dos portadores, onde será inevitável considerar o espalhamento misto dos portadores.

As funções Z_1 e Z_2 dependem de quatro variáveis, a saber: $m_1^{\Delta_1}$, $m_3^{\Delta_1}$, $C_1^{\Delta_1}$, $C_2^{\Delta_1}$, isto é,

$$Z_1 = Z_1(m_1^{\Delta_1}, m_3^{\Delta_1}, C_1^{\Delta_1}, C_2^{\Delta_1}), \quad Z_2 = Z_2(m_1^{\Delta_1}, m_3^{\Delta_1}, C_1^{\Delta_1}, C_2^{\Delta_1}).$$

Antes de tudo, verificaremos os valores das massas existentes na literatura (veja tabela 1). Os cálculos mostram que, os pares ($m_1^{\Delta_1} = 0,45m_0$, $m_3^{\Delta_1} = 2,0m_0$) e ($m_1^{\Delta_1} = 0,288m_0$, $m_3^{\Delta_1} = 1,358m_0$) não satisfazem os resultados experimentais para qualquer combinação das constantes ($C_1^{\Delta_1}, C_2^{\Delta_1}$) (veja a fig. 6), pois no caso dos pequenos valores de $C_2^{\Delta_1}$ (isto é, $C_2^{\Delta_1} < 9,0eV$) a saturação da piezoresistência atinge-se sob grandes valores da pressão ($P > 30000 \text{ Kgf/cm}^2$), enquanto que para os monocristais considerados a inversão dos mínimos acontece sob pressões $P \approx (2,1 \div 2,2) \cdot 10^4 \text{ Kgf/cm}^2$.

Tentaremos variar os valores das massas eficazes e constantes do potencial de deformação com o fim de fazer coincidir os resultados teóricos com os dados experimentais.

Tomaremos em conta que além da coincidência das funções Z_1 e Z_2 (isto é, a piezoresistência) com os dados experimentais, em paralelo, os resultados do cálculo da mobilidade e os do parâmetro da anisotropia, devem satisfazer os resultados experimentais.

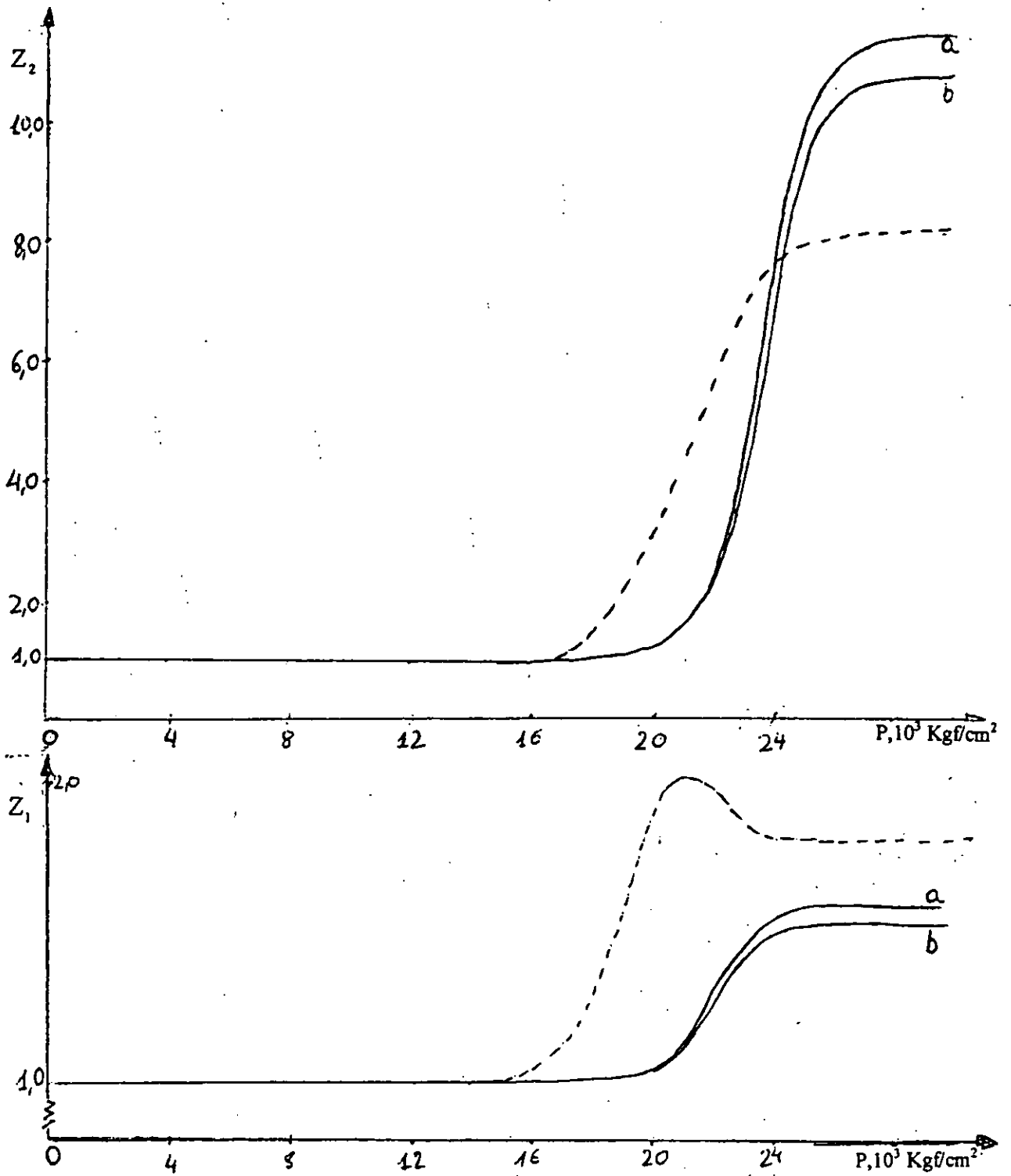


Figura 5. Variação da piezoresistência longitudinal $Z_2 = \frac{\rho_{33}(P)}{\rho_{33}(0)}$ e a transversal $Z_1 = \frac{\rho_{11}(P)}{\rho_{11}(0)}$ em função da pressão.

$T=78K$, $N_0=1,6 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$; -----resultados experimentais; a) curva de espalhamento por fonões acústicos; b) curva de espalhamento misto(fonões e iões de impurezas); características Δ_1 mínimos: $m_1^\Delta = 0,192$; $m_3^\Delta = 0,9$; $C_1^\Delta = 0,53eV$; $C_2^\Delta = 10,4eV$

Na base da análise dos resultados de diferentes autores [17,18,29,31,32,33], escolhemos o intervalo da variação das massas eficazes

$$m_1^{\Delta_1} = 0,175; 0,200; 0,225; 0,250; 0,275; 0,300; 0,325;$$

$$m_3^{\Delta_1} = 0,6; 0,7; 0,8; 0,9; 1,0; 1,1; 1,2; 1,3; 1,4; 1,5;$$

e a variação das constantes do potencial da deformação dos Δ_1 mínimos,

$$C_1^{\Delta_1} = 0,1; 0,3; 0,5; 0,7; 0,9; 1,1; 1,3;$$

$$C_2^{\Delta_1} = 8,5; 9,0; 9,5; 10,0; 10,5; 11,0; 11,5; 12,0; 12,5; 13,0.$$

Modificando ligeiramente o Programa principal dos cálculos (isto é, introduzindo os ciclos para variáveis $m_1^S \equiv m_1^{\Delta_1}, m_3^S \equiv m_3^{\Delta_1}, C_1^S \equiv C_1^{\Delta_1}, C_2^S \equiv C_2^{\Delta_1}$) podem ser calculadas as grandezas Z_1, Z_2 , mobilidade μ_{33} , e parâmetro de anisotropia κ para diferentes valores das variáveis indicadas, na presença do espalhamento acústico e o misto. Exemplo dos cálculos longos, está apresentado em anexo-II.

Para perceber a "dinâmica" da variação das grandezas $Z_1, Z_2, \mu_{33}, \kappa$ e determinar o conjunto dos parâmetros $(m_1^{\Delta_1}, m_3^{\Delta_1}, C_1^{\Delta_1}, C_2^{\Delta_1})$, que da melhor maneira vão satisfazer as exigências experimentais, construiremos a série de gráficos $Z_1 = Z_1(m_1^{\Delta_1}); Z_2 = Z_2(m_1^{\Delta_1}); \mu_{33} = \mu_{33}(m_1^{\Delta_1}); \kappa = \kappa(m_1^{\Delta_1})$, considerando as restantes variáveis como parâmetros. Os referidos gráficos, para alguns valores dos parâmetros, estão apresentados nas figuras a) e b), em anexo-III.

Passos a seguir, são a construção dos gráficos das grandezas indicadas em função de $m_3^{\Delta_1}$, considerando as restantes variáveis como parâmetros e assim em diante. Estes gráficos estão apresentados nas figuras c), d), e), f), em anexo-III.

Sendo analisado todo o conjunto destes gráficos, podemos chegar a conclusão que os seguintes valores das massas eficazes e constantes dos potenciais da deformação, apresentados na tabela 2, possam satisfazer os resultados experimentais.

Tabela 2. Valores das massas eficazes e constantes do potencial de deformação que provavelmente podem satisfazer os dados experimentais.

$m_1^{\Delta_1}$	$m_3^{\Delta_1}$	$C_1^{\Delta_1}$	$C_2^{\Delta_1}$
0,250	1,035	0,1	9,0
0,275	0,6925±0,0025	0,3	9,5
0,250	0,61±0,01	0,1	11,0
0,225	0,625	0,1	11,5
0,225	0,5975±0,0075	0,1	12
0,250	0,629±0,004	0,3	10,5
0,250	0,5875±0,0025	0,3	11,0
0,225	0,57±0,01	0,3	12,0
0,225	0,5825±0,0075	0,3	12,0
0,225	1,4775±0,0325	0,7	8,5
0,275	0,7425±0,0075	0,7	9,0
0,300	0,625	0,7	9,0
0,225	1,315±0,035	0,9	8,5
0,275	1,075±0,075	0,9	9,0
0,250	0,791±0,016	1,1	8,5
0,275	0,791±0,016	1,3	8,5
0,250	0,9275±0,0225	1,3	8,5
0,238	0,6	0,1	11,5
0,2237	0,6	0,1	12,0
0,2625±0,0025	0,9	0,3	9,0
0,2653±0,0009375	0,9	0,3	9,5
0,2725	0,7	0,3	9,5
0,24625±0,00125	0,6	0,3	11,0
0,283125	0,7	0,7	9,0
0,23625	1,2	0,9	8,5
0,290	0,7	1,3	8,5
0,250	1,0	1,1	8,5

Para verificar se cada conjunto dos parâmetros pode satisfazer os dados experimentais apresentados na fig.4, construiremos os gráficos da dependência das grandezas $Z_1 \equiv \frac{\rho_{11}(P)}{\rho_{11}(0)}$ e

$$Z_2 \equiv \frac{\rho_{33}(P)}{\rho_{33}(0)} \text{ em função da pressão } P.$$

A figura 6 mostra que nem todos os conjuntos dos parâmetros satisfazem as exigências experimentais. Sendo analisados os gráficos apresentados, chegamos a conclusão, que nas condições do espalhamento dos electrões por fonões acústicos e iões de impurezas, o conjunto dos parâmetros que caracterizam Δ_1 mínimos, na nossa opinião, deve ser o seguinte:

$$m_1^A = 0,225 \pm 0,001 ; m_2^A = 0,595 \pm 0,005 ; C_1^A = 0,167 \pm 0,015 ; C_2^A = 11,8 \pm 0,3$$

As dependências $Z_2=Z_2(P)$ e $Z_1=Z_1(P)$ com as massas eficazes e as constantes dos potenciais da deformação determinadas, são mostradas na figura 7. As curvas tracejadas são as experimentais. Como pode ser visto, existe coincidência quantitativa dos cálculos teóricos e dados experimentais.

Sublinhemos, que a questão sobre o papel do espalhamento dos electrões entre dois Δ_1 mínimos equivalentes (o chamado g-espalhamento) e o espalhamento dos electrões entre mínimos não equivalentes (isto é, entre L_1 e Δ_1 mínimos) ainda não está resolvida, mas tais espalhamentos, caso existirem, poderão contribuir na variação dos valores dos parâmetros encontrados. Para resolver este problema, na sua totalidade, será necessário obter alguns dados experimentais adicionais, nomeadamente, a $\rho=\rho(T)$ [1] e dados sobre efeitos galvanomagnéticos (efeito de Hall [18], magnetoresistência) nas condições do cristal não deformado e nas condições da inversão dos mínimos $L_1 \rightarrow \Delta_1$ (isto é, sob grande pressão).

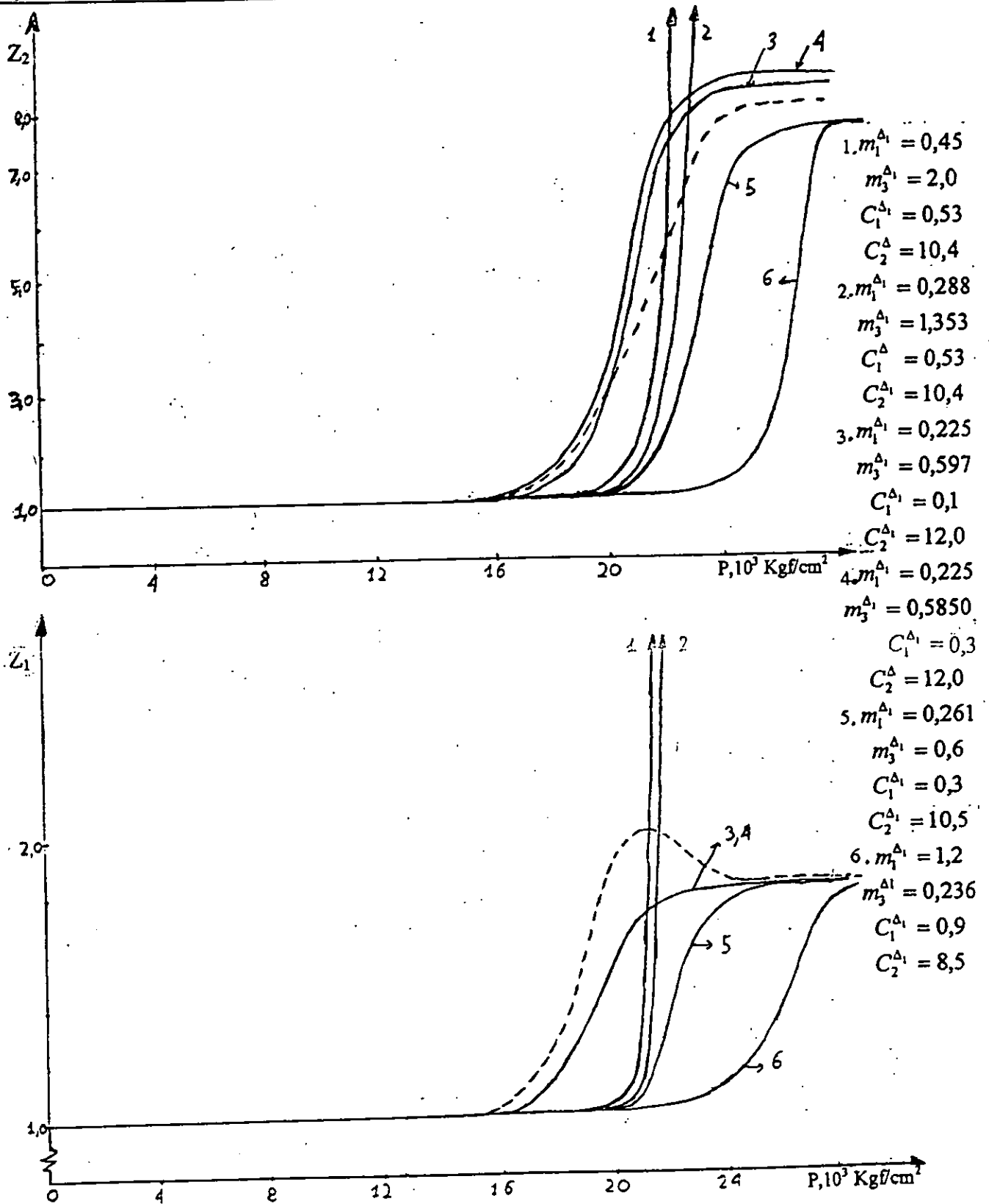


Fig 6 Variação da piezoresistência longitudinal $Z_2 = \frac{\rho_{33}(P)}{\rho_{33}(0)}$ e transversal $Z_1 = \frac{\rho_{11}(P)}{\rho_{11}(0)}$ em função da pressão para diferentes conjuntos das massas eficazes e constantes do potencial da deformação dos Δ_1 mínimos

exp -----
teór. ———

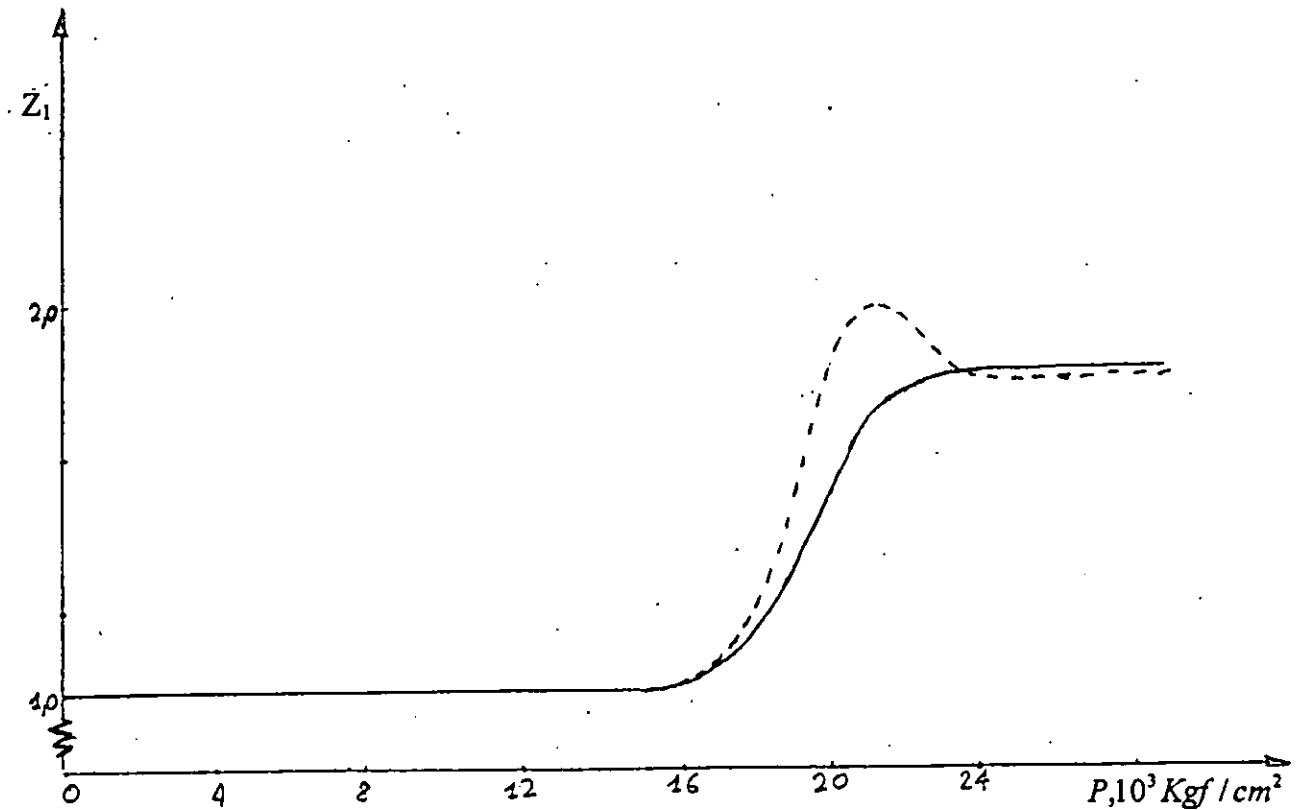
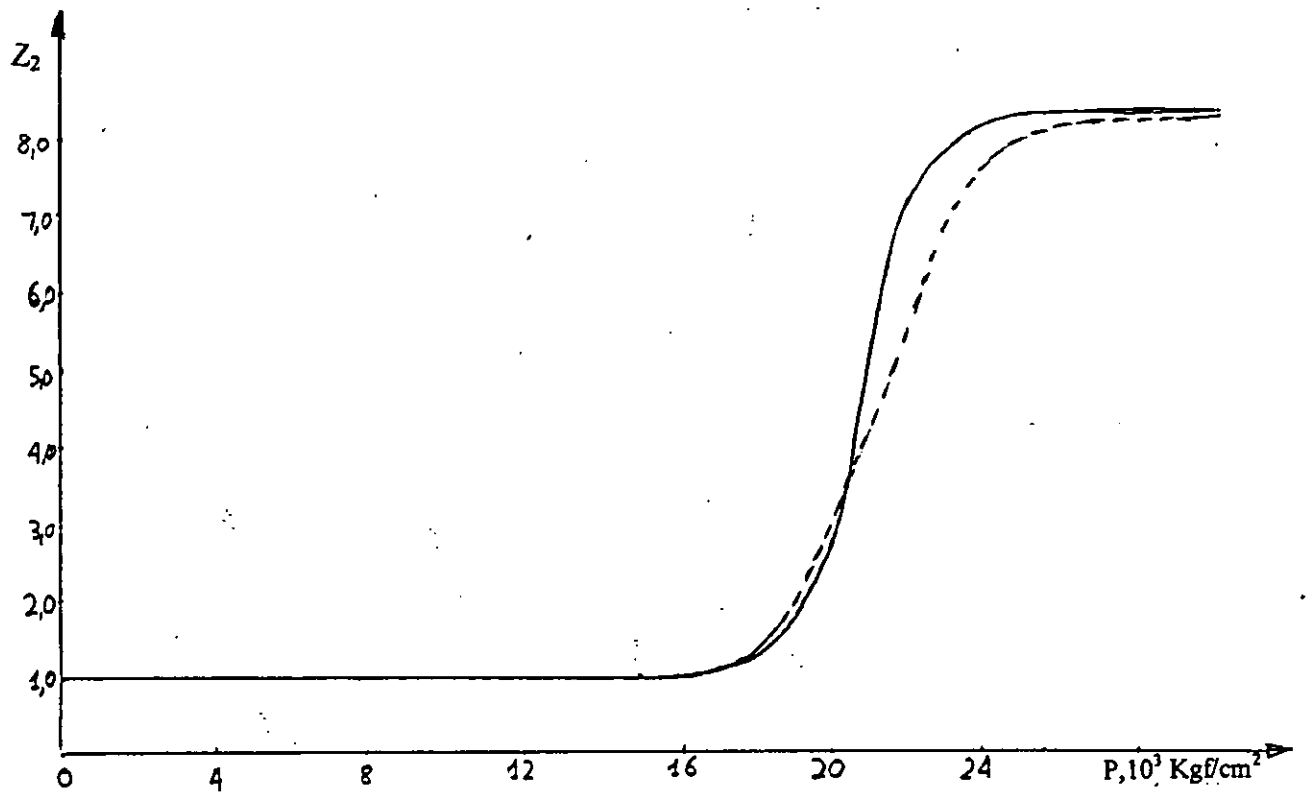


Fig.7 Comparação dos resultados teóricos e dos dados experimentais: $m_1^{\Delta_1} = 0,597$; $m_3^{\Delta_1} = 0,225$;

$C_1^{\Delta_1} = 0,1e.V$, $C_2^{\Delta_1} = 12,0e.V$, $T = 78K$, $N_0 = 1,6 \cdot 10^{13} cm^{-3}$ exp. teór.

V. CONCLUSÕES

1) A pesquisa bibliográfica realizada mostrou que não são estabilizadas univocamente os principais parâmetros dos Δ_1 mínimos da banda de condução do germânio, o que não permite estudar diferentes mecanismos do intra- e inter espalhamento dos electrões em Δ_1 mínimos e por isso, investigar quantitativamente os fenómenos de transporte de carga nas condições extremas (fortes campos eléctricos, grandes deformações elásticas).

2) A equação cinética escrita para o caso da ausência do campo magnético e presença da deformação elástica uniaxial ao longo do [001], tem sido resolvida usando os métodos da teoria do espalhamento anisotrópico (TEA). Pela primeira vez foi feita a investigação do tensor da conductibilidade eléctrica por via da TEA nas condições do espalhamento misto de electrões (isto é, espalhamento por fonões acústicos e por iões de impurezas) o que permitiu realizar cálculos numéricos da resistividade em função da pressão aplicada. Por este meio foi demonstrado que tomando em conta o espalhamento misto de electrões, consegue-se ajustar os resultados teóricos com os dados experimentais.

3) O cálculo e análise da mobilidade de deriva, permitiu não só encontrar seus valores em Δ_1 mínimos, mas também estabelecer o valor do parâmetro da anisotropia destacando as suas várias fontes.

4) A variação das massas eficazes e das constantes dos potenciais da deformação em Δ_1 mínimos permitiu estabelecer tais valores numéricos destes parâmetros que da melhor maneira satisfazem as condições e exigências dos dados experimentais.

5) Os resultados obtidos podem ser usados para a investigação quantitativa mais detalhada dos fenómenos de transporte de carga em semicondutores com muitos mínimos na superfície da energia constante.

VI. RECOMENDAÇÕES

- 1) Os resultados obtidos neste trabalho podem servir como base para a investigação detalhada do espalhamento dos electrões entre Δ_1 mínimos equivalentes (g-espalhamento) e o espalhamento entre mínimos não equivalentes (espalhamento entre L_1 e Δ_1 mínimos).
- 2) Recomenda-se, na base da investigação feita o estudo da resistividade em função da temperatura e concentração dos portadores de carga para envolver mais dados experimentais e verificar na escala mais ampla os resultados obtidos.
- 3) Recomenda-se o estudo da mobilidade de deriva dos electrões em Δ_1 mínimos, em função da temperatura e sua comparação com os resultados conhecidos da bibliografia.
- 4) A piezoresistência em condições da pressão hidroestática tem de ser estudada usando a TEA com o fim de compará-la com os dados experimentais existentes na bibliografia.
- 5) Os conhecimentos adquiridos podem ser usados durante o leccionamento das disciplinas ligadas com a área da física de semicondutores, no nível de Mestrado e preparação das teses no mesmo nível.

VII. 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]. Baranskii P.I., Buda I.S., Dakhovskii I.V. Teoria dos fenómenos termoeléctricos e termomagnéticos em semicondutores anisotrópicos. "Naukova Dumka", 1987.
- [5]. Smith C.S. Piezoresistance Effect in Germanium and Silicon. Phys. Rev., 1954, v.94, p42.
- [6]. Tensosensores Semicondutores. Sob a redação do M.Dina. M.-L., "Energia" (URSS), 1965.
- [7]. 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.

- [8]. Kalvesten E., Lofdahl., Stemme G. Small piezoresistive silicon microphones specially designed for the characterization of turbulent gas flows. *Sens. Actuators A Phys.* (Switzerland), v. A 46, N1-3, p151-5 (1995).
- [9]. 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).
- [10]. Herring C., Vogt E. Transport and Deformation Potential Theory for Many-Valley Semiconductors with anisotropic scattering. *Phys. Rev.*, 1956, v.101, p.944.
- [11]. 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.
- [12]. Zeeger K. *Semiconductor Physics*, Springer-Verlag, Wein New York, 1973.
- [13]. Anselm A.I. *Introduction to Semiconductor Theory* (English translation). MIR Publisher, Moscow and Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J. 1981.
- [14]. Shyh Wang. *Fundamentals of Semiconductor Theory and Device Physics*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, USA, 1989.
- [15]. 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 termoelétricas dos monocristais $Ge_{1-x}Si_x$. IV Jornadas de Engenharia e Ciências Naturais de Moçambique. Resumo das comunicações, p48 (1992).
- [16]. Tchernych V., Gritscutchouk V. Efeito longitudinal de Nernst-Ettingshausen. *Ciência e Tecnologia*, N11, p.13-21 (1986).
- [17]. Fawcett W. and Paige E.G.S. Negative differential mobility of electrons in germanium: A Monte Carlo calculation of the distribution function, drift velocity and carrier population in the $\langle 111 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$ mínimos. *J.Phys. C: Solid State Phys.*, 1971, vol.4., p.1801-1821.
- [18]. Fletcher K. and Pitt G. D., Intervalley Scattering in n-type Ge from a Hall effect experiment to high pressure. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 1971, vol.4, p.1822-1833.
- [19]. 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.
- [20]. 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.

- [21]. 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); Cape Town, p.60.
- [22]. Chernysh V.V., Burdeynyi V. M. and Nhanala J. Scattering of electrons in $L_1 - \Delta_1$ Model of Germanium under High Uniaxial Elastic Pressure along [001], Intercience 98, 5-7 October 1998, University of the North, Sovenga, South Africa; Program and abstracts, p.83.
- [23]. Blatt. F. Theory of Mobility of Electrons in Solids, Solids State Physics, v.4, Academic Press Inc. Publisher, N.Y., 1958, p.200-p.363.
- [24]. Nyi. Physical properties of cristals, Oxford at the Clarendon Press, 1964.
- [25]. Fock V.A., Princípios de Mecânica Quântica, Editora MIR, Moscovo, 1986, p.174-183.
- [26]. Tomo F., Investigação da Piezoresistência Causada Pela Redistribuição de Electrões entre L_1 e Δ_1 Mínimos do Germânio. TL, Dep. of Phys., UEM, 1998.
- [27]. Samoilovich A.G., Iskra V.D., A influência da anisotropia do cristal para oscilações térmicas dos átomos em Ge e Si ; FTT , 1960, v.2, p.2827.
- [28]. Blatt F, Physics of Electronic Conduction in Solids, Mc Graw-Hill Book Company N.Y., 1968.
- [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]. Herring C., Geballe T., Kunzler J. Analysis of Phonon-Drag Termomagnetic Effects in n-Type Germanium. Bell. Syst. Techn.Journ., 1959, v.38, p657.
- [31]. Dresselhaus G., Kip A.F., Kittel C. Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Cristals., Phys. Rev, 1955, v.98, p368.
- [32]. Baranskii P.I., Kolomoets V.V., Fedosov A.V. Piezoresistance ocorre 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).
- [33]. Chernysh V., Burdeynyi V., Effective masses and deformation potenciales in the delta minimas of Germanium, South African Institute of Phycis, 43rd Annual Conference, 7-10 July 1998, University of Cape Town, p.60.
- [34]. 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).

APÊNDICES E ANEXOS

APÊNDICE-I

Matrizes de transformação do referencial elipsoidal para o cristalográfico e vice-versa

Primeiro L₁ mínimo (Ge)

Como se sabe, os vectores unitários do referencial elipsoidal estão relacionados com os do referencial cristalográfico, da seguinte maneira:

$$\vec{i}_3 // [111], \vec{i}_2 // [1\bar{1}0] \text{ e } \vec{i}_1 = \left[\vec{i}_2 \times \vec{i}_3 \right]; \quad \vec{i}_1 = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(-\vec{i} - \vec{j} + 2\vec{k} \right), \quad \vec{i}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\vec{i} - \vec{j} \right) \text{ e } \vec{i}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\vec{i} + \vec{j} + \vec{k} \right)$$

Sabendo que os elementos da matriz de transformação calculam-se a partir dos produtos internos, como segue:

$$\begin{aligned} a_{11} &= \left(\vec{i} \cdot \vec{i}_1 \right) = -\frac{1}{\sqrt{6}}, \quad a_{12} = \left(\vec{i} \cdot \vec{i}_2 \right) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad a_{13} = \left(\vec{i} \cdot \vec{i}_3 \right) = \frac{1}{\sqrt{3}} \\ a_{21} &= \left(\vec{j} \cdot \vec{i}_1 \right) = -\frac{1}{\sqrt{6}}, \quad a_{22} = \left(\vec{j} \cdot \vec{i}_2 \right) = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad a_{23} = \left(\vec{j} \cdot \vec{i}_3 \right) = \frac{1}{\sqrt{3}} \\ a_{31} &= \left(\vec{k} \cdot \vec{i}_1 \right) = \frac{2}{\sqrt{6}}, \quad a_{32} = \left(\vec{k} \cdot \vec{i}_2 \right) = 0, \quad a_{33} = \left(\vec{k} \cdot \vec{i}_3 \right) = \frac{1}{\sqrt{3}} \end{aligned}$$

A matriz de transformação é:

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

Segundo L₁ mínimo (Ge)

$$\vec{i}_3 // [1\bar{1}1], \vec{i}_2 // [\bar{1}10], \vec{i}_1 = \left[\vec{i}_2 \times \vec{i}_3 \right] = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(-\vec{i} + \vec{j} + 2\vec{k} \right)$$

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

Terceiro L_1 mínimo

$$\vec{i}_3 // [\bar{1} \bar{1} 1] \quad \vec{i}_2 // [\bar{1} 1 0] \quad \vec{i}_1 = [\vec{i}_2 \times \vec{i}_3]$$

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

Quarto L_1 mínimo

$$\vec{i}_3 // [\bar{1} 1 1] \quad \vec{i}_2 // [1 1 0] \quad \vec{i}_1 = [\vec{i}_2 \times \vec{i}_3]$$

$$\vec{i}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}); \quad \vec{i}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{i} + \vec{j}); \quad \vec{i}_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(\vec{i} - \vec{j} + 2\vec{k}); \quad C_{ik}^{(4)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

Para os Δ_1 mínimos 1 e 2

$$\vec{i}_2 // \vec{j}; \quad \vec{i}_3 // \vec{k}; \quad \vec{i}_1 = [\vec{i}_2 \times \vec{i}_3]; \quad \vec{i}_2 = \vec{j}; \quad \vec{i}_3 = \vec{k}; \quad \vec{i}_1 = \vec{i}; \quad C_{ik}^{(1,2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Para os Δ_1 mínimos 3 e 4

$$\vec{i}_2 // \vec{i}; \quad \vec{i}_3 // \vec{j}; \quad \vec{i}_1 = [\vec{i}_2 \times \vec{i}_3]; \quad \vec{i}_2 = \vec{i}; \quad \vec{i}_3 = \vec{j}; \quad \vec{i}_1 = \vec{k}; \quad C_{ik}^{(3,4)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Para os Δ_1 mínimos 5 e 6

$$\vec{i}_2 // \vec{k}; \quad \vec{i}_3 // \vec{i}; \quad \vec{i}_1 = [\vec{i}_2 \times \vec{i}_3]; \quad \vec{i}_2 = \vec{k}; \quad \vec{i}_3 = \vec{i}; \quad \vec{i}_1 = \vec{j}; \quad C_{ik}^{(5,6)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

APÊNDICE-II

Potencial Químico

Sabe-se que na ausência da deformação, a concentração (N'_0) total dos electrões é

$$N'_0 = 4N_1^0 + 6N_2^0 \quad (1)$$

e na presença da deformação elástica uniaxial é

$$N'_0 = 4N_1^{L_1} + 2N_2^{\Delta_1(1,2)} + 4N_2^{\Delta(3-6)} \quad (2)$$

Mas

$$N_1^0 = 2 \frac{(2\pi KT)^{3/2} (m_1^{(i)2} m_{II}^{(i)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp(\mu^*) \quad (3)$$

$$N_2^0 = 2 \frac{(2\pi KT)^{3/2} (m_1^{(k)2} m_{II}^{(k)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp(\mu^* - \Delta E^*) \quad (4)$$

$$N_1^{(i)} = 2 \frac{(2\pi KT)^{3/2} (m_1^{(i)2} m_{II}^{(i)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp(\bar{\mu}^* - E_i^*) \quad (5)$$

$$N_2^{(k)} = 2 \frac{(2\pi KT)^{3/2} (m_1^{(k)2} m_{II}^{(k)})^{1/2}}{(2\pi\hbar)^3} \exp(\bar{\mu}^* - E_k^* - \Delta E^*) \quad (6)$$

Igualando (1) e (2) e em seguida substituir as relações (3 - 6), obtém-se

$$\exp(\bar{\mu}^*) = \frac{2m_N^{(C)3/2} + 3m_N^{(S)3/2} \exp(-\Delta E^*)}{2m_N^{(C)} \exp(-E_i^*) + m_N^{(S)} \exp(-\Delta E^*) [\exp(-E_k^{(1)*}) + 2 \exp(-E_k^{(2)*})]} \exp(\mu^*) \quad (7)$$

ou seja

$$\exp(\bar{\mu}^*) = A \exp(\mu^*) \quad (8)$$

onde A é o factor de $\exp(\mu^*)$ e $\bar{\mu}^* = \frac{\bar{\mu}}{KT}$; $\mu^* = \frac{\mu}{KT}$

I. 1. Introdução

MU

2. Colocação do problema

II. ~~1. Introdução~~ Cálculo da constante de Hall

1. Definições da constante de Hall

2. Constante de Hall e tensor da condutibilidade eléctrica

2a. Tensor σ para um vale energético

3. O cálculo dos componentes σ_{11}^s , σ_{33}^s e σ_{13}^a do tensor da condutibilidade eléctrica

a) 4^o vales

b) 8^o vales

~~4. Espalhamento dos electrões por~~

4. Constante de Hall no caso do espalhamento de electrões por fónons acústicos

5. ~~Tensor σ na ausência do campo magnético~~

III. Aproximação do campo magnético fraco ©

1. Cristal não deformado

2. ——— fortemente deformado

IV. Aproximação do campo magnético forte ©

1.

2.

V. Resultados dos cálculos numéricos

VI. Conclusões e recomendações

VII. Bibliografia

Anexo - I

Exemplo do programa da piezoresistência em L_1 -e Δ_1 modelo do Germânio.

```

PROGRAM calculo(INPUT,OUTPUT);
USES CRT;
CONST
  K=0.8625E-4;EPS=1.0E-4;a=0.00001;w=20;dE=0.18;S11=7.54E-7;S12=-2
.06E-7;o=0;
  dEK=2087;C1C=-6.4;C2C=16.4;C1S=0.53;C2S=10.4;T=78;Ko=1.38E-16;No
i=1.6E13;
  e=1.6E-19;eo=4.803E-10;epso=16.0;pi=3.1416;C111=1.592;C441=0.562
;hp=1.054E
-27;m1c=0.082;m3c=1.58;m1s=0.192;m3s=0.9;
TYPE
  FUNC=FUNCTION(x:real):real;
VAR
  i,P :integer;
  dEK1,EC,E1S,E2S,nc,P4nc,n1S,P2n1s,n2s,P4n2s,SUM:real;
  Mnc,Mns,alc,a2c,als,a2s,FOa,Fla,FOas,Flas,toilc,toils,bos,bas,ba
c,boc:real;
  Foic,Flic,fois,flis,b1,a1,b2,a2,fl1a,R1,R2,R3,R4,F12a,FO1a,FO2a:
real;
  F11as,R1s,R2s,F12as,Folas,R3s,R4s,Fo2as,w1,w2,P1,P2,R5c,R6c,R7c,
R8c,R9c,
  R5s,R10c,R6s,R7s,R8s,R9s,R10s:real;
  g,gs,La1c,La2s,R11c,R12c,R13c,R14c,R11s,R12s,R13s,R14s,B,SG11p,S
G11c,
  SG11slp,SG11s2p,SG33p,SG33c,SG33slp,SG33s2p:real;
  RollP,RO33P,nco,nlso,n2so,SG11o,RollO,SG33O,RO33O,Z1,Z2,Fi1,Fi2,
Fi3,Fi,
  F,y1,y2,y3,y4,y5,y6,y7,y8,y9,y10,x:real;
  SG11ci,SG11slpi,SG11Pi,SG33pi,Sg33ci,Sg33slpi,SG11s2pi,SG33s2pi:
real;
  SG11oi,SG33oi,Rollpi,RO33pi,RO11oi,RO33oi,Z1i,Z2i:real;
  M11P,M11Pi,M33P,M33Pi,M1,M2,M1i,M2i,M11O,M33O,M11oi,M33oi:real;
  {$F+}
  FUNCTION F5(X:real):real;
  BEGIN
    F5:=(-ln(cos(x)));
  END;
  FUNCTION F6(x:real):real;
  BEGIN
    a2c:=4.51E-16/(sqr(c1c)*sqrt(m3c*sqr(m1c))*FOa);
    boc:=1.21E6*a2c*Noi*sqrt(m3c)/(m1c*T*sqr(T)*b1*sqr(b1))*(R9c-R5c*
ln(x)+R8c*1.453E-15*Noi/(m3c*sqr(T)*x));
    F6:=x*x*x*exp(-x)/(sqr(x)+boc);
  END;
  FUNCTION F7(x:real):real;
  BEGIN
    alc:=4.51E-16/(sqr(c1c)*sqrt(m3c*sqr(m1c))*Fla);
    bac:=1.21E6*alc*Noi*sqrt(m3c)/(m1c*T*sqr(T)*b1*sqr(b1))*(R14c-R10
c*ln(x)+R13c*1.453E-15*Noi/(m3c*sqr(T)*x));
    F7:=x*x*x*exp(-x)/(sqr(x)+bac);
  END;
  FUNCTION F8(x:real):real;

```

```

      BEGIN
        a2s:=4.51E-16/(sqr(c1s)*sqrt(m3s*sqr(m1s))*FOas);
        bos:=1.21E6*a2s*Noi*sqrt(m3s)/(m1s*T*SQR(T)*b2*Sqr(b2))*(R9s-R5s*
ln(x)+R8s*1.453E-15*Noi/(m3s*sqr(T)*x));
        F8:=x*x*x*exp(-x)/(sqr(x)+bos);
      END;
      FUNCTION F9(x:real):real;
      BEGIN
        als:=4.51E-16/(sqr(c1s)*sqrt(m3s*sqr(m1s))*Flas);
        bas:=1.21E6*als*Noi*sqrt(m3s)/(m1s*T*sqr(T)*b2*sqr(b2))*(R14s-R10
s*ln(x)+R13s*1.453E-15*Noi/(m3s*sqr(T)*x));
        F9:=x*x*x*exp(-x)/(sqr(x)+bas);
      END;
    {$F+}
    PROCEDURE IT(a,w:real; F:FUNC; VAR rz:real);
      CONST
        n0=10;
      VAR
        v,q,r:real;
        n:integer;
      FUNCTION igr(a,w:real; n:integer):real;
        VAR
          x,h,r:real; i:integer;
        BEGIN
          h:=(w-a)/n; x:=a-h/2; r:=0;
          FOR i:=1 TO n DO
            BEGIN
              X:=X+h; r:=r+F(x)
            END;
          igr:=h*r
        END;
      BEGIN
        n:=n0; v:=igr(a,w,n);
        REPEAT
          n:=2*n; q:=igr(a,w,n);
          r:=abs(v-q); v:=q;
        UNTIL r<eps;
        rz:=q
      END;
    PROCEDURE INLc(o,a1:real; F:FUNC; VAR rz:real);
      CONST
        no=10;
      VAR
        v,q,r:real;
        n:integer;
      FUNCTION pcic(o,a1:real; n:integer):real;
        VAR
          x,h,r:real; i:integer;
        BEGIN
          b1:=sqrt((m3c-m1c)/m1c); a1:=arctan(b1);
          h:=(a1-o)/n; x:=o-h/2; r:=0;
          FOR i:=1 TO n DO

```

```

        BEGIN
            x:=x+h; r:=r+F(x)
        END;
    pcic:=h*r
END;
BEGIN
n:=no; V:=pcic(o,a1,n);
    REPEAT
        n:=2*n; q:=pcic(o,a1,n);
        r:=abs(v-q); v:=q;
    UNTIL r<eps;
    rz:=q
END;
PROCEDURE INLs(o,a2:real; F:FUNC; VAR rz:real);
    CONST
        n0=10;
    VAR
        v,q,r:real;
        n:integer;
    FUNCTION pcis(o,a2:real; n:integer):real;
        VAR
            x,h,r:real; i:integer;
        BEGIN
            b2:=sqrt((m3s-m1s)/m1s); a2:=arctan(b2);
            h:=(a2-o)/n; x:=o-h/2; r:=0;
            FOR i:=1 TO n DO
                BEGIN
                    x:=x+h; r:=r+F(x)
                END;
                pcis:=h*r
            END;
            BEGIN
                n:=n0; v:=pcis(o,a2,n);
                REPEAT
                    n:=2*n; q:=pcis(o,a2,n);
                    r:=abs(v-q); v:=q;
                UNTIL r<eps;
                rz:=q
            END;
        BEGIN
            Writeln(' m3s=', m3s:4:3);
            writeln(' m1s=', m1s:4:3);
            writeln(' Flas', ' ', f0as');
            b1:=sqrt((m3c-m1c)/m1c);
            a1:=arctan(b1);
            F11a:=(1+sqrt(b1))/(sqrt(b1))*(2+3/sqrt(b1)-3*(1+sqrt(b1))*a1/(sqrt(
b1)*b1));
            R1:=(1+sqrt(b1))*(1+15/(4*sqrt(b1))-3*(5+3*sqrt(b1))*a1/(4*sqrt(b1)
*b1));
            R2:=(-13-15/(sqrt(b1))+3*(1+sqrt(b1))*(5+sqrt(b1))*a1/(sqrt(b1)*b1)
);
            F12a:=(1+sqrt(b1))/(sqrt(b1)*sqrt(b1))*(R1+C111/(4*c441)*R2);

```

```

FO1a:=(2*(1+sqr(b1))/(sqr(b1)))*(1-3/(sqr(b1))+3*a1/(sqr(b1)*b1
));
R3:=(1+sqr(b1))*(1-6/(sqr(b1))-3/(2*sqr(b1)*(1+sqr(b1)))+15*a1/
(2+sqr(b1)*b1));
R4:=2+15/(2*sqr(b1))-3*(5+3*sqr(b1))*a1/(2*sqr(b1)*b1);
FO2a:=(1+sqr(b1))/(sqr(b1)*sqr(b1))*(R3+C111*R4/(C441));
Fl1a:=1+Fl1a*C2C/C1C+Fl2a*sqr(C2C/C1C);
FOa:=1+FO1a*C2C/C1C+FO2a*sqr(C2C/C1C);
a2c:=4.51E-16/(sqr(c1c)*sqrt(m3c*sqr(mlc))*FOa);
alc:=4.51E-16/(sqr(c1c)*sqrt(m3c*sqr(mlc))*Fl1a);
R5c:=b1/(1+sqr(b1))-a1;
R6c:=a1*ln(1+sqr(b1));
INLc(o,a1,F5,p1);
Lalc:=p1;
R7c:=2*Lalc;
R8c:=(sqr(b1)-1)/(sqr(b1)+1)+a1*(sqr(b1)+1)/b1;
R9c:=R5c*(-34.195+ln(Noi/(m3c*sqr(T))))-R6c+R7c;
R10c:=(1-sqr(b1))*a1-b1;
R11c:=2*(sqr(b1)-1)*Lalc;
R12c:=(-2*sqr(b1)*a1-(sqr(b1)-1)*a1*ln(1+sqr(b1)));
R13c:=0.5*(b1*(1+3*sqr(b1))+a1*(-1+2*sqr(b1)+3*sqr(b1)*sqr(b1)
));
R14c:=R10c*(-34.195+ln(Noi/(m3c*sqr(T))))+R11c+R12c;
b2:=sqrt((m3s-mls)/mls);
a2:=arctan(b2);
Fl1as:=(1+sqr(b2))/(sqr(b2))*(2+3/sqr(b2)-3*(1+sqr(b2))*a2/(sqr
(b2)*b2));
R1s:=(1+sqr(b2))*(1+15/(4*sqr(b2))-3*(5+3*sqr(b2))*a2/(4*sqr(b2
)*b2));
R2s:=(-13-15/(sqr(b2))+3*(1*sqr(b2))*(5+sqr(b2))*a2/(sqr(b2)*b2
));
Fl2as:=(1+sqr(b2))/(sqr(b2)*sqr(b2))*(R1s+C111/(4*C441)*R2s);
FO1as:=(2*(1+sqr(b2))/(sqr(b2)))*(1-3/(sqr(b2))+3*a1/(sqr(b2)*b
2));
R3s:=(1+sqr(b2))*(1-6/(sqr(b2))-3/(2*sqr(b2)*(1+sqr(b2)))+15*a2
/(2*sqr(b2)*b2));
R4s:=2+15/(2*sqr(b2))-3*(5+3*sqr(b2))*a2/(2*sqr(b2)*b2);
FO2as:=(1+sqr(b2))/(sqr(b2)*sqr(b2))*(R3s+C111*R4s/(C441));
Flas:=1+Fl1as*c2s/cl1s+Fl2as*sqr(c2s/cl1s);
FOas:=1+FO1as*c2s/cl1s+FO2as*sqr(c2s/cl1s);
a2s:=4.51E-16/(sqr(c1s)*sqrt(m3s*sqr(mls))*FOas);
als:=4.51E-16/(sqr(c1s)*sqrt(m3s*sqr(mls))*Flas);
R5s:=b2/(1+sqr(b2))-a2;
R6s:=a2*ln(1+sqr(b2));
INLs(0,a2,F5,p2);
La2s:=p2;
R7s:=2*La2s;
R8s:=(sqr(b2)-1)/(sqr(b2)+1)+a2*(sqr(b2)+1)/b2;
R9s:=R5s*(-34.195+ln(Noi/(m3s*sqr(T))))-R6s+R7s;
R10s:=(1-sqr(b2))*a2-b2;
R11s:=2*(sqr(b2)-1)*La2s;
R12s:=(-2*sqr(b2)*a2-(sqr(b2)-1)*a2*ln(1+sqr(b2)));

```

```

R13s:=0.5*(b2*(1+3*sqr(b2))+a2*(-1+2*sqr(b2)+3*sqr(b2)*sqr(b2))
);
R14s:=R10s*(-34.195+ln(Noi/(m3s*sqr(T))))+R11s+R12s;
writeln(          Flas:8:4,          FOas:8:4);
  writeln( 'T=', T );
  P:=0;
  FOR i:=1 TO 16 DO
  BEGIN
    writeln( ' P=', P );
    IT(a,w,F6,y6);
    IT(a,w,F7,y7);
    IT(a,w,F8,y8);
    IT(a,w,F9,y9);
    writeln( 'y6=', y6:8:6, 'y7=' , y7:8:6, ' y8=' , y8:8:6, ' y
9=' , y9:8:6);
    dEK1:=dEK/(T);
    Ec:=(P*(S11+2*S12)*(C1c+C2c/3))/(k*T);
    Els:=(P*C1s*(S11+2*S12)+C2s*P*S11)/(K*T);
    E2s:=(P*C1s*(S11+2*S12)+P*C2s*S12)/(K*T);
    Mnc:=exp(ln(sqr(mlc)*m3c)/3);
    Mns:=exp(ln(sqr(mls)*m3s)/3);
    nc:=1/(4+2*sqrt(Mns*Mns*Mns/(Mnc*Mnc*Mnc))*exp(Ec-dEk1)*(exp(-E1s)
+2*exp(-E2s)));
    p4nc:=4*nc;
    n1s:=1/(4*sqrt(Mnc*Mnc*Mnc/(Mns*Mns*Mns))*exp(dEk1+E1s-Ec)+2+4*exp
(E1s-E2s));
    p2n1s:=2*n1s;
    n2s:=1/(4*sqrt(Mnc*Mnc*Mnc/(Mns*Mns*Mns))*exp(dEk1+E2s-Ec)+2*exp(E
2s-E1s)+4);
    p4n2s:=4*n2s;
    Writeln( ' p4nc', ' p2n1s', ' p4n2s', ' SUM ' )
;
    writeln( p4nc:8:6, p2n1s:12:6, p4n2s:12:6, SUM:12:4);
    SUM:=p4nc+p2n1s+p4n2s;
    B:=1.0E7*Noi*8*sqr(e)/(3*T*sqrt(3.1416*Ko*T));
    SG11c:=B*nc*(2*alc/mlc+a2c/m3c)*2/3*1/9.1E-28;
    SG11slp:=B*n1s*als/mls*1/9.1E-28;
    SG11s2p:=B*n2s*(als/mls+a2s/m3s)*1/9.1E-28;
    SG11p:=SG11c+SG11slp+SG11s2p;
    SG33c:=B*nc*(2*alc/mlc+a2c/m3c)*2/3*1/9.1E-28;
    SG33slp:=B*n1s*a2s/m3s*1/9.1E-28;
    SG33s2p:=B*2*n2s*als/mls*1/9.1E-28;
    SG33p:=SG33c+SG33slp+SG33s2p;
    R011p:=1/SG11p;
    R033p:=1/SG33p;
    M11p:=SG11p/(Noi*e);
    M33p:=sg33p/(Noi*e);
    nco:=1/(4+6*sqrt(Mns*Mns*Mns/(Mnc*Mnc*Mnc))*Exp(-dEk1));
    nlso:=1/(4*sqrt(Mnc*Mnc*Mnc/(Mns*Mns*Mns))*exp(dEk1)+6);
    n2so:=1/(4*sqrt(Mnc*Mnc*Mnc/(Mns*Mns*Mns))*exp(dEk1)+6);
    SG11o:=B*(nco*(2*alc/mlc+a2c/m3c)*2/3+nlso*als/mls+n2so*(als/mls+a
2s/m3s))*1/9.1E-28;

```

```

RO11o:=1/SG11o;
M11o:=SG11o/(Noi*e);
SG33o:=B*(nco*(2*alc/mlc+a2c/m3c)*2/3+n1so*a2s/m3s+2*n2so*als/mls)
*1/9.1E-28;
RO33o:=1/SG33o;
M33o:=SG33o/(Noi*e);
Z1:=RO11p/RO11o;
Z2:=RO33p/RO33o;
M1:=M11p/M11o;
M2:=M33p/M33o;
SG11ci:=B*nc*(2*y7*alc/mlc+y6*a2c/m3c)*2/3*1/9.1E-28;
SG11slpi:=B*n1s*y9*als/mls*1/9.1E-28;
SG11s2pi:=B*n2s*(y9*als/mls+y8*a2s/m3s)*1/9.1E-28;
SG11pi:=SG11ci+SG11slpi+SG11s2pi;
SG33ci:=B*nc*(2*y7*alc/mlc+y6*a2c/m3c)*2/3*1/9.1E-28;
SG33slpi:=B*n1s*y8*a2s/m3s*1/9.1E-28;
SG33s2pi:=B*n2s*y9*als/mls*1/9.1E-28;
SG33pi:=SG33ci+SG33slpi+SG33s2pi;
RO11pi:=1/SG11pi;
RO33pi:=1/SG33pi;
M11pi:=SG11pi/(Noi*e);
M33pi:=SG33pi/(Noi*e);
SG11oi:=B*(nco*(2*y7*alc/mlc+y6*a2c/m3c)*2/3+n1so*y9*als/mls+n2so*
(y9*als/mls+y8*a2s/m3s))*1/9.1E-28;
RO11oi:=1/SG11oi;
M11oi:=SG11oi/(Noi*e);
SG33oi:=B*(nco*(2*y7*alc/mlc+y6*a2c/m3c)*2/3+n1so*y8*a2s/m3s+2*n2s
o*y9*als/mls)*1/9.1E-28;
RO33oi:=1/SG33oi;
M33oi:=SG33oi/(Noi*e);
Z1i:=RO11pi/RO11oi;
Z2i:=RO33pi/RO33oi;
M1i:=M11pi/M11oi;
M2i:=M33pi/M33oi;
writeln('      Z1 ','      Z1i','      Z2 ','      Z2i ');
writeln( Z1:10:4,      Z1i:10:4,      Z2:10:4,      Z2i:10:4);
writeln(' SG11p ',' SG33p','RO11p ',' M11p ','RO33p ',' M33p ','
M1 ','M2');
writeln( SG11p:8:4,      RO11p:10:4,      M11p:10:1,      SG33p:10:4,      RO
33p:10:4,      M1:6:2,      M2:6:2,      M33p:10:1);
writeln( ' SG11pi ',' RO11pi ',' M11pi ',' SG33pi ',' RO
33pi ',' M33pi',' M1i ',' M2i');
writeln( SG11pi:8:4,      RO11pi:10:4,      M11pi:10:1,      SG33pi:10:4,      RO3
3pi:10:4,      M33pi:10:1,M1i:6:2,      M2i:6:2);
      P:=-2000*i;
      END;
END.

```


Anexo - II

Exemplos dos cálculos.

m3s=1.200	C1s=0.900							
m1s=0.236	C2s=8.500							
Flas	F0as							
71.4913	110.5715							
T=78	Noi= 1.6000000000E+13							
alc	a2c	als	a2s					
3.1E-17	3.6E-17	3.0E-17	1.946E-17					
y6=0.992924	y7=0.932145	y8=0.992667	y9=0.972376					
P=-20000								
p4nc	p2n1s	p4n2s	SUM					
0.996359	0.003641	0.000000	-0.0000					
Z1	Z1i	Z2	Z2i					
1.0018	1.0018	1.0034	1.0034					
sig11p	RO11P	M11P	sig33p	RO33P	M33P	M1	M2	
0.1068	9.3671	-41702.0	0.1066	9.3819	-41635.9	1.00	1.00	
sig11pi	RO11Pi	M11Pi	sig33pi	RO33Pi	M33Pi	M1i	M2i	
0.0997	10.0286	-38950.9	0.0996	10.0452	-38886.8	1.00	1.00	
P=-22000								
p4nc	p2n1s	p4n2s	SUM					
0.971254	0.028746	0.000000	1.0000					
Z1	Z1i	Z2	Z2i					
1.0146	1.0140	1.0277	1.0275					
sig11p	RO11P	M11P	sig33p	RO33P	M33P	M1	M2	
0.1054	9.4867	-41175.9	0.1041	9.6086	-40653.6	0.99	0.97	
sig11pi	RO11Pi	M11Pi	sig33pi	RO33Pi	M33Pi	M1i	M2i	
0.0985	10.1515	-38479.6	0.0972	10.2868	-37973.3	0.99	0.97	
P=-24000								
p4nc	p2n1s	p4n2s	SUM					
0.806649	0.193351	0.000000	1.0000					
Z1	Z1i	Z2	Z2i					
1.1074	1.1026	1.2211	1.2200					
sig11p	RO11P	M11P	sig33p	RO33P	M33P	M1	M2	
0.0966	10.3543	-37725.9	0.0876	11.4175	-34212.9	0.90	0.82	
sig11pi	RO11Pi	M11Pi	sig33pi	RO33Pi	M33Pi	M1i	M2i	
0.0906	11.0380	-35389.1	0.0819	12.2133	-31983.5	0.91	0.82	
P=-26000								
p4nc	p2n1s	p4n2s	SUM					
0.339991	0.660009	0.000000	1.0000					
Z1	Z1i	Z2	Z2i					
1.4950	1.4654	2.6188	2.6009					
sig11p	RO11P	M11P	sig33p	RO33P	M33P	M1	M2	
0.0715	13.9783	-27945.1	0.0408	24.4854	-15953.4	0.67	0.38	
sig11pi	RO11Pi	M11Pi	sig33pi	RO33Pi	M33Pi	M1i	M2i	
0.0682	14.6700	-26627.5	0.0384	26.0373	-15002.5	0.68	0.38	
P=-28000								
p4nc	p2n1s	p4n2s	SUM					
0.059802	0.940198	0.000000	1.0000					
Z1	Z1i	Z2	Z2i					
1.8928	1.8262	8.3723	8.1175					
sig11p	RO11P	M11P	sig33p	RO33P	M33P	M1	M2	
0.0565	17.6973	-22072.6	0.0128	78.2804	-4990.1	0.53	0.12	
sig11pi	RO11Pi	M11Pi	sig33pi	RO33Pi	M33Pi	M1i	M2i	
0.0547	18.2818	-21366.9	0.0123	81.2650	-4806.8	0.55	0.12	

m3s=0.600 C1s=0.300
 m1s=0.261 C2s=10.500
 Flas , FOas
 714.0511 1398.5722
 T=78 'Noi= 1.6000000000E+13
 alc a2c als a2s
 3.1E-17 3.6E-17 3.5E-17 1.771E-17
 y6=0.992924 y7=0.932145 y8=0.989385 y9=0.981618
 P=-20000

p4nc	p2n1s	p4n2s	SUM				
0.879185	0.120815	0.000000	-0.0000				
Z1	Z1i	Z2	Z2i				
1.0617	1.0581	1.1197	1.1186				
sig11p	RO11P	M11P	sig33p	RO33P	M33P	M1	M2
0.1007	9.9264	-39352.1	0.0955	10.4687	-37313.6	0.94	0.89
sig11pi	RO11Pi	M11Pi	sig33pi	RO33Pi	M33Pi	M1i	M2i
0.0944	10.5923	-36878.2	0.0893	11.1986	-34881.7	0.95	0.89

P=-22000

p4nc	p2n1s	p4n2s	SUM				
0.378885	0.621115	0.000000	1.0000				
Z1	Z1i	Z2	Z2i				
1.4256	1.3930	2.2193	2.1986				
sig11p	RO11P	M11P	sig33p	RO33P	M33P	M1	M2
0.0750	13.3297	-29304.8	0.0482	20.7505	-18824.9	0.70	0.45
sig11pi	RO11Pi	M11Pi	sig33pi	RO33Pi	M33Pi	M1i	M2i
0.0717	13.9450	-28011.7	0.0454	22.0099	-17747.7	0.72	0.45

P=-24000

p4nc	p2n1s	p4n2s	SUM				
0.048647	0.951353	0.000000	1.0000				
Z1	Z1i	Z2	Z2i				
1.8427	1.7609	6.3101	6.0609				
sig11p	RO11P	M11P	sig33p	RO33P	M33P	M1	M2
0.0580	17.2288	-22672.8	0.0169	58.9992	-6620.8	0.54	0.16
sig11pi	RO11Pi	M11Pi	sig33pi	RO33Pi	M33Pi	M1i	M2i
0.0567	17.6281	-22159.2	0.0165	60.6756	-6437.9	0.57	0.16

P=-26000

p4nc	p2n1s	p4n2s	SUM				
0.004268	0.995732	0.000000	1.0000				
Z1	Z1i	Z2	Z2i				
1.9181	1.8257	8.3878	7.9339				
sig11p	RO11P	M11P	sig33p	RO33P	M33P	M1	M2
0.0558	17.9337	-21781.6	0.0128	78.4257	-4980.8	0.52	0.12
sig11pi	RO11Pi	M11Pi	sig33pi	RO33Pi	M33Pi	M1i	M2i
0.0547	18.2768	-21372.7	0.0126	79.4264	-4918.1	0.55	0.13

P=-28000

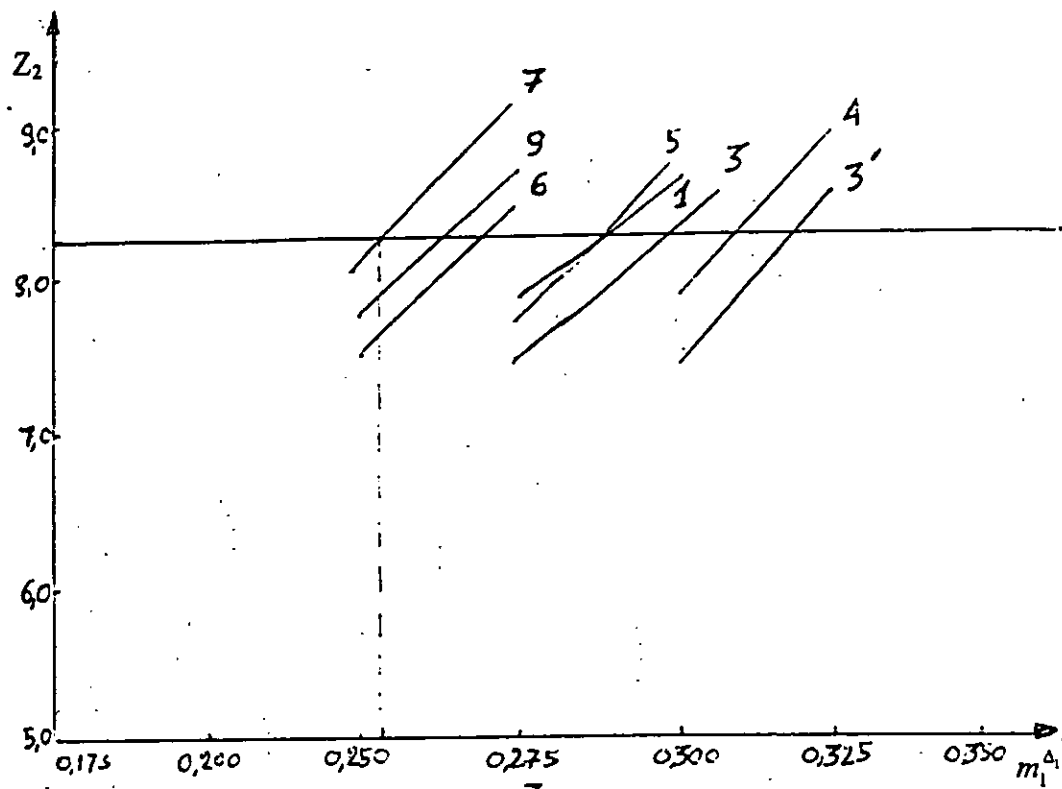
p4nc	p2n1s	p4n2s	SUM				
0.000359	0.999641	0.000000	1.0000				
Z1	Z1i	Z2	Z2i				
1.9250	1.8316	8.6384	8.1559				
sig11p	RO11P	M11P	sig33p	RO33P	M33P	M1	M2
0.0556	17.9986	-21703.1	0.0124	80.7681	-4836.4	0.52	0.12
sig11pi	RO11Pi	M11Pi	sig33pi	RO33Pi	M33Pi	M1i	M2i
0.0545	18.3363	-21303.4	0.0122	81.6489	-4784.2	0.55	0.12

Anexo - III

Exemplo de cálculo da variação da piezoresistência, variação da mobilidade e parâmetro da anisotropia, sob variação das massas eficazes e constantes dos potenciais da deformação do Δ_1

mínimos.

T=78		Noi= 1.6E+13										
Z1	Z1i	Z2	Z2i	KM	KMi	M33Pi	M3i	M4i	m1s	m3s	C1s	C2s
0.70	0.69	2.07	2.03	2.97	2.95	-1.92E+04	0.69	2.03	0.175	0.6	0.1	8.5
0.70	0.69	2.07	2.03	2.97	2.95	-1.92E+04	0.69	2.03	0.175	0.6	0.1	8.5
0.83	0.81	2.28	2.24	2.75	2.75	-1.75E+04	0.81	2.24	0.200	0.6	0.1	8.5
0.97	0.94	2.50	2.45	2.58	2.59	-1.60E+04	0.94	2.45	0.225	0.6	0.1	8.5
1.11	1.08	2.72	2.66	2.44	2.46	-1.47E+04	1.08	2.66	0.250	0.6	0.1	8.5
1.26	1.22	2.95	2.88	2.33	2.36	-1.35E+04	1.22	2.88	0.275	0.6	0.1	8.5
1.42	1.37	3.19	3.12	2.25	2.28	-1.25E+04	1.37	3.12	0.300	0.6	0.1	8.5
1.57	1.51	3.45	3.37	2.20	2.23	-1.16E+04	1.51	3.37	0.325	0.6	0.1	8.5
0.76	0.75	2.34	2.29	3.06	3.05	-1.70E+04	0.75	2.29	0.175	0.7	0.1	8.5
0.91	0.89	2.58	2.53	2.83	2.83	-1.54E+04	0.89	2.53	0.200	0.7	0.1	8.5
1.07	1.04	2.83	2.77	2.65	2.66	-1.41E+04	1.04	2.77	0.225	0.7	0.1	8.5
1.23	1.19	3.07	3.01	2.50	2.52	-1.30E+04	1.19	3.01	0.250	0.7	0.1	8.5
1.40	1.35	3.33	3.25	2.38	2.41	-1.20E+04	1.35	3.25	0.275	0.7	0.1	8.5
1.57	1.51	3.58	3.50	2.29	2.31	-1.11E+04	1.51	3.50	0.300	0.7	0.1	8.5
1.74	1.68	3.84	3.76	2.21	2.24	-1.04E+04	1.68	3.76	0.325	0.7	0.1	8.5
0.82	0.81	2.58	2.53	3.14	3.13	-1.54E+04	0.81	2.53	0.175	0.8	0.1	8.5
0.99	0.97	2.86	2.80	2.90	2.91	-1.39E+04	0.97	2.80	0.200	0.8	0.1	8.5
1.16	1.13	3.14	3.07	2.71	2.73	-1.27E+04	1.13	3.07	0.225	0.8	0.1	8.5
1.34	1.30	3.41	3.34	2.55	2.58	-1.17E+04	1.30	3.34	0.250	0.8	0.1	8.5
1.52	1.47	3.69	3.61	2.43	2.46	-1.08E+04	1.47	3.61	0.275	0.8	0.1	8.5
1.71	1.65	3.97	3.89	2.32	2.35	-1.00E+04	1.65	3.89	0.300	0.8	0.1	8.5
1.90	1.84	4.25	4.16	2.24	2.27	-9.37E+03	1.84	4.16	0.325	0.8	0.1	8.5
0.88	0.86	2.82	2.76	3.20	3.20	-1.41E+04	0.86	2.76	0.175	0.9	0.1	8.5
1.06	1.03	3.12	3.06	2.95	2.96	-1.27E+04	1.03	3.06	0.200	0.9	0.1	8.5
1.24	1.21	3.43	3.36	2.76	2.78	-1.16E+04	1.21	3.36	0.225	0.9	0.1	8.5
1.44	1.39	3.73	3.66	2.60	2.63	-1.07E+04	1.39	3.66	0.250	0.9	0.1	8.5
1.64	1.58	4.04	3.96	2.47	2.50	-9.86E+03	1.58	3.96	0.275	0.9	0.1	8.5
1.84	1.78	4.34	4.26	2.36	2.39	-9.16E+03	1.78	4.26	0.300	0.9	0.1	8.5
2.05	1.98	4.65	4.56	2.27	2.30	-8.56E+03	1.98	4.56	0.325	0.9	0.1	8.5
0.93	0.92	3.04	2.98	3.26	3.25	-1.31E+04	0.92	2.98	0.175	1.0	0.1	8.5
1.12	1.10	3.37	3.31	3.00	3.01	-1.18E+04	1.10	3.31	0.200	1.0	0.1	8.5
1.32	1.29	3.70	3.63	2.80	2.82	-1.07E+04	1.29	3.63	0.225	1.0	0.1	8.5
1.53	1.49	4.04	3.96	2.64	2.67	-9.85E+03	1.49	3.96	0.250	1.0	0.1	8.5
1.75	1.69	4.37	4.29	2.50	2.54	-9.10E+03	1.69	4.29	0.275	1.0	0.1	8.5
1.97	1.90	4.70	4.61	2.39	2.42	-8.46E+03	1.90	4.61	0.300	1.0	0.1	8.5
2.19	2.12	5.04	4.94	2.29	2.33	-7.90E+03	2.12	4.94	0.325	1.0	0.1	8.5
0.98	0.97	3.24	3.19	3.30	3.30	-1.22E+04	0.97	3.19	0.175	1.1	0.1	8.5
1.19	1.16	3.60	3.54	3.04	3.05	-1.10E+04	1.16	3.54	0.200	1.1	0.1	8.5
1.40	1.36	3.96	3.89	2.83	2.86	-1.00E+04	1.36	3.89	0.225	1.1	0.1	8.5
1.62	1.57	4.32	4.25	2.67	2.70	-9.19E+03	1.57	4.25	0.250	1.1	0.1	8.5
1.85	1.79	4.68	4.60	2.53	2.57	-8.48E+03	1.79	4.60	0.275	1.1	0.1	8.5
2.09	2.02	5.04	4.95	2.42	2.45	-7.88E+03	2.02	4.95	0.300	1.1	0.1	8.5
2.33	2.25	5.40	5.31	2.32	2.36	-7.36E+03	2.25	5.31	0.325	1.1	0.1	8.5
1.03	1.01	3.44	3.38	3.34	3.34	-1.15E+04	1.01	3.38	0.175	1.2	0.1	8.5
1.25	1.22	3.83	3.76	3.07	3.09	-1.04E+04	1.22	3.76	0.200	1.2	0.1	8.5
1.47	1.43	4.21	4.14	2.86	2.89	-9.42E+03	1.43	4.14	0.225	1.2	0.1	8.5
1.71	1.66	4.60	4.52	2.69	2.73	-8.63E+03	1.66	4.52	0.250	1.2	0.1	8.5
1.95	1.89	4.98	4.90	2.56	2.59	-7.97E+03	1.89	4.90	0.275	1.2	0.1	8.5
2.20	2.13	5.37	5.28	2.44	2.48	-7.40E+03	2.13	5.28	0.300	1.2	0.1	8.5
2.46	2.38	5.75	5.65	2.34	2.38	-6.90E+03	2.38	5.65	0.325	1.2	0.1	8.5
1.08	1.06	3.63	3.57	3.37	3.37	-1.09E+04	1.06	3.57	0.175	1.3	0.1	8.5
1.30	1.27	4.04	3.97	3.10	3.12	-9.82E+03	1.27	3.97	0.200	1.3	0.1	8.5
1.54	1.50	4.45	4.38	2.89	2.92	-8.91E+03	1.50	4.38	0.225	1.3	0.1	8.5
1.79	1.74	4.86	4.78	2.72	2.75	-8.16E+03	1.74	4.78	0.250	1.3	0.1	8.5



- 1. $m_3^{\Delta_1} = 0,9$
 $C_1^{\Delta_1} = 0,3$
 $C_2^{\Delta_1} = 9,0$
- 3. $m_3^{\Delta_1} = 0,7$
 $C_1^{\Delta_1} = 0,3$
 $C_2^{\Delta_1} = 9,5$
- 3'. $m_3^{\Delta_1} = 0,7$
 $C_1^{\Delta_1} = 1,3$
 $C_2^{\Delta_1} = 8,5$
- 4. $m_3^{\Delta_1} = 0,7$
 $C_1^{\Delta_1} = 0,7$
 $C_2^{\Delta_1} = 9,0$
- 5. $m_3^{\Delta_1} = 0,6$
 $C_1^{\Delta_1} = 0,3$
 $C_2^{\Delta_1} = 10,5$
- 6. $m_3^{\Delta_1} = 0,6$
 $C_1^{\Delta_1} = 0,3$
 $C_2^{\Delta_1} = 11,0$
- 7. $m_3^{\Delta_1} = 0,6$
 $C_1^{\Delta_1} = 0,3$
 $C_2^{\Delta_1} = 11,5$
- 9. $m_3^{\Delta_1} = 1,2$
 $C_1^{\Delta_1} = 0,9$
 $C_2^{\Delta_1} = 8,5$

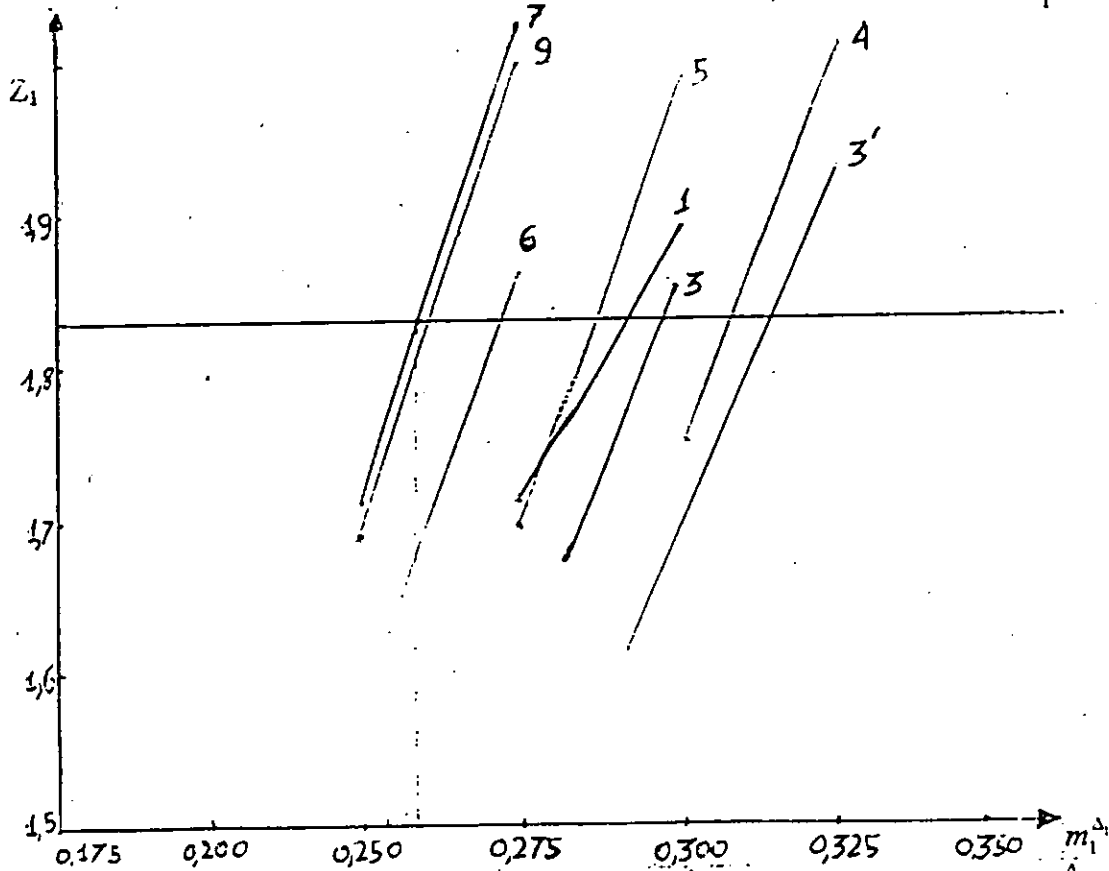


Fig a.) Exemplos dos cálculos da $Z_2 = Z_2(m_1^{\Delta_1})$ e $Z_1 = Z_1(m_1^{\Delta_1})$, para valores diferentes das $m_3^{\Delta_1}$, $C_1^{\Delta_1}$ e $C_2^{\Delta_1}$.

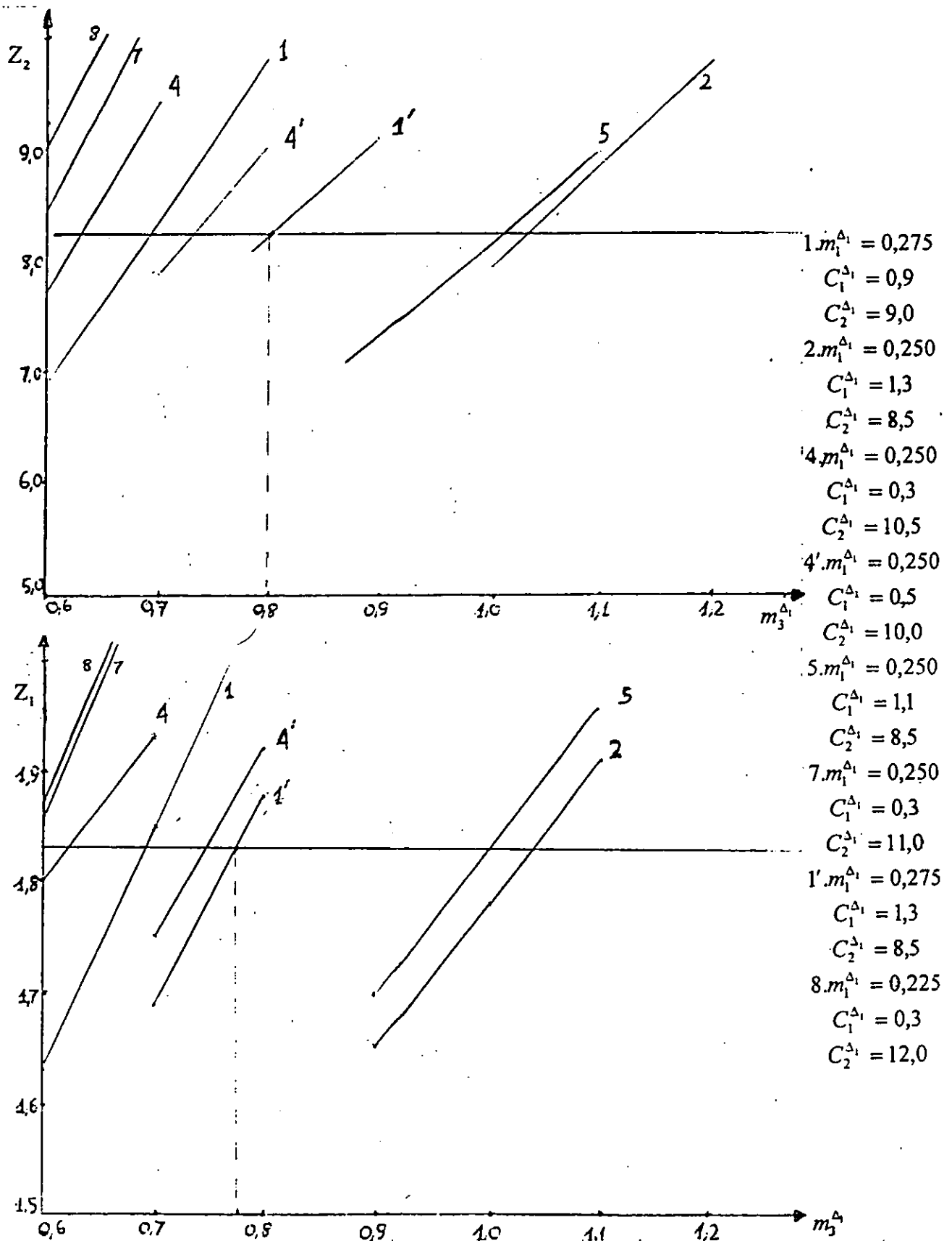


Fig. b) Exemplos dos cálculos da $Z_2 = Z_2(m_3^{\Delta_1})$ e $Z_1 = Z_1(m_3^{\Delta_1})$, para valores diferentes das $m_1^{\Delta_1}$, $C_1^{\Delta_1}$ e $C_2^{\Delta_1}$

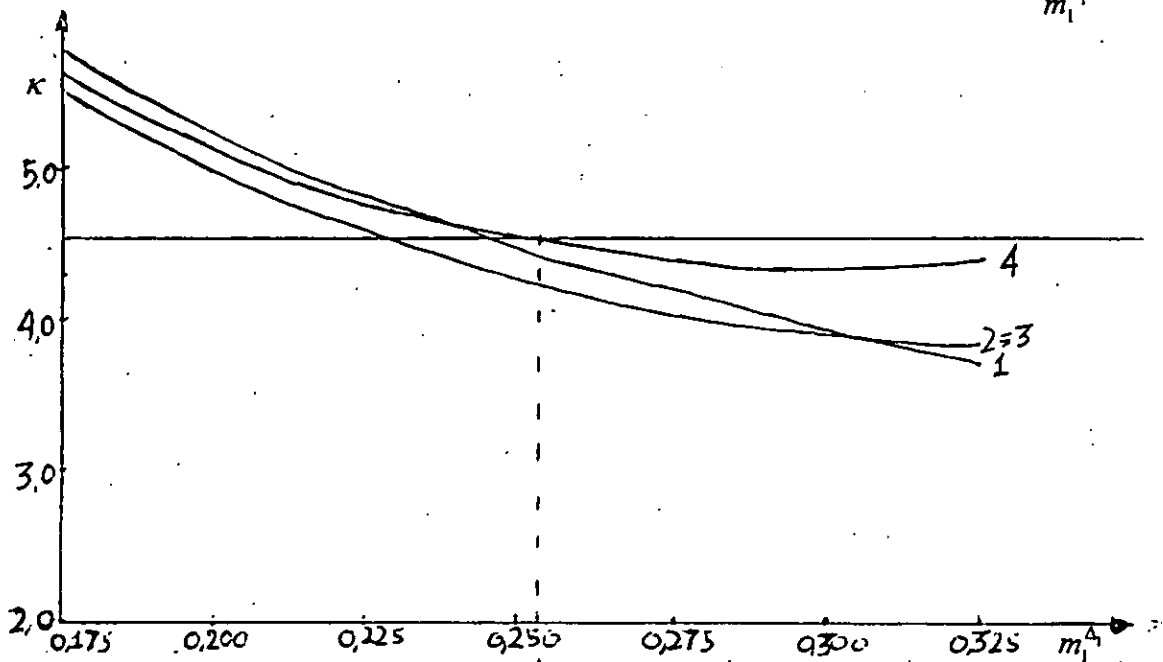
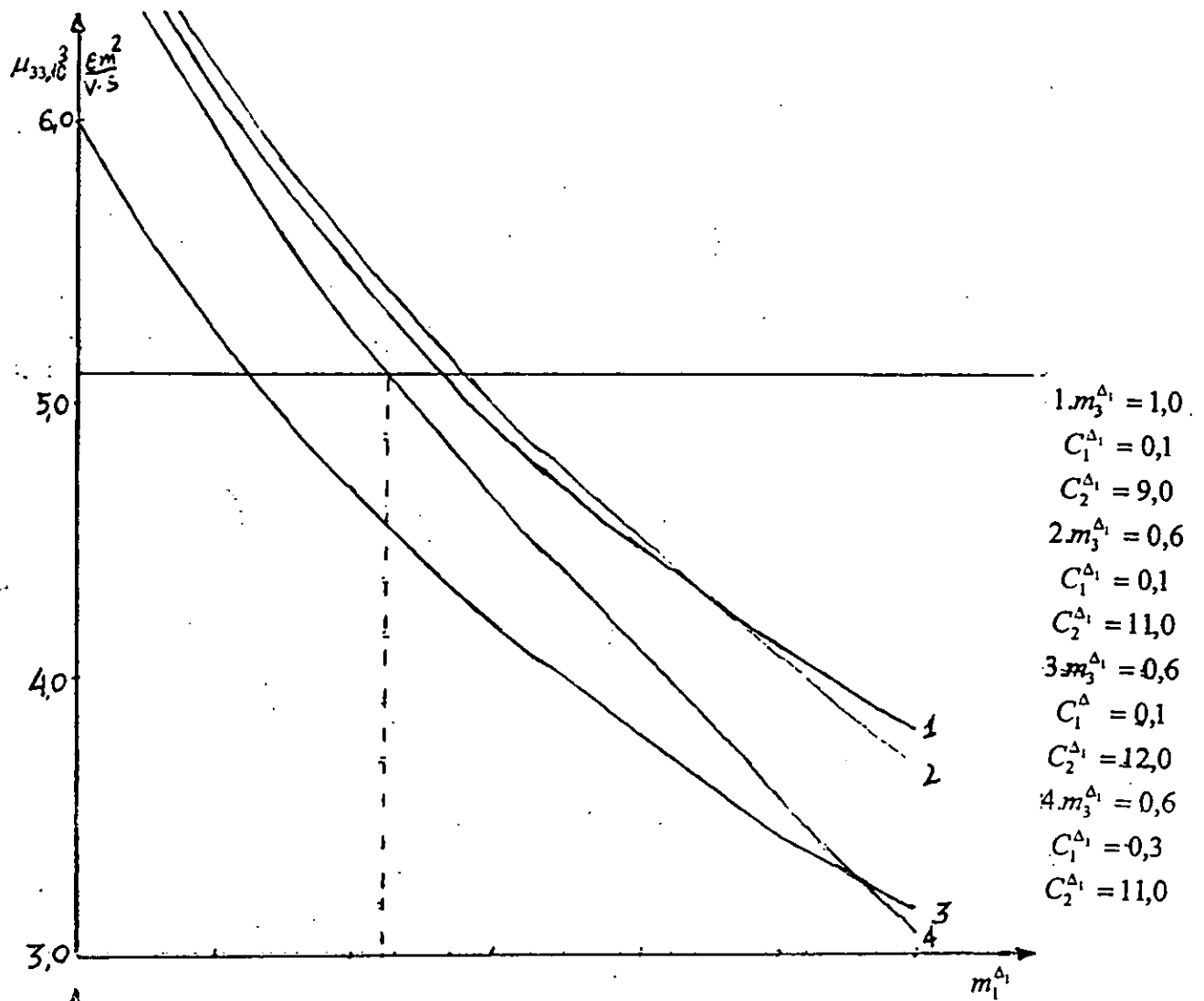


Fig. c) Exemplos dos cálculos de $\mu_{33} = \mu_{33}(m_1^{\Delta_1})$ e $\kappa = \kappa(m_1^{\Delta_1})$, para valores diferentes das $m_3^{\Delta_1}$, $C_1^{\Delta_1}$ e $C_2^{\Delta_1}$

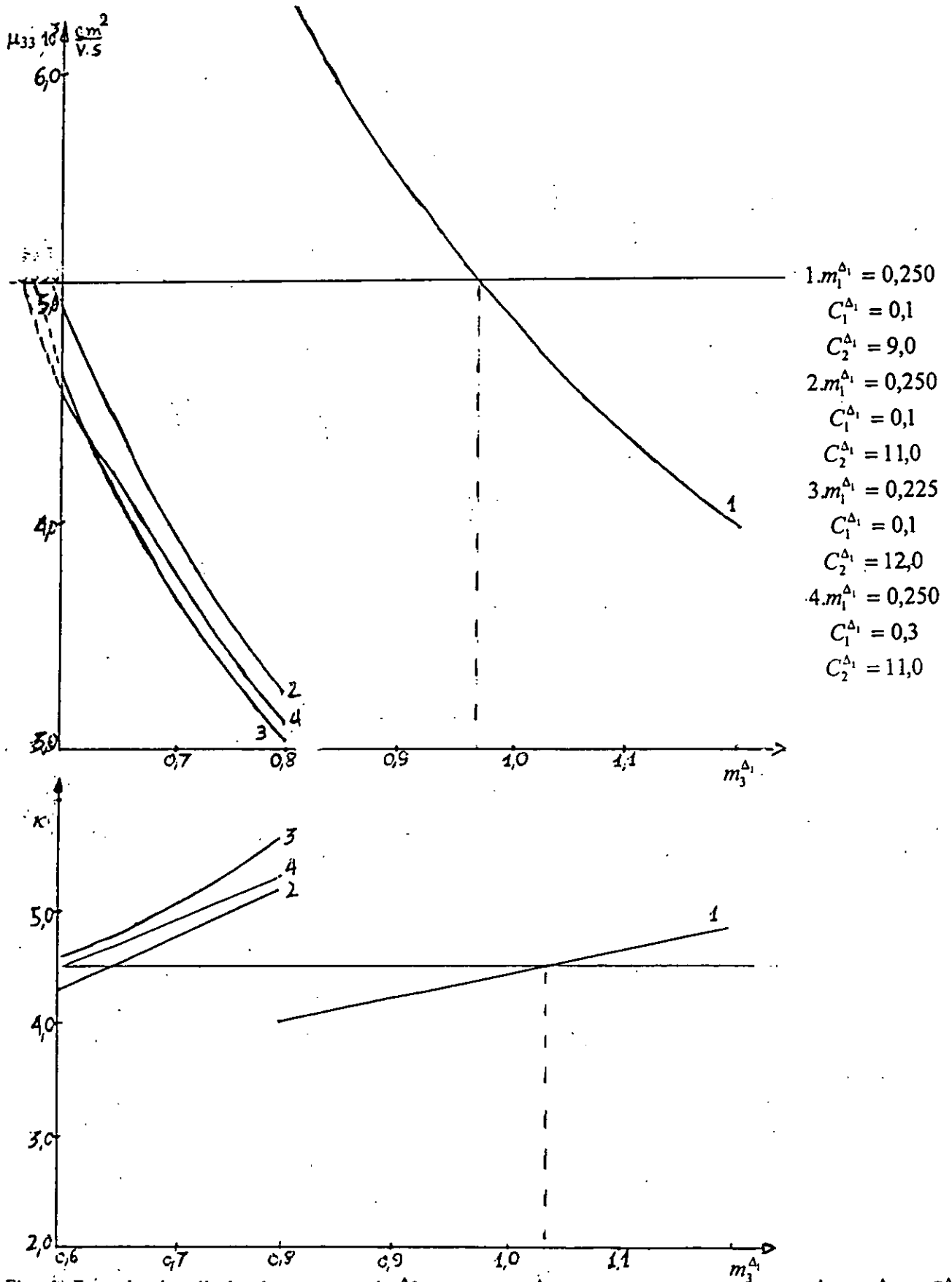


Fig. d) Exemplos dos cálculos de $\mu_{33} = \mu_{33}(m_3^{\Delta_1})$ e $\kappa = \kappa(m_3^{\Delta_1})$, para valores diferentes das $m_1^{\Delta_1}$, $C_1^{\Delta_1}$ e $C_2^{\Delta_1}$

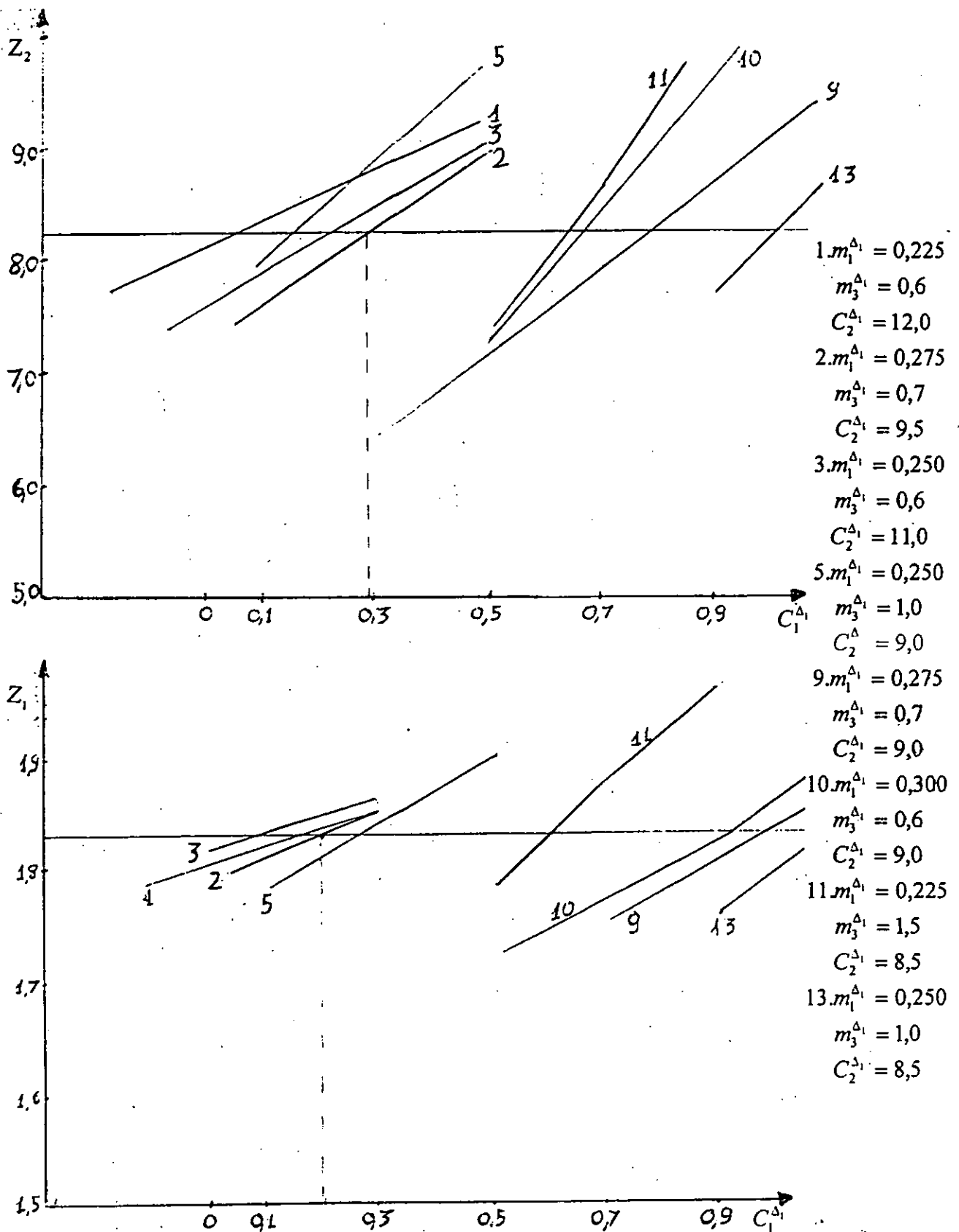


Fig. e) Exemplos dos cálculos da $Z_2 = Z_2(C_1^{\Delta_1})$ e $Z_1 = Z_1(C_1^{\Delta_1})$, para valores diferentes das $m_1^{\Delta_1}$, $m_3^{\Delta_1}$ e $C_2^{\Delta_1}$.

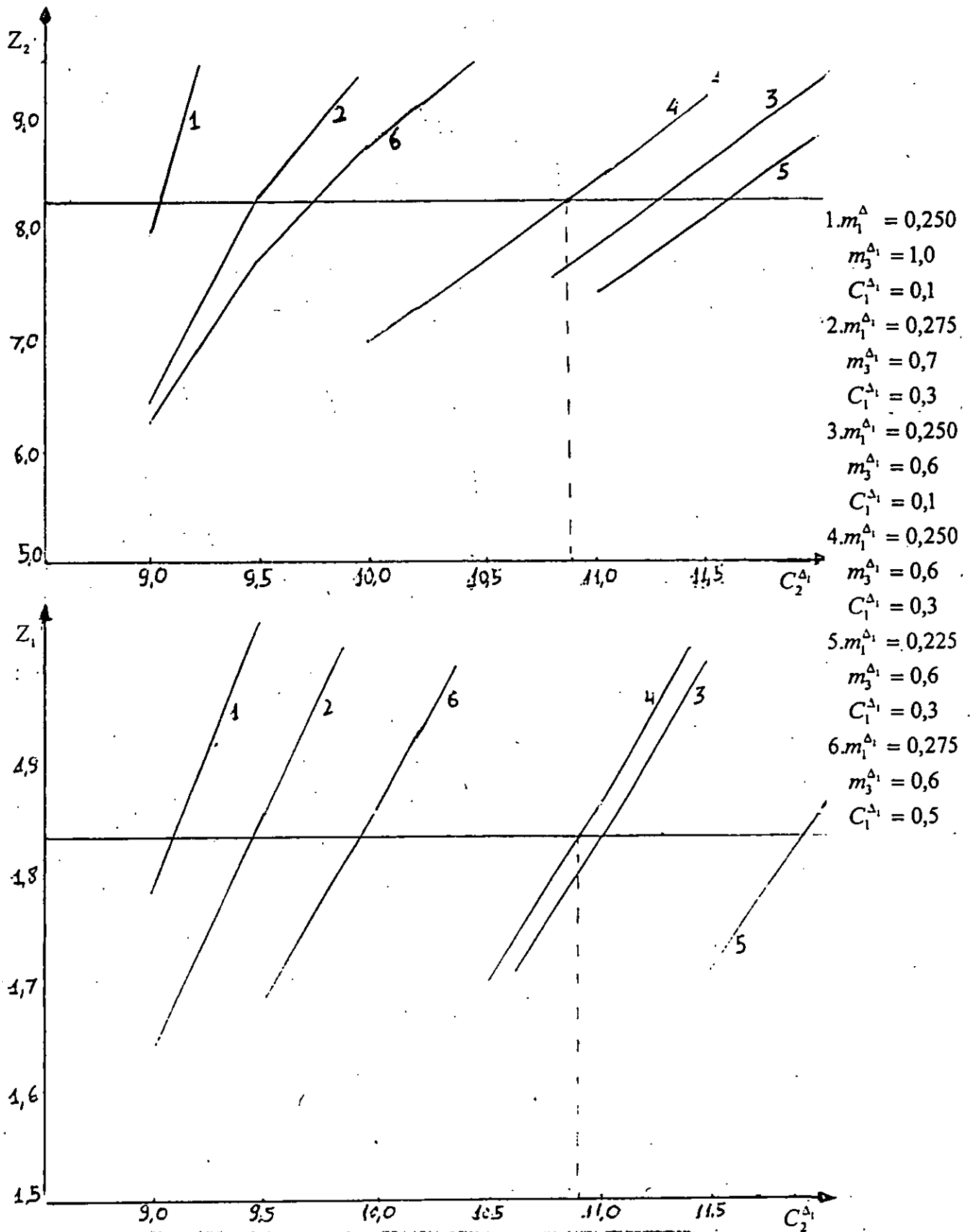


Fig. f. Exemplos dos cálculos da $Z_2 = Z_2(C_2^{\Delta_1})$ e $Z_1 = Z_1(C_2^{\Delta_1})$, para valores diferentes das $m_1^{\Delta_1}$, $m_2^{\Delta_1}$ e $C_1^{\Delta_1}$.