



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE FÍSICA
Programa de Pós-Graduação em Física

TESE DE DOUTORADO

**DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES DE TRANSPORTE EM
SEMICONDUCTORES E ÓXIDOS SEMICONDUCTORES**

Erick Santana dos Santos

2017

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

INSTITUTO DE FÍSICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES DE TRANSPORTE EM
SEMICONDUCTORES E ÓXIDOS SEMICONDUCTORES**

Erick Santana dos Santos

Orientador: Denis G. F. David

Co-orientador: Thierry J. Lameire

Tese apresentada ao Instituto de Física da
Universidade Federal da Bahia como parte dos
requisitos para a obtenção do título de Doutor em
Física.

Salvador – 2017

Modelo de ficha catalográfica fornecido pelo Sistema Universitário de Bibliotecas da UFBA para ser confeccionada pelo autor

Santos, Erick Santana dos
Determinação das Propriedades de Transporte em
Semicondutores e Óxidos Semicondutores / Erick Santana dos
Santos. -- Salvador, 2017.
204 f. : il

Orientador: Denis Gilbert Francis David.
Coorientador: Thierry Jacques Lameire .
Tese (Doutorado - Física) -- Universidade Federal da Bahia,
Universidade Federal da Bahia, 2017.

1. Método Monte Carlo. 2. Teoria semi-clássica de Boltzmann. 3. Fotocondutividade. 4. Correntes Eddy. I. David, Denis Gilbert Francis. II. Lameire , Thierry Jacques. III. Título.

Para o meu pai...

AGRADECIMENTOS

Ao professor Denis pela confiança em mim depositada durante estes anos de convivência, ao qual será meu exemplo como profissional e pesquisador por toda a minha vida. Aos professores Thierry e Marcus pelos bons conselhos e sugestões. À minha família pela paciência e compreensão e em especial ao professor Ferreira pelo exemplo pessoal e profissional. Aos meus amigos, Thiago, Marivaldo, Ricardo, Jadiel, Rafael (in memoriam) e Jime pelos bons momentos das quartas de Amaralina. A CAPES pelo apoio financeiro.

RESUMO

Este trabalho dedica-se a busca de novos métodos de medidas das propriedades elétricas de semicondutores de filmes finos. Teve seu início durante medidas de condutividade quando vimos a necessidade de aperfeiçoar os testes que são comumente realizados. A primeira mudança sugerida foi na simulação de transporte via o Método Monte Carlo, onde com a teoria semi-clássica de Boltzmann, pudemos calcular parâmetros como coeficiente Hall, fator Hall e resistividade dos semicondutores. Os primeiros resultados obtidos foram para uma amostra de dióxido de estanho, onde o comportamento do coeficiente Hall e resistividade em função da temperatura e do campo magnético aplicado apresentaram concordância com os valores experimentais coletados a partir da montagem realizada no laboratório. Simulamos também o comportamento para outros materiais de interesse na pesquisa do grupo como CuO, Cu₂O e CIS, além do InSb, GaAs e GaSb para medidas de comparações entre estes. Em seguida realizamos uma adaptação na medida de condutividade sem contatos, conhecida como medidas das correntes Eddy (ou correntes de Foucault), para serem realizadas em amostras com várias interfaces. Neste caso, adaptamos uma teoria existente na geofísica no qual descreve o potencial vetor para uma bobina em termos da função de Green dinâmica. Esta proposta está direcionada para semicondutores com várias interfaces, como o CIS por exemplo que é crescido no Instituto de Física sobre um substrato de dióxido de estanho dopado com flúor. As medidas de condutividade via método de Van der Pauw para este material não puderam ser realizadas pois o substrato interferia nos resultados. Sendo assim uma técnica de medidas sem contatos e que leva em conta as interfaces do material seria uma boa sugestão. Testamos inicialmente somente o substrato de dióxido de estanho ao qual apresentou boa concordância com os dados de condutividade para este material. Por fim, realizamos a montagem para a medida de fotocondução em função da temperatura, mas utilizamos uma fonte de corrente alternada ao invés de uma corrente contínua. Esta montagem tem o intuito em medir pequenas variações de corrente, pois utilizamos um lock-in para sua detecção. Os testes de fotocondução foram realizados no dióxido de estanho, onde não verificamos efeito fotocondutivo, no CIS que não pode ser medido devido a interferência do substrato e em amostras de silício fortemente dopadas com bismuto e/ou fósforo. Os resultados para o silício apresentaram um comportamento não previsto, ou seja, surgiram variações de fase detectadas pelo lock-in em função da temperatura e do comprimento de onda da radiação incidente em algumas amostras. Para explicar este comportamento, adaptamos a teoria de fotocondução com a definição de mobilidade ambipolar e conseguimos determinar parâmetros como mobilidade eletrônica, coeficiente de absorção, variação na concentração de portadores devido à radiação incidente, etc. que não se restringiu apenas na determinação do gap do semicondutor. Estes resultados mostraram-se coerentes com os materiais estudados e sua análise leva a crer que o silício altamente dopado pode se comportar como um material tipo *n* ou tipo *p* a depender da temperatura e do comprimento de onda da radiação incidente.

ABSTRACT

This work is dedicated to the search for new methods of measurements of the electrical properties of thin film semiconductors. Had its inception during conductivity measures when we saw the need to refine the tests that are commonly carried out. The first change was suggested in the simulation of transport via the Monte Carlo Method, where with the semi-classical theory of Boltzmann, we were able to calculate parameters with Hall coefficient and resistivity of semiconductor Hall factor. The first results were for a sample Tin dioxide, where the behavior of the Hall coefficient and resistivity as a function of temperature and the applied magnetic field showed agreement with the experimental values collected from the assembly held in the lab. Also simulate the behavior for other materials of interest in the research of the group as CuO, CuO₂ and CIS, in addition, InSb GaAs and GaSb for comparisons between these measures. Then we perform an adaptation in the measure of conductivity without contacts, known as Eddy currents (or Foucault currents), to be carried out on samples with multiple interfaces. In this case, we adapted an existing theory on geophysics in which describes the vector potential in terms of the Green Function. This proposal is directed to semiconductors with multiple interfaces, such as the CIS for example which is grown in the Institute of Physics on a substrate of fluorine-doped tin dioxide. Conductivity measurements for this material could not be performed because the substrate interfere on the results. Therefore a technique of measures without contacts and that takes into account the material interfaces would be a good suggestion. Tested initially only the substrate of Tin dioxide which showed good agreement with the data of conductivity for this material. Finally, the assembly for the measurement of fotocondução in function of temperature, but we use a source of alternating current instead of direct current. This mount is intended to measure tiny variations, because we use a lock-in for their detection. Fotocondução tests were carried out in the Tin dioxide, where we checked fotocondutivo effect in the CIS that can not be measured due to interference from substrate and Silicon samples heavily doped with Bismuth and/or phosphorus. The results for the unforeseen behavior presented silicon, that is, phase variations detected by the lock-in as a function of temperature and the wavelength of the incident radiation in some samples. To explain this behavior, we adapted the theory of fotocondução with the definition of mobility ambipolar and we were able to determine parameters with electronic mobility, absorption coefficient, variation in the concentration of carriers due to incident radiation, etc. which is not restricted only to the determination of the gap of the semiconductor. These results were consistent with the studied materials and its analysis leads us to believe that Silicon doped with these materials may behave as a material type n or type p depending on the temperature and radiation incident.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Experimento de Haynes-Shockley. (a) Montagem experimental. (b) evolução dos portadores de carga sem campo elétrico. (c) movimento de deriva dos portadores com o campo elétrico aplicado (Extraída da Referência [12]).	9
Figura 2.2: Ilustração do Efeito Hall em semicondutores. A esquerda temos a direção do campo elétrico resultante para um material tipo n e a direita para um material tipo p (Extraída da Referência [13]).	10
Figura 2.3: Ilustração mostrando as posições dos contatos para a medida a partir do efeito Hall. (a) Melhor geometria. (b) Geometria aceitável com contatos nas quinas da amostra quadrada. (c, d) Geometrias não aceitáveis (Extraída da Referência [9]).	12
Figura 2.4: Esquemas dos mecanismos de recombinação SRH. Em (a) e (c) o elétron ou o buraco podem ocupar níveis de energia dentro da gap do semicondutor. Em (b) e (d) a taxa de geração, G , necessária para geração de pares elétrons/buracos, pode ser limitada por estes níveis de energia dentro do gap.	13
Figura 3.1: Ilustração da trajetória de um elétron no cristal.	16
Figura 4.1: Classificação dos mecanismos de espalhamento em semicondutores.	25
Figura 4.2: Taxas de Espalhamento em função da energia do elétron para o GaAs para alguns processos de espalhamento (Extraído da Referência [29]).	25
Figura 4.3: Estrutura de bandas para o GaAs (Extraído da Referência [20]).	26
Figura 4.4: Mapeamento de uma função de probabilidade randômica.	27
Figura 4.5: Fluxograma do Programa Monte Carlo utilizado para a determinação das taxas de espalhamento.	28
Figura 4.6: Ilustração do processo de colisão e deriva dos elétrons em condução submetido a um campo elétrico E num cristal.	29
Figura 4.7: Esquema da Técnica do Gamma Constante. Durante a simulação um número randômico r é escolhido e multiplicado pelo taxa de espalhamento total, Γ . Após isso o programa seleciona entre todos os mecanismos de espalhamento quais taxas representa o produto $r\Gamma$.	32
Figura 4.8: Seleção do Mecanismo de Espalhamento após um tempo tf de percurso do elétron.	33
Figura 4.9: Sistemas de Coordenadas usadas no Método Monte Carlo.	34
Figura 4.10: Aplicação do Ensemble Monte Carlo para um conjunto de partículas. A cada intervalo de tempo Δt é simulado um número N de partículas.	35
Figura 4.11: Princípio do Ensemble Monte Carlo. Em (a) a simulação das N partículas, no espaço do vetor de onda k , sujeito a um campo elétrico na direção positiva do eixo x . Os segmentos escuros são devido ao efeito do campo durante o voo livre. As curvas representam variações descontínuas do vetor de onda devido aos processos de espalhamento. Em (b) o caminho da partícula no espaço real. Ele é composto de	

fragmentos de parábolas que correspondem à cada voo livre na parte (a) da figura. Em (c) a velocidade média da partícula em função do tempo de simulação. Todas as unidades são arbitrárias (Extraído da Referência [30]).	37
Figura 4.12: Velocidade de deriva obtida para o GaAs, pelo método Monte Carlo, para 104 partículas, mantendo o tempo de simulação fixo e para um campo elétrico aplicado de $E = 1,0 \text{ kVcm}$.	37
Figura 4.13: Velocidade de deriva obtida a partir do Método Monte Carlo em função do campo elétrico aplicado.	38
Figura 4.14: Transição Intervalos para o GaAs (Extraído da Referência [29]).	39
Figura 4.15: Velocidade média eletrônica para alguns semicondutores em função do campo elétrico aplicado. (Extraída da Referência [45]).	39
Figura 4.16: Porcentagem de cada mecanismo de espalhamento para o GaAs tipo n a 300 K .	40
Figura 4.17: Valores das taxas de espalhamento calculadas a partir do método Monte Carlo.	40
Figura 4.18: Energia média eletrônica para o GaAs em função do campo elétrico a 77 K .	41
Figura 4.19: Porcentagem de cada Mecanismo de espalhamento a 77 K para o GaAs tipo n .	41
Figura 4.20: Taxas de Espalhamento a 77 K para o GaAs tipo n .	42
Figura 4.21: Energia eletrônica média para o GaAs em função do campo elétrico com um total de $8.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ impurezas.	42
Figura 4.22: Porcentagem de cada mecanismo de espalhamento para o GaAs em função do campo elétrico com um total de $8.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ impurezas.	43
Figura 4.23: Taxas de espalhamento para o GaAs tipo n em função do campo elétrico com um total de $8.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ impurezas.	43
Figura 5.1: Ilustração da geração de correntes induzidas no meio condutor.	46
Figura 5.2: Direção da densidade de corrente induzida sobre uma amostra condutora.	48
Figura 5.3: Sistema de coordenadas cilíndricas.	50
Figura 5.4: Bobina Modelo com núcleo de ar.	52
Figura 5.5: Problema unidimensional de uma interface planar	54
Figura 5.6: Modelo físico tridimensional.	55
Figura 5.7: Modelo físico para camada condutora.	56
Figura 5.8: Modelo físico para duas camadas condutoras.	58
Figura 5.9: Comportamento da densidade de corrente em função da espessura das amostras a de $\text{SnO}_2\text{:F}$ e CIS a uma frequência de 500 KHz .	60
Figura 5.10: Termo oscilante da densidade de corrente em função do tempo para as amostras de dióxido de estanho e CIS em uma frequência de 500 KHz .	60

Figura 5.11: Comportamento da densidade corrente dada pela expressão 5.69 em função da espessura das amostras a uma frequência de 500 KHz.....	61
Figura 5.12: Variação da densidade de corrente em função da frequência para o SnO ₂ :F e CIS nas espessuras de 0,6 μm e 1,2 μm respectivamente.....	61
Figura 5.13: Variação da densidade de corrente em função da profundidade a uma frequência de 10 MHz.	62
Figura 5.14: Comportamento de δ em função da frequência para um semiconductor com baixa condutividade.....	62
Figura 5.15: Variação da fase na densidade de corrente na superfície, J(0), e para uma densidade de corrente a uma profundidade z de 80nm, J(z).....	63
Figura 6.1: Variação do coeficiente Hall com o campo magnético para amostras de Bi:Ga em diferentes temperaturas (Extraída da referência [64]).	69
Figura 6.2: Comportamento do coeficiente Hall com o campo magnético para o germânio obtida a partir da equação 6.1.....	71
Figura 6.3: Equipamento utilizado para as medidas de efeito Hall.	72
Figura 6.4: Esquemática do sistema de aquisição para medidas de mobilidade e condutividade (Extraído da Referência [67]).	73
Figura 6.5: Sistema de Aquisição desenvolvido no Laboratório Hall.....	74
Figura 6.6: Campo Hall, E _y , com o campo elétrico aplicado, E _x	74
Figura 6.7: Campo Hall, E _y , com o campo magnético aplicado, B _z	75
Figura 6.8: Campo Hall após retirada da tensão aplicada.	77
Figura 6.9: Sistema de aquisição para medidas hall em corrente alternada	77
Figura 6.10: Esquema do circuito utilizado para a detecção das correntes de Foucault. Os osciladores das bobinas de referência e de detecção são formados na configuração de um circuito LC.....	78
Figura 6.11: Circuito do oscilador utilizado na detecção das correntes de Foucault. A frequência de operação é determinada pelo circuito LC em série.	79
Figura 6.12: Simulação do circuito oscilante com o programa Electronic WorkBench®	80
Figura 6.13: Soluções do sistema de equações diferenciais realizadas com o programa MathCad®	82
Figura 6.14: Estimativa da corrente induzida na amostra	85
Figura 6.15: Configuração para medida de fotocondutividade.	87
Figura 6.16: Esquema do monocromador em absorção.	87
Figura 6.17: Picoamperímetro utilizado nas medidas de fotocondução.....	88
Figura 6.18: Resposta espectral típica do sensor PbS.	88
Figura 6.19: Resposta espectral da lâmpada H4 obtida com um sensor de PbS.	88

Figura 7.1: Taxas de espalhamento para SnO ₂ :F a 300 K.....	91
Figura 7.2: Taxas de espalhamento para SnO ₂ :F a 77 K.....	91
Figura 7.3: Velocidade de deriva em função do campo elétrico aplicado para o SnO ₂ :F em duas temperaturas.	92
Figura 7.4 Fator Hall para o SnO ₂ :F variando o campo magnético e o campo elétrico a 300 K.	92
Figura 7.5: Variação do Coeficiente Hall com a temperatura, campo elétrico e o campo magnético aplicado para uma amostra de SnO ₂ :F.....	93
Figura 7.6: Resistividade para o SnO ₂ :F em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente. O sinal negativo na resistividade indica que se trata de um material tipo <i>n</i> durante a simulação.....	94
Figura 7.7: Taxas de espalhamento para o CIS à 300 K.....	95
Figura 7.8: Taxas de espalhamento para o CIS à 77 K.....	95
Figura 7.9: Velocidade de deriva para o CIS em função do campo elétrico nas temperaturas de 300 e 77 K.	96
Figura 7.10: Variação do fator Hall com a temperatura e o campo elétrico para o CIS.	97
Figura 7.11: Variação do Coeficiente Hall com a temperatura e o campo elétrico para o CIS. O sinal negativo no coeficiente Hall indica um tipo de portador durante a simulação.	97
Figura 7.12: Resistividade em função do campo elétrico aplicado nas temperaturas de 77 K e 300 K para o CIS tipo <i>n</i>	98
Figura 7.13: Variação do fator Hall com o campo elétrico para o a GaAs a 300 K.....	98
Figura 7.14: Variação do fator Hall com o campo elétrico para o a GaAs a 77 e 300 K.	99
Figura 7.15: Coeficiente Hall em função do campo elétrico aplicado para o a GaAs a 77 K e 300 K.....	99
Figura 7.16: Variação da resistividade com o campo elétrico para o a GaAs a 77 e 300 K.	100
Figura 7.17: Velocidade de deriva em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o CuO e Cu ₂ O.	100
Figura 7.18: Fator Hall em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o CuO e Cu ₂ O.	101
Figura 7.19: Variação do coeficiente Hall em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o CuO e Cu ₂ O.	101
Figura 7.20: Variação da resistividade em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o CuO e Cu ₂ O.	102
Figura 7.21: Mobilidade Elétrica em função do campo elétrico aplicado em 77 K para o InSb (Extraído da Referência [69]).	103

Figura 7.22: Mobilidade Elétrica em função do campo elétrico aplicado em 77 K para o InSb obtida.....	103
Figura 7.23: Coeficiente Hall em função do campo elétrico aplicado a uma temperatura de 77 K para o InSb.....	104
Figura 7.24: Variação da resistividade em função do campo elétrico aplicado à 77 K para o InSb.....	104
Figura 7.25: Velocidade de deriva em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o GaSb.....	105
Figura 7.26: Fator Hall em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o GaSb.	105
Figura 7.27: Coeficiente Hall em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o GaSb.....	106
Figura 7.28: Variação da resistividade em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o GaSb.....	106
Figura 7.29: Variação da condutividade com a temperatura para amostras de SnO ₂ :F em diferentes dopagens.	107
Figura 7.30: Curva IxV com e sem campo magnético aplicado para uma das amostras de SnO ₂ :F a uma temperatura de 40K.	107
Figura 7.31: Curva de Calibração do Eletroímã.	108
Figura 7.32: Variação do Coeficiente Hall com a temperatura para uma das amostras de SnO ₂ :F.	108
Figura 7.33: Variação do Coeficiente Hall com o campo magnético para uma das amostras de SnO ₂ :F.....	109
Figura 7.34: Variação da condutividade com o inverso da temperatura para uma amostra de SnO ₂ :F	109
Figura 7.35: Coeficiente Hall com o inverso da temperatura para uma amostra de SnO ₂ :F.	110
Figura 7.36: Variação do coeficiente Hall e da condutividade com o inverso da temperatura para uma amostra de SnO ₂ :F com diferente dopagem.	110
Figura 7.37: Espectros FFT dos dois osciladores (não dá para perceber diferença de frequência).....	112
Figura 7.38: Espectros FFT dos batimentos, (1) sem amostra (120 Hz), (2) com filme de SnO ₂ afastado de 1,2 mm da bobina (265 Hz) e (3) com filme de SnO ₂ tocando a bobina (334 Hz). Observação: Cada espectro apresenta a mesma linha em 60 Hz, devido à rede elétrica.	112
Figura 7.39: Indicação da energia do gap do silício nas amostras pelas medidas de fotocondução.	114
Figura 7.40: Ampliação da região do Gap para as amostras de Si:Bi em temperatura ambiente.	115

Figura 7.41: Determinação da energia limiar para transição indireta.....	115
Figura 7.42: Comportamento da fotocondução com o aumento da concentração de dopante.	116
Figura 7.43: Comportamento anômalo das amostras 74 e 32.	116
Figura 7.44: Outra maneira de apresentar o conjunto de espectros de fotocondutividade.	117
Figura 7.45: Espectro EDS para a amostra 32.....	118
Figura 7.46: Espectro EDS para a amostra 74.....	118
Figura 7.47: Espectro de EDS para a amostra A2D.	118
Figura 7.48: Espectro de EDS para a amostra 92.	119
Figura 7.49: Espectro Raman para as amostras 74 e 32.	119
Figura 7.50 : Dimensões das amostras estudadas.....	120
Figura 7.51: Amplitude da fotocorrente em função da energia do fóton incidente variando a temperatura para a amostra 03.	121
Figura 7.52: Variação da fase em função da energia do fóton incidente variando a temperatura para a amostra 03.....	121
Figura 7.53: Região ampliada mostrando a variação da fase para a amostra 03.	122
Figura 7.54: Variação da fase com a temperatura para a amostra 03.....	122
Figura 7.55: Variação da corrente no escuro com a temperatura para a amostra 03....	123
Figura 7.56: Amplitude da fotocorrente em função da energia do fóton incidente variando a temperatura para a amostra 52.	123
Figura 7.57: Variação da fase em função da energia do fóton incidente variando a temperatura para a amostra 52.....	124
Figura 7.58: Variação da corrente no escuro com a temperatura para a amostra 52....	124
Figura 7.59: Variação da fotocorrente com a temperatura e energia para a amostra 52.	125
Figura 7.60: Variação da fotocorrente com a temperatura e energia do fóton para a amostra 14.	125
Figura 7.61: Variação da fase com a temperatura e energia do fóton para a amostra 14.	126
Figura 7.62: Variação da fase com a temperatura e energia do fóton para a amostra 14 nas temperaturas entre 100 e 160 K.....	126
Figura 7.63: Variação da corrente no escuro com a temperatura para a amostra 14....	127
Figura 7.64: Comportamento da fotocorrente com a temperatura e energia do fóton para a amostra 34.....	127
Figura 7.65: Comportamento da fase com a temperatura e energia do fóton para a amostra 34.	128

Figura 7.66: Comportamento da fotocorrente com a temperatura (entre 40 e 100 K) e energia do fóton para a amostra 34.....	128
Figura 7.67: Comportamento da fotocorrente com a temperatura (entre 160 e 320 K) e energia do fóton para a amostra 34.....	129
Figura 7.68: Comportamento da fase com a temperatura (entre 160 e 320 K) e energia do fóton para a amostra 34.	129
Figura 7.69: Variação da corrente no escuro com a temperatura para a amostra 14....	130
Figura 7.70: Comportamento da fotocorrente com a temperatura e energia do fóton para a amostra 61.....	130
Figura 7.71: Comportamento da fase com a temperatura e energia do fóton para a amostra 34.	131
Figura 7.72: Variação da corrente no escuro com a temperatura para a amostra 14....	131
Figura 7.73: Comportamento da fotocorrente com a temperatura e energia do fóton para a amostra A2D.	132
Figura 7.74: Comportamento da fotocorrente nas temperaturas de 300 e 260 K em função da energia do fóton para a amostra A2D.	132
Figura 7.75: Comportamento da fase com a temperatura (entre 40 e 160 K) e energia do fóton para a amostra A2D.....	133
Figura 7.76: Comportamento da fase com a temperatura (entre 190 e 320 K) e energia do fóton para a amostra A2D.....	133
Figura 7.77: Comportamento da fotocorrente e da fase em temperatura ambiente para diferentes energias em função da concentração de impurezas.	134
Figura 7.78: Fluxo luminoso incidente sobre a amostra expresso como uma função gaussiana.....	136
Figura 7.79: Variação da mobilidade obtida a partir da equação 7.23.	139
Figura 7.80: Cálculo da mobilidade média dos elétrons em função da temperatura obtida a partir da Equação 7.23.	140
Figura 7.81: Mobilidade em baixo campo dos elétrons no silício em função da temperatura (Extraído da Referência [29])......	140
Figura 7.82: Variação dos portadores fotoexcitados obtidos a partir da equação 7.24.	141
Figura 7.83: Variação da oncentração dos portadores fotoexcitados em função da temperatura nos picos de 1,7 eV e 1,02 eV.....	141
Figura 7.84: Coeficiente de absorção para a amostra 03, obtido a partir da equação 7.25.	142
Figura 7.85: Variação do coeficiente de absorção com a temperatura para a amostra 03, obtido a partir da equação 7.25.....	142
Figura 7.86: Variação da mobilidade obtida em função da energia do fóton incidente para a amostra 52.....	143

Figura 7.87: Variação da mobilidade a 100 K obtida em função da energia do fóton incidente para a amostra 52.	143
Figura 7.88: Variação de nhv em função da energia do fóton incidente para a amostra 52.	144
Figura 7.89: Variação de nhv em função da energia do fóton incidente para a amostra 52 nas temperaturas de 300 e 320 K.....	145
Figura 7.90: Variação do coeficiente de absorção em função da energia do fóton incidente para a amostra 52 em diferentes temperaturas.....	145
Figura 7.91: Variação do coeficiente de absorção em função da energia do fóton incidente para a amostra 52 para as temperaturas de 300 e 320 K.....	146
Figura 7.92: Comparação dos coeficientes de absorção para as amostra 03 e 52 a temperatura ambiente.	146
Figura 7.93: Variação da mobilidade com a energia do fóton incidente nas temperaturas de 220 a 320 K.....	147
Figura 7.94: Variação da mobilidade com a energia do fóton incidente na temperatura entre 70 e 190 K.	148
Figura 7.95: Variação da concentração com a energia do fóton incidente na temperatura entre 130 e 320 K.	148
Figura 7.96: Variação da concentração com a energia do fóton incidente na temperatura entre 40 e 100 K.	149
Figura 7.97: Variação do coeficiente de absorção com a energia do fóton incidente na temperatura entre 40 e 160 K.	150
Figura 7.98: Variação do coeficiente de absorção com a energia do fóton incidente na temperatura entre 260 e 320 K para a amostra 14.	151
Figura 7.99: Variação mobilidade com a energia do fóton incidente na temperatura entre 40 e 320 K para a amostra 34.	152
Figura 7.100: Variação mobilidade com a energia do fóton incidente em 100 K para a amostra 34.	152
Figura 7.101: Variação concentração de buracos fotogerados com a energia do fóton incidente em 100 K para a amostra 34.	153
Figura 7.102: Variação concentração de buracos fotogerados com a energia do fóton incidente em diferentes temperaturas para a amostra 34.....	153
Figura 7.103: Variação do coeficiente de absorção com a energia do fóton incidente em diferentes temperaturas para a amostra 34.	154
Figura 7.104: Variação da mobilidade em função da energia do fóton incidente em diferentes temperaturas para a amostra 61.	154
Figura 7.105: Variação da concentração em função da energia do fóton incidente em diferentes temperaturas para a amostra 61.	155

Figura 7.106: Variação da concentração em função da energia do fóton incidente em temperatura ambiente para a amostra 61.	155
Figura 7.107: Variação do coeficiente de absorção em função da energia do fóton incidente em diferentes temperaturas para a amostra 61.	156
Figura 7.108: Variação do coeficiente de absorção em função da energia do fóton incidente temperatura ambiente para a amostra 61.	156
Figura 7.109: Variação da mobilidade em função da energia do fóton incidente e da temperatura para a amostra A2D.	156
Figura 7.110: Variação da mobilidade em função da energia do fóton incidente a 130 K para a amostra A2D.	157
Figura 7.111: Variação da concentração em função da energia do fóton incidente na temperatura entre 190 e 320 K para a amostra A2D.	157
Figura 7.112: Variação da concentração em função da energia do fóton incidente na temperatura entre 40 e 160 K para a amostra A2D.	158
Figura 7.113: Variação do coeficiente de absorção em função da energia do fóton incidente em diferentes temperaturas para a amostra A2D.	158
Figura 7.114: Variação do coeficiente de absorção em função da energia do fóton incidente nas temperaturas de 260 e 300 K para a amostra A2D.	158

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1: Parâmetros físicos utilizados na simulação teste.....	38
Tabela 5.1: Valores de ϵ/σ para alguns semicondutores (valores intrínsecos e a 300K). 64	
Tabela 6.1: Valores de γ_0 para alguns semicondutores em temperatura ambiente.....	70
Tabela 6.2: Lista dos componentes utilizados no circuito de detecção	79
Tabela 7.1: Parâmetros utilizados no Método Monte Carlo para as amostras estudadas [70].	90
Tabela 7.2: Condutividade dos materiais estudados no laboratório	111
Tabela 7.3: Variação de frequência do oscilador prevista pelo modelo e o valor medido	111
Tabela 7.4: Características elétricas das amostras estudadas (Extraído da Referência [68])	114
Tabela 7.5 : Características das amostras utilizadas para medida de fotocondutividade	119

LISTA DE FIGURAS.....	i
LISTA DE TABELAS.....	xiv

INDÍCE

1. INTRODUÇÃO	1
2. FORMALISMO GERAL DE TRANSPORTE.....	5
2.1 CORRENTE DE CONDUÇÃO	5
2.2 CORRENTE DE DIFUSÃO	6
2.3 EXPERIMENTO HAYNES-SHOCKLEY.....	7
2.4 EFEITO HALL	10
2.5 FOTOCONDUÇÃO	12
3. EFEITO MAGNETORESISTIVO	16
3.1 A EQUAÇÃO DE BOLTZMANN.....	16
3.2 TEORIA DE TRANSPORTE SEMI-CLÁSSICO	18
4. SIMULAÇÃO MONTE CARLO PARA DINÂMICA ELETRÔNICA EM SEMICONDUTORES.....	24
4.1 TAXAS DE ESPALHAMENTO	24
4.2 RELAÇÃO ENERGIA-VETOR DE ONDA.....	26
4.3 O MÉTODO MONTE CARLO	27
4.4 APLICAÇÃO DO MÉTODO MONTE CARLO.....	36
5. CORRENTES DE FOUCAULT.....	45
5.1 TEORIA CLÁSSICA	45
5.2 CORRENTES DE FOUCAULT NA MATÉRIA	47
5.3 POTENCIAL VETOR NO ESPAÇO LIVRE	49
5.4 INTERFACES PLANARES	54
5.5 APLICAÇÕES EM SEMICONDUTORES DE FILMES FINOS.....	59
5.6 INJEÇÃO DE PORTADORES E CORRENTES INDUZIDAS	64
5.7 DESCRIÇÃO SEMI-CLÁSSICA DAS CORRENTES DE FOUCAULT EM SEMICONDUTORES	67
6. MONTAGEM EXPERIMENTAL.....	69
6.1 MÉTODO MONTE CARLO.....	69
6.2 MEDIDAS DE EFEITO HALL.....	72
6.3 DETECÇÃO DAS CORRENTES DE FOUCAULT.....	78
6.4 MEDIDAS DE FOTOCONDUÇÃO.....	86
7. RESULTADOS	89
7.1 RESULTADOS DA SIMULAÇÃO MONTE CARLO	89
7.2 RESULTADOS EXPERIMENTAIS DO COEFICIENTE HALL.....	107
7.3 RESULTADOS EXPERIMENTAIS DAS CORRENTES DE FOUCAULT	110
7.4 RESULTADOS EXPERIMENTAIS DE FOTOCONDUÇÃO	113
8. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS.....	159
9. ANEXO	163
9.1 SIMULAÇÃO MONTE CARLO PARA A AMOSTRA DE GAAS.....	163
10. REFERÊNCIAS	181

1. Introdução

Atualmente o Grupo de Física Básica – GFBA vem desenvolvendo trabalhos em semicondutores e óxidos semicondutores, com objetivo no desenvolvimento de sensores, células fotovoltaicas e emissores de luz. Esses dispositivos podem ser feitos com filmes finos de diversos materiais como $\text{SnO}_2\text{:F}$, CIS, etc., depositados em substrato de vidro, de silício, etc. A caracterização elétrica desses materiais em função da temperatura, da espessura, do método de fabricação e da estrutura dos filmes é de fundamental importância para os conhecimentos necessários à sua construção. Essa caracterização coloca o problema da medida de condutividade e da concentração de portadores em condições difíceis (materiais em filmes finos em vez de bulk, com contatos elétricos não soldados, etc.).

Os semicondutores e óxidos semicondutores em filmes finos são materiais promissores para o desenvolvimento de dispositivos, alguns exemplos são o SnO_2 objeto de diversos artigos publicados [1] [2] e que é um material utilizado na fabricação de células fotovoltaicas; o TiO_2 com aplicações em fotocatalise [3] [4], biosensores [5] [6]; o CIS [7] que já está sendo produzido no Laboratório de Propriedades Óticas - LAPO; entre outros. Então, para um conhecimento completo destes materiais exige além de medidas óticas, de resultados experimentais das grandezas elétricas para uma análise em suas diversas aplicações.

O principal objetivo desta tese foi determinar a concentração e a mobilidade de portadores em semicondutores e óxidos semicondutores depositados em filmes finos. Mais especificamente, pretendemos obter um modelamento teórico da concentração de portadores e da mobilidade em materiais como CIS, InSb, SnO_2 , TiO_2 ou ainda CuO, além do estudo/procura de métodos de medida sem contato da concentração e mobilidade de portadores nestes materiais depositados em filmes. Para isso, é necessária uma modelização detalhada do método escolhido (medida da variação de impedância em função de correntes de Foucault, por exemplo) juntamente com a realização da montagem e testes em amostras conhecidas e aplicação do método aos materiais escolhidos.

Em um trabalho anterior (Mestrado) [8], utilizamos métodos clássicos como Van der Pauw [9] e quatro pontas [10], mas esses métodos se revelaram de uso difícil nos novos casos estudados como o CIS depositado no $\text{SnO}_2\text{:F}$. Daí surgiu a necessidade de um trabalho experimental em que o método das correntes de Foucault [11], um método sem contato, cuja sensibilidade e a profundidade dependem da frequência, aparece como uma solução interessante para a medida de condutividade. Em todo caso, o desenvolvimento experimental será acompanhado por modelizações teóricas: (a) do método (excitação e a resposta do sistema), (b) da condutividade e da concentração de portadores nos filmes e (c) de simulações computacionais utilizando o método Monte Carlo [12].

Para filmes/materiais, existem dois métodos de medida de condutividade mais comumente utilizados: O método de 4 pontas e o método de Van der Pauw. O primeiro desenvolvido inicialmente para medir a resistividade de materiais cristalinos, consiste em quatro contatos espaçados igualmente e alinhados entre si, no qual se faz atravessar uma corrente pelos contatos externos e mede-se a tensão nos dois internos. Este método pode

ser aplicado em filmes finos depositados em diferentes substratos (condutores ou não), mas com a introdução de diversos fatores de erro que serão primordiais no valor da condutividade [13]. Estes fatores são calculados levando em conta a espessura da amostra, a forma, o substrato, o espaçamento dos contatos etc.

O segundo método é interessante em relação ao de 4 pontas pela possibilidade de poder realizar medidas de efeito Hall na mesma configuração dos contatos, isto faz com que podemos ter uma automação no sistema de medida, obtendo além da resistividade, a mobilidade a partir das medidas de Efeito Hall. Atualmente, este método já está sendo utilizado no Laboratório Hall, onde já é possível medir a condutividade dos materiais em função da temperatura [8] apenas adequamos a instrumentação para medida da mobilidade e concentração de portadores a partir do efeito Hall. A desvantagem consiste em requerer a solda dos contatos pois em alguns tipos de óxidos semicondutores, não é possível efetuar uma solda de qualidade.

Um terceiro método conhecido como método do eletrômetro [14] é utilizado quando o material em análise possui resistência elétrica elevada, o que não é o caso dos semicondutores estudados aqui. Assim, tendo em vista a dificuldade na aplicação destes, torna-se importante o desenvolvimento de novos métodos de medida que não utilizem contatos, como pelo método das correntes de Foucault ou correntes Eddy, que apesar de ser um efeito conhecido e fonte de diversos artigos publicados [15] [16] ainda não foi utilizado para medida da condutividade em semicondutores multicamadas.

A medida da mobilidade a partir do efeito Hall consiste em medir a tensão transversa gerada por um fluxo de corrente quando a amostra está imersa num campo magnético uniforme e perpendicular à corrente [17]. Este tipo de medida torna-se inadequado para materiais com baixa mobilidade, pois a tensão transversa gerada, tensão Hall, é muito pequena e em uma curva $I \times V$, a mobilidade não pode ser medida, porque em regimes ôhmicos, a corrente depende do produto da densidade de carga e da mobilidade. E uma determinação independente é impossível. Por isto, existem diferentes métodos para encontrar a mobilidade [18], dentre eles podemos citar o regime de corrente limitada ao espaço-carga, que depende apenas da mobilidade, a técnica de transistor de efeito de campo, estrutura metal-isolante-semicondutor que usa técnicas de espectroscopia de impedância, etc.

O principal modelo teórico existente para tratar fenômenos de transporte é o modelo de Boltzmann, que é uma teoria semi-clássica [19]. Ela torna-se útil na teoria de transporte porque introduz conceitos como distribuição de Fermi, nível de Fermi e tempo de espalhamento, que são parâmetros responsáveis pela condução elétrica em semicondutores.

Para encontrar a solução da Equação de Boltzmann pode ser utilizada a simulação Monte Carlo, que é um método numérico estatístico utilizado para resolver problemas matemáticos [20]. Dentre eles, a simulação de transporte em semicondutores. Este método é utilizado numa variedade de campos para resolver problemas que vão desde a resolução de integrais, análise em processos da física estatística e mecânica quântica e é válida em diversos tipos de materiais que vão desde filmes-finos, poços quânticos, transporte de spin-polarizado, entre outros.

Com a simulação Monte Carlo obtemos os valores da taxa de espalhamento, onde, para a aplicação do método, precisamos conhecer algumas propriedades intrínsecas dos materiais, tais como potenciais de deformação, função dielétrica, constante de rede, massa efetiva, energia dos fônons, etc., dos materiais estudados. Estes parâmetros foram estimados experimentalmente, obtidos a partir de outros autores ou a partir de simulações/cálculos de programas específicos, como DFT. Além disso, com um aprofundamento na solução da equação de Boltzmann, pudemos determinar também o comportamento do coeficiente Hall em função do campo elétrico aplicado, da temperatura e da intensidade do campo magnético utilizado. O método Monte Carlo, por ser um método estatístico, exige um número grande de partículas (de 10000 a 100000 partículas) para obter um resultado confiável e isto requer um gasto computacional intenso, o que não pode ser realizado em qualquer máquinas, assim o uso de um cluster de computadores é essencial para efetuar os cálculos contidos neste método.

Experimentalmente, as medidas de condutividade, efeito Hall e fotocondução em função da temperatura foram realizadas com um eletroímã refrigerado a água que pode atingir um campo magnético de até 1.2 T, a tensão Hall foi medida com um multímetro digital de alto desempenho com 6½ dígitos da Keithley Instruments modelo 2000, e a fonte de corrente utilizada foi o da Keithley modelo 2420 que tem a capacidade de poder funcionar como fonte de tensão e realizar medidas de tensão, corrente e resistência. Para as medidas de condutividade será utilizado o método de Van der Pauw, visto que já está em operação no Laboratório Hall. As duas medidas serão unificadas e automatizadas de forma a minimizar o uso do criostato que é o equipamento responsável em reduzir a temperatura do sistema, podendo atingir temperaturas de até 12 K e aumentá-la gradualmente até acima da temperatura ambiente. Desta maneira podemos obter o comportamento da condutividade e mobilidade com a temperatura que é importante para a compreensão dos fenômenos físicos que determinam as características elétricas do semicondutor.

O principal resultado desta pesquisa é o desenvolvimento de um método completo de medidas de condutividade e de mobilidade em função da temperatura, tendo como consequência a produção de artigos experimentais no CIS, SnO₂, entre outros, que são produzidos a partir de substratos semicondutores, contendo uma modelização teórica das grandezas elétricas, resultados experimentais e de simulações computacionais, confrontando assim a teoria e a experiência. Como consequência, iremos mostrar que os métodos de medida existentes destas propriedades não puderam ser aplicados a estes materiais devido as limitações teóricas e por isso surgiu a necessidade do desenvolvimento de novos métodos que abrangem esta nova configuração.

A teoria dos experimentos mencionados aqui será apresentada separadamente para facilitar a compreensão dos fenômenos físicos e entender seus pontos fortes e fracos. No capítulo 2 faremos a revisão clássica do transporte de carga dos semicondutores e seus principais métodos de medidas elétricas. No capítulo 3 apresentamos uma descrição semi-clássica do fenômeno de transporte onde veremos que a explicação do efeito Hall deverá ser feita de uma forma mais exata, a partir da equação de transporte de Boltzmann.

No capítulo 4 faremos uma descrição do método Monte Carlo, sua implementação e uma aplicação que funcionará como teste da rotina. No capítulo seguinte temos a

descrição das correntes de Foucault aplicada a materiais multicamadas e no capítulo 6 as modificações sugeridas em cada uma das teorias apresentadas anteriormente. No capítulo 7 apresentamos os resultados obtidos a partir das modificações feitas com uma abordagem teórica de modificação nas medidas de fotocondução. Nos capítulos 8 e 9 apresentamos as conclusões obtidas e as referências utilizadas respectivamente.

2. *Formalismo Geral de Transporte*

O transporte de carga nos semicondutores é baseado na dinâmica dos portadores de carga elétrica, que são os elétrons e os buracos. Este transporte de cargas gera uma corrente elétrica, cujo principal processo na geração da corrente é o movimento coletivo destes portadores. Existem dois tipos básicos de movimento coletivo dos portadores: o movimento de deriva sob um campo elétrico aplicado e a difusão de cargas devido a um gradiente espacial na concentração destes. Estes dois processos são responsáveis pelas medidas de mobilidade a partir do efeito hall [21], nas medidas de fotocondução [22], no experimento de ponta quente [23] para determinação do tipo de portador ou na medida do tempo de voo no experimento de Haynes-Schokley [24].

Cada técnica apresenta características próprias devido ao método utilizado na interação com os portadores de carga, o que produz resultados que geram valores um pouco diferentes entre si, quando se tenta mensurar a mesma grandeza. O ponto em comum entre elas é a necessidade de contatos elétricos para a realização da leitura da corrente, e isto requer um tratamento de limpeza que geralmente são processos químicos no qual corroem a superfície da amostra, a deposição de materiais metálicos que propiciem um contato ôhmico e soldas especiais. Existem outros métodos que não utilizam contatos mas limitam-se na faixa de operação, ou no tipo de grandeza que se deseja medir, ou na estrutura física do semicondutor, além de determinar apenas um tipo de grandeza física. Neste capítulo iremos abordar as teorias básicas destes fenômenos de transporte e identificar as diferentes abordagens sobre os processos que envolvem cada método de medição das propriedades elétricas em semicondutores.

2.1 *Corrente de Condução*

A corrente de condução, ou deriva, é originada do lento deslocamento dos portadores de carga produzido por um campo elétrico externo, simultâneo com o movimento rápido e aleatório das partículas devido à agitação térmica. Esta corrente nos semicondutores é formada tanto por elétrons quanto por buracos, diferentemente dos metais onde é exclusivamente formada por elétrons. A densidade de corrente de elétrons, \vec{J}_n , é relacionada com o campo elétrico pela lei de Ohm

$$\vec{J}_n = \sigma_n \vec{E} \quad (2.1)$$

onde σ_n é a condutividade devida aos elétrons. Uma expressão similar é encontrada para os buracos, mas com uma condutividade diferente.

Como a condutividade resulta do movimento médio do conjunto de portadores, é útil definir uma nova grandeza que descreva a facilidade com a qual cada elétron se desloca no material sob a ação do campo externo. Esta grandeza é a mobilidade e podemos relacioná-la com a condutividade por [25]:

$$\sigma_n = en_0\mu_n \quad (2.2)$$

com n_0 a concentração de elétrons no equilíbrio e μ_n a mobilidade destes elétrons que é dada por:

$$\mu_n = \frac{e\tau_e}{m_e^*} \quad (2.3)$$

onde e e m_e^* são a carga e a massa efetiva do elétron respectivamente e τ_e o tempo de relaxação, que pode ser definido como sendo o tempo médio em que a partícula percorre sem ser espalhada. A densidade de corrente total no semiconductor será formada pela soma das condutividades dos elétrons e buracos, ou seja,

$$\vec{J} = (\sigma_p + \sigma_n)\vec{E} \quad (2.4)$$

logo

$$\vec{J} = e(p_0\mu_p + n_0\mu_n)\vec{E} \quad (2.5)$$

dessa forma a corrente elétrica passa a depender das concentrações no equilíbrio (p_0 e n_0) e das mobilidades de cada tipo de portador de carga. Caso estas concentrações estejam fora do equilíbrio em determinado ponto do semiconductor teremos um termo de difusão adicionado na corrente gerada conhecida como corrente de difusão que apresentaremos a seguir.

2.2 Corrente de Difusão

O processo de difusão ocorre em diversas situações na física, como exemplo podemos citar que, é através dele que uma gota de tinta vermelha colocada num copo de água espalha-se neste, deixando a água uniformemente avermelhada. Ou então a propagação do cheiro de um perfume pelo ar quando abrimos o seu recipiente. A difusão ocorre devido ao movimento browniano das partículas, observada pelo botânico inglês Robert Brown em 1827, mas a primeira teoria quantitativa deste movimento foi proposta por Einstein em 1905 [26].

O deslocamento de uma partícula no movimento browniano pode ser escrito como uma relação entre o deslocamento quadrático médio em uma direção e o tempo de observação [27]

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt \quad (2.6)$$

onde a constante de proporcionalidade D definida desta forma chama-se o *coeficiente de difusão*. Na existência de isotropia espacial este valor deverá ser multiplicado por 3. O coeficiente de difusão por sua vez está relacionado com a temperatura e o coeficiente de atrito do meio por:

$$D = \frac{k_B T}{\gamma} \quad (2.7)$$

que é conhecida como Relação de Einstein para o coeficiente de difusão do movimento browniano. Em 1909 Jean Perrin comprovou esta relação e verificou que D independe da massa da partícula.

Nos semicondutores o movimento de difusão dos portadores ocorre quando existe uma diferença na concentração de portadores em determinada região do espaço. Esta variação pode ser originada do processo de recombinação ou criação de pares elétron-buraco, e estes por sua vez podem ser estimulados por campos externos. O movimento de difusão também ocorre devido ao movimento browniano dos portadores de carga no sentido da região de maior concentração para o de menor concentração [28].

É possível mostrar que a densidade de corrente devido a este movimento de difusão em uma dimensão será:

$$J = eD_n \frac{dn(x, t)}{dx} - eD_p \frac{dp(x, t)}{dx} \quad (2.8)$$

onde $n(x, t)$ e $p(x, t)$ são as concentrações de elétrons e buracos respectivamente em certo instante de tempo e em certo ponto. Assim, para semicondutores, o coeficiente de difusão pode ser escrito como:

$$D = \frac{l^2}{\tau_e} \quad (2.9)$$

com l sendo o livre caminho. Assim, podemos escrever a relação de Einstein para semicondutores não degenerados como sendo [29]:

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{k_B T}{e} \quad (2.10)$$

Esta última relação, após substituir as expressões para o coeficiente de difusão e a mobilidade, indica que a energia térmica fornece o trabalho necessário para deslocar uma partícula de um ponto a outro antes de ser espalhada.

2.3 Experimento Haynes-Shockley

A teoria descrita até agora trata a corrente elétrica gerada a partir de um campo elétrico aplicado ou de uma diferença na concentração de portadores devido à fatores externos. Esta diferença ocorre quando portadores em excesso são introduzidos em uma região do semicondutor por um mecanismo externo qualquer. Neste processo o mecanismo de recombinação deve ser levado em conta, pois ele é um dos responsáveis para levar a concentração ao estado de equilíbrio [19]. Para entendermos este processo vamos considerar que buracos são injetados em um semicondutor de tal forma que sua concentração variará em certo instante por

$$p(\vec{r}, t) = p_0 + \delta p(\vec{r}, t) \quad (2.11)$$

com $\delta p(\vec{r}, t)$ o acréscimo na concentração dos buracos. Assim, a variação temporal se dará da seguinte forma:

$$\frac{dp(\vec{r}, t)}{dt} = \frac{\partial \delta p}{\partial t} + \nabla \delta p \cdot \vec{v} \quad (2.12)$$

onde consideramos uma uniformidade temporal e espacial na concentração inicial.

Para continuarmos, precisamos resolver a equação de difusão dos portadores de carga (equação 2.8) para um tipo de portador. Para isto, calculamos o divergente da densidade de corrente e substituindo pela equação da continuidade, $\nabla \cdot \vec{J} = -\partial \rho / \partial t$, (lembrando que a densidade de cargas ρ é igual a $e(p - n)$, onde e é a carga do portador) teremos:

$$\frac{dp(\vec{r}, t)}{dt} = D_p \nabla^2 p(\vec{r}, t) \quad (2.13)$$

Substituindo temos,

$$\frac{\partial \delta p}{\partial t} = D_p \nabla^2 \delta p - \nabla \delta p \cdot \vec{v} \quad (2.14)$$

O primeiro termo do lado direito representa o processo de difusão dos portadores e o segundo termo, em primeira aproximação, pode ser descrito como um processo de recombinação dos portadores, onde podemos defini-lo como sendo:

$$\nabla \delta p \cdot \vec{v} = \frac{\delta p}{\tau_p} \quad (2.15)$$

com τ_p o tempo de recombinação dos buracos. Se a injeção ocorrer em todo semiconductor durante um instante de tempo, a evolução da concentração será:

$$\frac{\partial \delta p}{\partial t} = -\frac{\delta p}{\tau_p} \quad (2.16)$$

cuja solução será $\delta p = A e^{-\frac{t}{\tau_p}}$ onde A é o valor de δp em $t = 0$.

Quando a injeção dos portadores é realizada em um regime estacionário, como por exemplo, quando um feixe de luz incide sobre uma região do semiconductor, os fótons produzem pares elétron-buraco na região iluminada que, após certo tempo, a taxa de criação de pares torna-se constante, ocorrendo assim à difusão para a região não iluminada. Assim podemos escrever:

$$\nabla^2 \delta p = \frac{\delta p}{L_p^2} \quad (2.17)$$

onde $L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$ é o *comprimento de difusão*. Expressões similares podem ser encontradas para os elétrons. A solução geral desta equação diferencial de segunda ordem em uma dimensão é:

$$\delta p(x) = A_1 e^{x/L_p} + A_2 e^{-x/L_p} \quad (2.18)$$

Usando a condição em que $\delta p(x=0) = \delta p$ e $\delta p(x=L) = 0$ podemos determinar os coeficientes A_1 e A_2 , assim o excesso de concentração dos portadores será:

$$\delta p(x) = \frac{\delta p(0) \sinh\left(\frac{L-x}{L_p}\right) + \delta p(L) \sinh\left(\frac{x}{L_p}\right)}{\sinh\left(\frac{L}{L_p}\right)} \quad (2.19)$$

O experimento de Haynes-Shockley ilustrado na Figura 2.1a, ilustra como determinar a mobilidade de deriva dos portadores [30]. Aqui, portadores de carga são injetados em $t = 0$ em determinada região do semiconductor, em $x = 0$. Após a retirada do pulso a evolução da concentração se dará no tempo a partir de $\delta p = Ae^{-\frac{x}{L_p}}$ (figura 2.1b), ou determinando a constante A teremos:

$$p(x, t) = \frac{N_0}{\sqrt{4\pi D_p t}} e^{-\frac{x^2}{4D_p t} - \frac{x}{L_p}} + p_0 \quad (2.20)$$

onde N_0 é o número de buracos gerados por unidade de área.

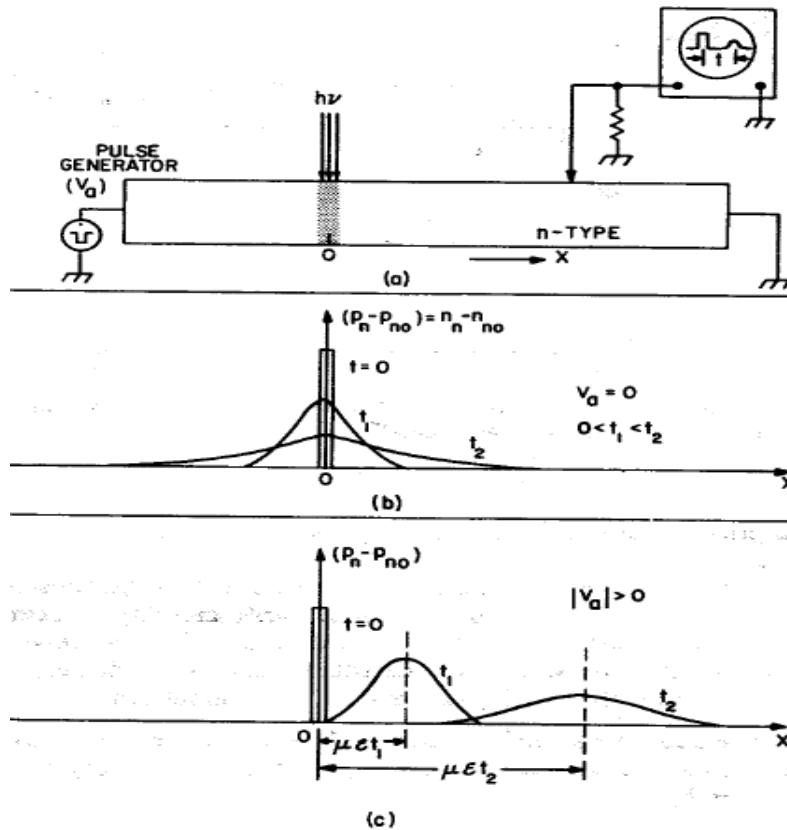


Figura 2.1: Experimento de Haynes-Shockley. (a) Montagem experimental. (b) evolução dos portadores de carga sem campo elétrico. (c) movimento de deriva dos portadores com o campo elétrico aplicado (Extraída da Referência [30]).

Aplicando um campo elétrico ao longo da amostra a solução será da mesma forma, mas com a substituição de x por $x - \mu_p E t$, desta forma ocorre uma movimentação do

“pacote” de portadores (figura 2.1c). A mobilidade é determinada conhecendo o comprimento da amostra, o campo elétrico aplicado pelo gerador de pulso e o retardo no tempo entre o pulso aplicado e o detectado, que é medido por um osciloscópio, logo, $\mu_p = x/Et$. Quando consideramos que a injeção dos portadores p_1 em $x = 0$ não influencia na extremidade oposta do semiconductor a concentração de portadores tenderá a concentração de equilíbrio p_0 depois de certo tempo t , neste caso podemos idealizar o semiconductor como de comprimento infinito. Quando isto não é possível, no limite do semiconductor, digamos $x = d$, a concentração p_2 terá um valor diferente da concentração em equilíbrio que pode acarretar numa diferença no valor da mobilidade.

2.4 Efeito Hall

Para compreendermos o surgimento da tensão Hall, vamos considerar uma amostra infinitamente longa sem variação da concentração de portadores, imersa num campo magnético constante e uniforme. Quando injetamos uma corrente elétrica perpendicular à direção do campo, a força que o elétron experimentará será dada pela força de Lorentz.

$$\vec{F} = -e(\vec{v} \times \vec{B}) \quad (2.21)$$

onde podemos escrever $\vec{v} = \frac{\vec{J}}{-en}$ como sendo a velocidade de deriva dos portadores de carga.

Se a corrente for injetada na direção x e o campo magnético na direção z a força de Lorentz pode ser escrita como:

$$F_y = -\frac{J_x B_z}{n} \quad (2.22)$$

Assim o elétron será forçado a mover-se na direção y , surgindo um acúmulo de cargas na extremidade da amostra.

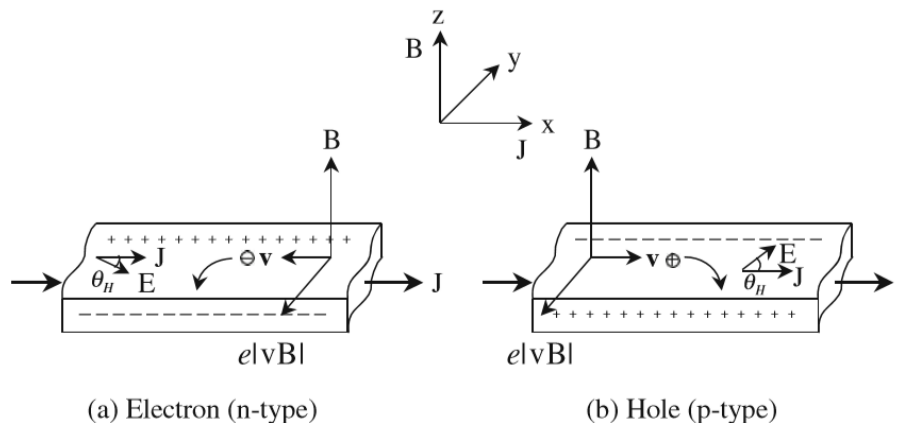


Figura 2.2: Ilustração do Efeito Hall em semicondutores. A esquerda temos a direção do campo elétrico resultante para um material tipo n e a direita para um material tipo p (Extraída da Referência [31]).

Este acúmulo de cargas por sua vez gera um campo elétrico transversal E_y . Quando este campo se balanceia com a força de Lorentz, o estado estacionário é induzido resultando em;

$$F_y - eE_y = 0 \quad (2.23)$$

E este campo elétrico é denominado de campo Hall. Organizando encontramos:

$$E_y = -\frac{J_x B_z}{ne} \equiv R_H J_x B_z \quad (2.24)$$

onde $R_H = -1/ne$ é denominado de coeficiente Hall. Considerando que a densidade de corrente na direção x , J_x , é devido ao campo elétrico aplicado nesta direção, E_x , ou seja, $J_x = ne\mu_n E_x$, podemos definir o ângulo Hall como sendo o ângulo do campo elétrico resultante entre o campo E_x e o campo Hall:

$$\theta_H = \text{atan}\left(\frac{E_y}{E_x}\right) = \text{atan}(-\mu_n B_z) \quad (2.25)$$

Nesta última equação, substituindo a expressão para a mobilidade, vemos que o ângulo Hall dependerá diretamente do tempo de relaxação, da intensidade do campo magnético aplicado e da massa efetiva dos portadores. Além disso, podemos demonstrar que o coeficiente Hall pode ser encontrado medindo a tensão Hall, conhecendo a espessura da amostra, d , na direção do campo magnético, juntamente com a intensidade da corrente injetada [31], ou resumidamente,

$$R_H = -\frac{V_H d}{I_x B_z} \quad (2.26)$$

Uma limitação neste método é que a amostra tenha uma forma retangular. Para o caso de amostras de filmes finos, Van der Pauw demonstrou que o coeficiente Hall pode ser calculado a partir da expressão [32]:

$$R_H = \frac{[V_{12}(B) - V_{12}(-B)]d}{2I_{34}B} \quad (2.27)$$

Sendo V_{12} a tensão medida em dois sentidos do campo magnético nos terminais 1 e 2 e I_{34} a corrente no sentido do terminal 3 para o terminal 4 (Figura 2.3b). A melhor geometria da amostra para este método é o da figura 2.3a [28]. Na figura 2.3b temos uma geometria aceitável com os contatos nas quinas da amostra, nas figuras 2.3c e 2.3d são geometrias não aceitáveis.

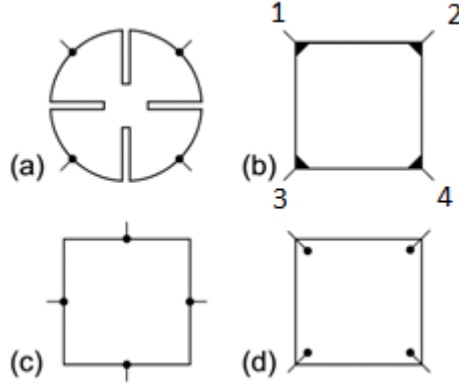


Figura 2.3: Ilustração mostrando as posições dos contatos para a medida a partir do efeito Hall. (a) Melhor geometria. (b) Geometria aceitável com contatos nas quinas da amostra quadrada. (c, d) Geometrias não aceitáveis (Extraída da Referência [28]).

Com o intuito de evitar a interferência dos contatos, a tensão hall pode ser medida em dois sentidos da corrente nos dois pares de contatos [33]. Apesar da eficiência das medidas de efeito Hall, a teoria desenvolvida até aqui não demonstra a existência da magnetoresistência. Para isso é necessário um tratamento mais detalhado a partir da equação de transporte de Boltzmann que apresentaremos no próximo capítulo.

2.5 Fotocondução

Nos semicondutores a condutividade é dada por

$$\sigma = e(n_0\mu_n + p_0\mu_p) \quad (2.28)$$

onde n_0 e p_0 são as concentrações de elétrons e buracos no equilíbrio respectivamente e μ_n e μ_p suas mobilidades. Em materiais homogêneos a fotocondutividade resulta quando a radiação incidente aumenta a concentrações dos portadores ($n = n_0 + n_{hv}$ e $p = p_0 + p_{hv}$) e, conseqüentemente, provoca um aumento da condutividade dada por [22]:

$$\sigma_{hv} = e(\mu_n n_{hv} + \mu_p p_{hv}) \quad (2.29)$$

e pela lei de Ohm, a densidade de corrente total quando o semicondutor é sujeito a um campo elétrico deverá conter dois termos:

$$\vec{J} = \vec{J}_0 + \vec{J}_{hv} = e[\mu_n(n_0 + n_{hv}) + \mu_p(p_0 + p_{hv})]\vec{E} \quad (2.30)$$

onde \vec{J}_0 é a corrente no escuro, sem radiação incidente, \vec{J}_{hv} é a fotocorrente gerada devido à incidência de luz, n_{hv} (p_{hv}) é a concentração de elétrons (buracos) livres foto-gerados e \vec{E} é o campo elétrico aplicado à amostra. Em semicondutores dopados, um tipo de portador domina o valor da corrente total, por exemplo, para um material tipo p podemos aproximar $p_0 \gg p_{hv}$, e escrever a densidade de corrente total como:

$$\vec{J} \cong e[\mu_p p_0 + \mu_n(n_0 + n_{hv})]\vec{E} \quad (2.31)$$

Então a corrente total deverá conter um termo independente da radiação incidente e a fotocorrente gerada dependerá apenas da concentração dos portadores minoritários foto gerados. Com a radiação incidente, a concentração dos portadores aumenta até um valor estacionário no qual processos de recombinação atuam no intuito de fazê-la retornar ao estado de equilíbrio. Este processo de recombinação depende de características intrínsecas do semiconductor e tem tempos característicos. Basicamente existem três tipos de recombinação [34]:

- (i) Recombinação direta banda a banda: se os elétrons na banda de valência receberem energia suficiente para vencer a energia do gap do semiconductor, e pularem para banda de condução, este mecanismo de recombinação faz com que estes elétrons retornem para a banda de valência emitindo um fóton com mesma energia. Dizemos então que é uma recombinação radiativa e ocorre geralmente em semicondutores de gap direto.
- (ii) Recombinação Auger: ocorre quando o elétron se recombina com um buraco e a energia perdida é transferida para uma terceira partícula, um elétron na banda de condução ou um buraco na banda de valência, que são chamadas de elétron Auger ou buraco Auger. A energia desta terceira partícula geralmente é transferida para os fônons da rede produzindo de calor. Este mecanismo de recombinação geralmente ocorre em semicondutores dopados de gap direto.
- (iii) Recombinação Shockley-Read-Hall (SRH): Quando defeitos ou impurezas estão presente no cristal, que é a maioria dos casos, níveis de energia aparecem dentro do gap e podem participar do mecanismo de recombinação. Estes são chamados recombinação SRH e a energia é transferida para a rede em forma de fônons. Geralmente também é chamada de recombinação banda-impureza e trata-se de uma recombinação não-radiativa.

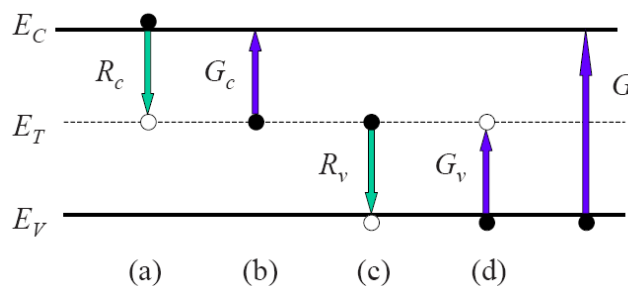


Figura 2.4: Esquemas dos mecanismos de recombinação SRH. Em (a) e (c) o elétron ou o buraco podem ocupar níveis de energia dentro da gap do semiconductor. Em (b) e (d) a taxa de geração, G , necessária para geração de pares elétrons/buracos, pode ser limitada por estes níveis de energia dentro do gap.

Para o silício dopado, o processo de recombinação dominante é o SRH e neste modelo assume-se que quando os pares elétrons-buracos são gerados, a uma taxa G , em um estado estacionário eles recombinarão com níveis de impurezas com energia E_T e densidade N_T denominados de centros de recombinação. Existem assim quatro processos básicos: (a) captura de um elétron da banda de condução para o centro de recombinação; (b) emissão de um elétron do centro para a banda de condução; (c) emissão de um elétron do centro de recombinação para um estado vazio na banda de valência e (d) captura de um elétron

da banda de valência para uma vacância no centro de recombinação. A transição (c) pode ser vista como a captura de um buraco pelo centro e (d) a emissão de um buraco pelo centro de recombinação dentro do gap.

É possível mostrar [29] que o mecanismo de recombinação banda-impureza obedece a seguinte equação fornecendo a taxa de recombinação:

$$R = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p \left[n + n_i \exp\left(\frac{E_T - E_i}{k_B T}\right) \right] + \tau_n \left[p + n_i \exp\left(\frac{E_i - E_T}{k_B T}\right) \right]} \quad (2.32)$$

onde $n = n_0 + n_{hv}$, $p = p_0 + p_{hv}$, o acréscimo nas concentrações de portadores devido à incidência de radiação, $\tau_n = \frac{1}{N_T v_{ter} \sigma_n}$ e $\tau_p = \frac{1}{N_T v_{ter} \sigma_p}$ são os tempos de vida para elétrons e buracos respectivamente, $n_i = \sqrt{n_0 p_0}$ a concentração no equilíbrio, σ_n e σ_p a secção de choque de captura para elétrons e buracos respectivamente, T a temperatura, k_B a constante de Boltzmann e v_{ter} a velocidade térmica definida como $v_{ter} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m^*}}$, com m^* a massa efetiva dos portadores de carga. As secções de choque de captura é um número que diz o quanto os elétrons precisam estar próximos do centro para serem capturados. Para o silício dopado com bismuto a secção de choque de captura varia entre [34] 0.01 a $1.0 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2$.

Considerando o semiconductor tipo p e que os portadores são gerados aos pares, a expressão 2.32 pode ser escrita como

$$R_n \cong r(T) n_{hv} \quad (2.33)$$

com

$$r_n(T) = \frac{p_0}{\tau_p \left[n_0 + n_{hv} + n_i \exp\left(\frac{E_T - E_i}{k_B T}\right) \right] + \tau_n \left[p_0 + n_i \exp\left(\frac{E_i - E_T}{k_B T}\right) \right]} \quad (2.34)$$

o coeficiente de recombinação dependente da temperatura. Uma expressão semelhante pode ser encontrada para um semiconductor tipo n . Outra aproximação é considerar $E_T \approx E_i$ e $p_0 > n_i > n_0 + n_{hv}$ assim obtemos:

$$R_n \cong \frac{n_{hv}}{\tau_n} \quad (2.35)$$

que é uma forma simples de escrever $r(T)$ pois sua dependência com a temperatura é um pouco complicada de tratar, visto que as próprias concentrações n_0 e p_0 também têm sua dependência com T . Alguns autores consideram que em certas situações os tempos de recombinação para elétrons e buracos sejam iguais, visto que os portadores são gerados aos pares, eles deverão se recombinar também aos pares, mas na situação que estes níveis de impurezas funcionam como armadilhas impedindo que os elétrons sejam recombinados, pode existir uma diferença significativa nestas duas concentrações.

Para encontrar as concentrações de elétrons e buracos gerados, devemos impor que elas obedeçam a equação da continuidade,

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p - R_p - \nabla \cdot \vec{J}_p \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - R_n + \nabla \cdot \vec{J}_n \quad (2.37)$$

onde as letras G_n e G_p representam respectivamente as taxas de geração de elétrons e de buracos e que podem ser divididas em duas partes, geração por efeitos térmicos e por fontes externas (com luz, por exemplo). A separação entre termos de geração para elétrons e buracos é devido ao nível de impureza que serve como armadilha, ou centros de recombinação, impedindo que apenas parte dos elétrons fotoexcitados pulem para a banda de condução, fazendo com que apenas os buracos deixados participem da corrente elétrica.

Na equação (2.14) quando demonstramos o processo de difusão de portadores não foi levada em conta a existências de níveis de energia dentro do gap devido as impurezas presentes no semicondutor, ou seja, todos os portadores gerados saíram da banda de valência para a banda de condução. Sendo assim, visto que este processo também é baseado na geração de pares, devemos levar em conta as possíveis recombinações que podem surgir durante a medida da corrente gerada por difusão ou por fotocondução.

3. *Efeito Magnetoresistivo*

A teoria descrita no capítulo anterior pode ser feita também a partir da equação de Newton para o movimento, com a diferença de que a condutividade deixa de ser um escalar e toma uma forma tensorial. Este resultado implica numa condutividade isotrópica e independente do campo elétrico ou do campo magnético aplicado. Isto ocorre devido às incorretas suposições:

1. Massa efetiva isotrópica;
2. Tempo de relaxação independente da energia do elétron;
3. Dimensões da amostra não considerada, o comprimento é infinito.

Para alguns materiais, a condutividade deixa de ser um escalar e passa a ser uma função do campo magnético, isso implica numa densidade de corrente diferente para uma dada direção devido ao campo externo. Este efeito é conhecido como magnetoresistência. Para incluir esta dependência com o campo magnético na condutividade elétrica, é necessário um tratamento mais exato na teoria de transporte feito a partir da Equação de Boltzmann, que apresentaremos a seguir.

3.1 *A Equação de Boltzmann*

Quando um semicondutor é submetido a um campo elétrico externo, os elétrons da banda de condução e os buracos na banda de valência são acelerados. Se a rede cristalina for perfeita, estes não sofreriam oposição ao seu deslocamento e a condutividade do cristal seria infinita.

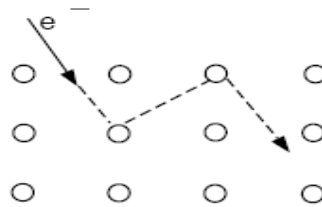


Figura 3.1: Ilustração da trajetória de um elétron no cristal.

A presença das imperfeições no cristal e as vibrações da rede limitam o movimento dos elétrons. Nestas condições, o movimento dos elétrons pode ser visualizado como uma sucessão de trajetórias interrompidas por colisões com obstáculos diversos. Cada trajetória após uma colisão tem uma direção que depende da seção de choque, mas devido à ação do campo elétrico surgirá uma velocidade média na direção do campo. Esta velocidade média será proporcional à intensidade do campo elétrico. Assim, para campos fracos:

$$\vec{v} = \mu \vec{E} \quad (3.1)$$

onde a constante de proporcionalidade μ , chamada agora de mobilidade eletrônica, depende da temperatura e das propriedades intrínsecas do material, sendo independente do campo elétrico, ao menos na região de baixo campo, como no nosso caso. No capítulo anterior esta velocidade média foi incluída no experimento de Haynes-Schokley quando

expressamos o deslocamento dos portadores de carga (figura 2.1c), mas agora vamos considerar que a mobilidade indicará uma medida das imperfeições do potencial cristalino sobre os portadores de carga.

Para isto, vamos adotar que uma “nuvem” de elétrons se propaga no material como o escoamento de um fluido governado pela equação da continuidade

$$\nabla \cdot (\vec{v}\rho) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)_c \quad (3.2)$$

com $\rho(x, y, z)$ a densidade do fluido, \vec{v} a velocidade do fluido e $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)_c$ a taxa de criação do fluido no tempo t . Se não houver a criação de fluido $\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)_c = 0$, então obtemos a equação da continuidade. Esta ideia pode ser generalizada para um espaço de seis dimensões, e para isto, vamos definir uma função de distribuição $f(\vec{r}, \vec{k})$ dos portadores de carga, como sendo a densidade de probabilidade de que um estado com energia ϵ_k seja ocupado por estes portadores à temperatura T . Na presença do campo elétrico, ocorrerá uma variação do momento das partículas que promoverá uma alteração na função distribuição.

Assim, a função distribuição evoluirá em função do tempo da seguinte forma:

$$\frac{df(\vec{r}, \vec{k}, t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\vec{r}} f \cdot \vec{v} - \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \cdot \vec{\nabla} V(\vec{r}) \quad (3.3)$$

onde usamos $\frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} \vec{\nabla} V(\vec{r})$. Podemos considerar [35] que as colisões devido às imperfeições da rede e à presença dos íons agem como um campo de forças interno (representado pelo termo $-\vec{\nabla} V(\vec{r})$) que perturba o movimento dos elétrons.

A existência deste campo interno e a diferença na sua ação comparada à do campo externo, permite que se desmembrem estas duas forças, podendo então escrever:

$$\nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V(\vec{r}) = \nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V_E + \nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V_I \quad (3.4)$$

onde os índices E e I representa a ação externa e interna respectivamente. Levando em conta que a distância entre os íons é da ordem de alguns Angstroms e que, em temperatura ambiente, a velocidade térmica dos elétrons é em torno de $10^5 m/s$ [36], as colisões entre eles devem ser consideradas como eventos sucessivos e aleatórios. Por este motivo a ação das imperfeições é tratada pela teoria do espalhamento e da secção de choque.

Adotando estas considerações podemos escrever a equação de Boltzmann para os elétrons como:

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} = \nabla_{\vec{r}} f \cdot \vec{v} - \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \cdot \vec{\nabla} V_E - \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V_I \quad (3.5)$$

Para o caso em que a função de distribuição não varie no tempo, $\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{k}, t)}{\partial t} = 0$, implicaria em:

$$\nabla_{\vec{r}} f \cdot \vec{v} - \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V_E = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V_I, \quad (3.6)$$

ou seja, a variação da função distribuição devido à ação do campo externo e da velocidade das partículas é compensada pela ação dos centros espalhadores, levando assim a um ponto de equilíbrio no momento em que o campo externo é retirado. Por esta razão, o termo $\frac{df(\vec{r}, \vec{k}, t)}{dt}$ pode ser tratado pela introdução do tempo de relaxação τ_c , definida pela equação [37]:

$$\frac{df(\vec{r}, \vec{k}, t)}{dt} = -\frac{f - f_0}{\tau_c} \quad (3.7)$$

com f_0 a função de distribuição no equilíbrio térmico. Integrando esta expressão teremos:

$$f - f_0 = A e^{-t/\tau_c} \quad (3.8)$$

que simplesmente diz que na ausência de perturbações, $f = f_0$, qualquer sistema retorna à posição de equilíbrio quando o tempo vai para o infinito. Com isto, podemos escrever a equação de transporte de Boltzmann na aproximação do tempo de relaxação como sendo:

$$\nabla_{\vec{r}} f \cdot \vec{v} - \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V_E - \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V_I = -\frac{f - f_0}{\tau_c} \quad (3.9)$$

A equação de Boltzmann é válida desde que os campos de forças exteriores não modifiquem o espectro energético do cristal e os processos estudados não sejam de curta duração, pois esta é uma equação semi-clássica e processos muito rápidos levariam a uma grande incerteza nos valores das energias envolvidas.

3.2 Teoria de Transporte Semi-Clássico

A utilização da equação da Equação de Boltzmann na teoria de transporte é útil porque introduz conceitos como distribuição de Fermi e nível de Fermi e se reduz a teoria clássica em limites especiais [34]. Para realizar este tratamento escreveremos a equação de transporte como:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f + \nabla_{\vec{r}} f \cdot \vec{v} = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (3.10)$$

que, para o caso estacionário e uniformidade espacial, conduz a:

$$\frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f = -\frac{f_1}{\tau} \quad (3.11)$$

ou

$$\frac{-e}{\hbar} (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{k}} f = -\frac{f_1}{\tau} \quad (3.12)$$

A ligação com a mecânica quântica é feita utilizando a definição de velocidade de grupo dada por [38]:

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \epsilon \quad (3.13)$$

logo,

$$\frac{-e}{\hbar} \left(\vec{E} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f = -\frac{f_1}{\tau} \quad (3.14)$$

com ϵ a energia do elétron e \vec{k} seu vetor de onda associado. Considerando [39] que a função f é constituída de dois termos $f = f_0 + f_1'$ com f_0 a função de distribuição no equilíbrio que não é afetada pelo campo elétrico e f_1' o termo de contribuição devido à presença do campo magnético, teremos:

$$\frac{-e}{\hbar} \left(\vec{E} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B} \right) \cdot (\nabla_{\vec{k}} f_0 + \nabla_{\vec{k}} f_1') = -\frac{f_1}{\tau} \quad (3.15)$$

A função f_0 é dada pela função distribuição de Fermi-Dirac e no equilíbrio térmico depende apenas da energia $\epsilon(k)$, assim podemos escrever:

$$\nabla_{\vec{k}} f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \nabla_{\vec{k}} \epsilon \quad (3.16)$$

como $\nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B}$ é ortonormal a $\nabla_{\vec{k}} \epsilon$ teremos:

$$\left(\frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B} \right) \cdot \nabla_{\vec{k}} f_0 = 0 \quad (3.17)$$

logo

$$\frac{f_1}{\tau} = \frac{e}{\hbar} \left(\vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} \epsilon \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} + \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f_1' + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B} \cdot \nabla_{\vec{k}} f_1' \right) \quad (3.18)$$

Para resolver esta equação vamos adotar a condição $f_0 \gg f_1'$, $\nabla_{\vec{k}} f_0 \gg \nabla_{\vec{k}} f_1'$ e $\vec{B} = 0$ resultando em:

$$\frac{f_1}{\tau} = \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} \epsilon \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \equiv \frac{f_1^{(0)}}{\tau} \quad (3.19)$$

e a primeira solução será:

$$f_1^{(0)} = \frac{\tau e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} \epsilon \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = \frac{\tau e}{\hbar} \left[\sum_j E_j \frac{\partial \epsilon}{\partial k_j} \right] \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \quad (3.20)$$

onde o índice do somatório indica o número de coordenadas no espaço. Para obter outra solução utilizamos o método iterativo que consta em substituir a primeira solução na equação original.

então,

$$f_1^{(1)} \equiv f_1^{(0)} + \frac{\tau e}{\hbar^2} (\nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{k}} f_1^{(0)} \quad (3.21)$$

repetindo o processo teremos

$$\begin{aligned} f_1^{(2)} \equiv f_1^{(0)} + \frac{\tau e}{\hbar^2} (\nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{k}} f_1^{(0)} \\ + \frac{\tau e}{\hbar^2} (\nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{k}} \left[\frac{\tau e}{\hbar^2} (\nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{k}} f_1^{(0)} \right] \end{aligned} \quad (3.22)$$

que pode ser expandido até ordem n .

Inserindo $f_1^{(2)}$ na equação da densidade de corrente [40]

$$\vec{J} = \frac{-e}{4\pi^3 \hbar} \int \vec{v} f_1^{(2)} d^3 \vec{k} = \frac{-e}{4\pi^3 \hbar} \int \nabla_{\vec{k}} \epsilon f_1^{(2)} d^3 k \quad (3.23)$$

obtemos uma forma geral para a densidade de corrente na presença dos campos elétrico e magnético.

$$\begin{aligned} \vec{J} = \frac{-e}{4\pi^3 \hbar} \int \left\{ \nabla_{\vec{k}} \epsilon f_1^{(0)} + \frac{\tau e}{\hbar^2} \nabla_{\vec{k}} \epsilon (\nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{k}} f_1^{(0)} \right. \\ \left. + \frac{\tau e}{\hbar^2} \nabla_{\vec{k}} \epsilon (\nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{k}} \left[\frac{\tau e}{\hbar^2} (\nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{k}} f_1^{(0)} \right] \right\} d^3 k \end{aligned} \quad (3.24)$$

substituindo $f_1^{(0)}$ temos

$$\begin{aligned} \vec{J} = \frac{-e}{4\pi^3 \hbar} \int \left\{ \nabla_{\vec{k}} \epsilon \frac{\tau e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} \epsilon \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} + \frac{\tau e}{\hbar^2} \nabla_{\vec{k}} \epsilon (\nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{k}} \left(\frac{\tau e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} \epsilon \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \right. \\ \left. + \frac{\tau e}{\hbar^2} \nabla_{\vec{k}} \epsilon (\nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{k}} \left[\frac{\tau e}{\hbar^2} (\nabla_{\vec{k}} \epsilon \times \vec{B}) \cdot \nabla_{\vec{k}} \left(\frac{\tau e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} \epsilon \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \right) \right] \right\} d^3 k \end{aligned} \quad (3.25)$$

ou em termos das coordenadas espaciais

$$\begin{aligned} J_i &= \left[\frac{-e^2}{4\pi^3 \hbar^2} \int \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \tau \frac{\partial \epsilon}{\partial k_i} \frac{\partial \epsilon}{\partial k_j} d^3 k \delta_{ij} \right] E_j \\ &+ \left\{ \frac{-e^3}{4\pi^3 \hbar^4} \int \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \tau \frac{\partial \epsilon}{\partial k_i} \left[\frac{\partial \epsilon}{\partial k_r} \frac{\partial}{\partial k_s} \left(\tau \frac{\partial \epsilon}{\partial k_j} \right) \right] d^3 k \epsilon_{rls} \right\} E_j B_l \\ &+ \left\{ \frac{-e^4}{4\pi^3 \hbar^6} \int \frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} \tau \frac{\partial \epsilon}{\partial k_i} \left[\frac{\partial \epsilon}{\partial k_r} \frac{\partial}{\partial k_s} \left[\tau \frac{\partial \epsilon}{\partial k_t} \frac{\partial}{\partial k_u} \left(\tau \frac{\partial \epsilon}{\partial k_j} \right) \right] \right] d^3 k \epsilon_{rms} \epsilon_{ltu} \right\} E_j B_l B_m \end{aligned} \quad (3.26)$$

com ϵ o tensor de Levi-Civita. Podemos escrever a expressão acima de uma forma simplificada,

$$J_i = \sigma_{ij} E_j + \sigma_{ijl} E_j B_l + \sigma_{ijlm} E_j B_l B_m \quad (3.27)$$

com σ_{ij} o tensor de rank 2 para a condutividade elétrica, o equivalente se não houver campo magnético aplicado, σ_{ijl} é o tensor de rank 3 para o efeito Hall e σ_{ijlm} é o tensor de magnetocondutividade de rank 4. O significado físico destes tensores pode ser entendido de maneira simplificada considerando bandas de energia parabólicas, massa efetiva escalar e semicondutores não degenerados. Nesta situação a superfície de energia constante da banda de condução é assumida como esférica e expressa por

$$\epsilon(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \quad (3.28)$$

com m^* a massa efetiva escalar. Nesta condição temos as seguintes relações:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial k_i} = \frac{\hbar^2}{m^*} k_i \quad (3.29)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial k_j} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial k_i} \right) = \frac{\hbar^2}{m^*} \delta_{ij} \quad (3.30)$$

Pois levando em conta que o campo elétrico está na direção j e o vetor de onda faz um ângulo θ com \vec{E} temos:

$$k_j = k \cos \theta \quad (3.31)$$

logo

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial k_j} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial k_i} \right) = \frac{\hbar^4}{m^{*2}} \delta_{ij} k^2 \cos^2 \theta \quad (3.32)$$

e tomando

$$f_0 = \frac{1}{e^{(\epsilon - \epsilon_f)/k_B T} + 1} \quad (3.33)$$

a função de distribuição de Fermi-Dirac teremos,

$$\frac{\partial f_0}{\partial \epsilon} = -\frac{1}{k_B T} f_0 (1 - f_0) \quad (3.34)$$

e substituindo em J_i podemos obter:

$$\sigma_{ij} = \left[\frac{-e^2}{4\pi^3 \hbar^2} \int -\frac{1}{k_B T} f_0 (1 - f_0) \tau \frac{\hbar^4}{m^{*2}} \delta_{ij} k^2 \cos^2 \theta d^3 k \right] \quad (3.35)$$

Calculando $d^3 \vec{k}$ em coordenadas esféricas

$$d^3 k = k^2 \sin \theta dk d\theta d\varphi \quad (3.36)$$

temos

$$k^2 = \frac{2m^*}{\hbar^2} \epsilon \quad (3.37)$$

e

$$dk = \frac{(2m^*)^{1/2}}{2\hbar} \epsilon^{-1/2} d\epsilon \quad (3.38)$$

logo

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar^2} \left(\frac{1}{k_B T} \right) \delta_{ij} \int_0^\infty k^2 dk \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} f_0(1-f_0) \tau k^2 \cos^2\theta d\varphi \quad (3.39)$$

Substituindo os resultados anteriores resulta em:

$$\sigma_{ij} = \frac{2e^2(2m^*)^{1/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \left(\frac{1}{k_B T} \right) \delta_{ij} \int_0^\infty \epsilon^{3/2} f_0(1-f_0) \tau d\epsilon \quad (3.40)$$

para semicondutores não degenerados temos que $f_0 \ll 1$ e $(1-f_0) \cong 1$, logo

$$\sigma_{ij} = \frac{2e^2(2m^*)^{1/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \left(\frac{1}{k_B T} \right) \delta_{ij} \int_0^\infty \tau \epsilon^{3/2} f_0 d\epsilon \quad (3.41)$$

a densidade eletrônica é dada por

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int f_0 d^3k = \frac{\sqrt{2}m^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \epsilon^{1/2} f_0 d\epsilon \quad (3.42)$$

e, quando introduzindo, na expressão para σ_{ij} , encontramos:

$$\sigma_{ij} = \frac{2ne^2}{3m^*} \left(\frac{1}{k_B T} \right) \left[\frac{\int_0^\infty \epsilon^{3/2} \tau f_0 d\epsilon}{\int_0^\infty \epsilon^{1/2} f_0 d\epsilon} \right] \delta_{ij} \quad (3.43)$$

e integrando $\int_0^\infty \epsilon^{1/2} f_0 d\epsilon$ por partes temos

$$\sigma_{ij} = \frac{ne^2}{m^*} \left[\frac{\int_0^\infty \epsilon^{3/2} \tau f_0 d\epsilon}{\int_0^\infty \epsilon^{3/2} f_0 d\epsilon} \right] \delta_{ij} = \frac{ne^2}{m^*} \langle \tau \rangle \delta_{ij} \equiv \sigma_0 \delta_{ij} \quad (3.44)$$

do mesmo modo podemos definir

$$\sigma_{ijl} = -\frac{ne^3}{m^{*2}} \langle \tau^2 \rangle \epsilon_{ijl} \equiv \gamma_0 \epsilon_{ijl} \quad (3.45)$$

e

$$\sigma_{ijlm} = \frac{ne^4}{m^{*3}} \langle \tau^3 \rangle \epsilon_{mis} \epsilon_{lsj} \equiv \beta_0 \epsilon_{mis} \epsilon_{lsj} \quad (3.46)$$

Entretanto escrevendo a densidade de corrente como na lei de Ohm encontramos o tensor condutividade $[\sigma(B)]$ dado por (para materiais isotropicos)

$$[\sigma(B)] = \begin{bmatrix} \sigma_0 + \beta_0 [B_y^2 + B_z^2] & \gamma_0 B_z - \beta_0 B_x B_y & -\gamma_0 B_y - \beta_0 B_x B_z \\ -\gamma_0 B_z - \beta_0 B_x B_y & \sigma_0 + \beta_0 [B_x^2 + B_z^2] & \gamma_0 B_x - \beta_0 B_y B_z \\ \gamma_0 B_z - \beta_0 B_x B_y & -\gamma_0 B_x - \beta_0 B_y B_z & \sigma_0 + \beta_0 [B_x^2 + B_y^2] \end{bmatrix} \quad (3.47)$$

Para entrar na discussão do efeito Hall vamos utilizar a lei de Ohm e adotar o campo magnético na direção z com $E_z = 0$, ambos estáticos, obtendo:

$$J_x = (\sigma_0 + \beta_0 B_z^2) E_x + \gamma_0 B_z E_y \quad (3.48)$$

$$J_y = -\gamma_0 B_z E_x + (\sigma_0 + \beta_0 B_z^2) E_y \quad (3.49)$$

Assumindo que a corrente na direção y seja nula, podemos organizar estas equações para encontrarmos

$$R_H = \frac{\gamma_0}{(\sigma_0 + \beta_0 B_z^2)^2 + (\gamma_0 B_z)^2} \quad (3.50)$$

Considerando que $\sigma_0 \gg \beta_0 B_z^2$ e $\sigma_0 \gg \gamma_0 B_z$ podemos escrever o coeficiente Hall como

$$R_H = \frac{\gamma_0}{(\sigma_0)^2} \quad (3.51)$$

ou substituindo os valores;

$$R_H = -\frac{r_H}{ne} \quad (3.52)$$

com $r_H = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}$ definido como Fator Hall. Este fator pode ser encontrado quando a dependência da função de distribuição e do tempo de relaxação com a energia é conhecida. Para os semicondutores, o Fator Hall, r_H , varia entre 1 e 2 a depender do mecanismo de espalhamento dominante.

4. Simulação Monte Carlo para Dinâmica Eletrônica em Semicondutores

O Método Monte Carlo é uma poderosa ferramenta para cálculo de transporte em semicondutores devido a sua fácil implementação. Mesmo com um número reduzido de partículas é possível obter resultados que podem ser interpretados de uma forma didática para a compreensão dos fenômenos que ocorrem quando o semicondutor está sujeito a um campo elétrico. Esta simulação é utilizada em diversos tipos de materiais que vão desde filmes-finos [41], poços quânticos [42], transporte de spin-polarizado [43], dispositivos semicondutores ultrapequenos [44], etc. obtendo assim o conhecimento de fenômenos físicos que não podem ser medidos diretamente no laboratório e que não se restringe a campos estáticos. Existem alguns programas disponíveis que efetuam esses tipos de cálculos como o DAMOCLES e o Archimedes, sendo que o último é de código aberto. Para entendermos como funciona deveremos conhecer os mecanismos de espalhamento em que os elétrons estão sujeitos num cristal.

4.1 Taxas de Espalhamento

Na equação 3.5 ($\frac{df(\vec{r}, \vec{k}, t)}{dt} = \nabla_{\vec{r}} f \cdot \vec{v} - \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \cdot \vec{\nabla} V_E - \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} f \cdot \nabla V_I$), o último termo do lado direito representa os efeitos de imperfeições, impurezas ou de vibração da rede cristalina. Logo é tratado como sendo um termo de colisão responsável pelo espalhamento do elétron (ou buraco) durante a condução. Na teoria, cada elétron percorrerá um livre caminho médio sem que seja espalhado e, após este percurso, sofrerá espalhamento que modificará sua energia, ou apenas sua direção.

Quando um cristal é submetido a um campo elétrico e magnético, seus elétrons irão acelerar segundo as leis “semi-clássicas” do movimento e podemos representar cada elétron como um ponto nas coordenadas de posição e momento (\vec{r}, \vec{k}). O movimento destes elétrons é descrito pela equação:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (4.1)$$

O termo de colisão é obtido pela regra de ouro da teoria de perturbação da Mecânica Quântica [45], pois considera que durante o evento de espalhamento, cada elétron tem uma probabilidade de passar de um estado \vec{k} para um estado \vec{k}' . Esta probabilidade é definida a partir das chamadas Taxas de Transição ou Espalhamento obtidas a partir da Equação de Schroedinger. Em um cristal real, existem vários tipos de espalhamento que o elétron pode sofrer, dentre eles os mais importantes são os espalhamentos por defeito, pelos fônons da rede cristalina e o espalhamento portador-portador.

Alguns mecanismos de espalhamento são de natureza elástica, ou seja, não alteram a energia da partícula, alteram apenas a sua direção, que é o caso do espalhamento por impurezas ionizadas. Outros mecanismos têm natureza inelástica e afeta tanto o vetor de onda \vec{k} quanto a energia da partícula. Neste caso o elétron poderá absorver ou perder energia após uma colisão, um exemplo disto é o espalhamento por fônons óticos polares,

onde o elétron poderá absorver ou emitir um fônon da rede [46]. A estrutura básica do processo de interação elétron-fônon é a criação e aniquilação de um fônon com troca simultânea de um estado $|\vec{k}, \sigma\rangle$ para $|\vec{k} \pm \vec{q}, \sigma\rangle$. A emissão de fônons pode ocorrer na recombinação de um par elétron-buraco, e a absorção de um fônon pode gerar um par elétron-buraco. Este processo ocorre indefinidamente e depende da temperatura da rede e das características intrínsecas do material [19].

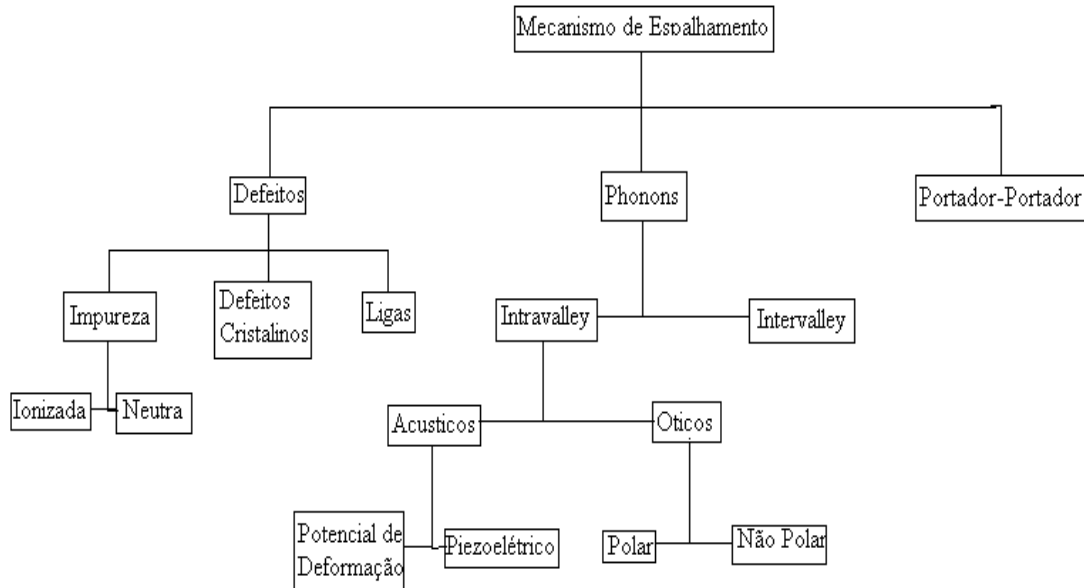


Figura 4.1: Classificação dos mecanismos de espalhamento em semicondutores.

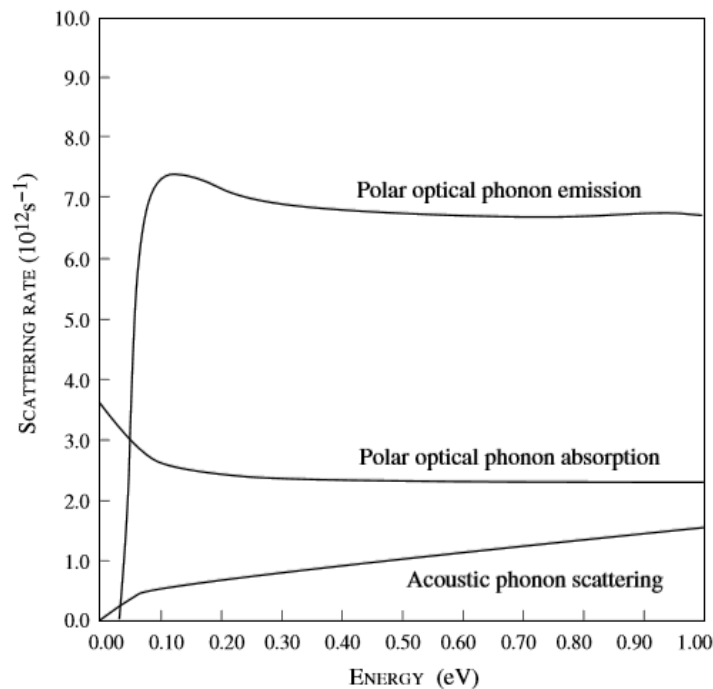


Figura 4.2: Taxas de Espalhamento em função da energia do elétron para o GaAs para alguns processos de espalhamento (Extraído da Referência [47]).

Cada taxa de espalhamento tem uma dependência com a temperatura e a energia do elétron. Na literatura referem-se a taxa de espalhamento por impureza neutra com uma dependência apenas com a temperatura. Existem também duas diferentes expressões: a primeira conhecida como Fórmula de Erginsoy que é independente da energia e da temperatura e a Fórmula de Sclar, que tem uma dependência apenas com a energia [41].

Acredita-se que a forma exata do espalhamento por impureza neutra também tenha uma dependência com a natureza atômica da impureza. Na Figura 4.2 apresentamos algumas taxas de espalhamento para o GaAs em função da energia do elétron.

4.2 Relação energia-vetor de onda

O espalhamento por fônons óticos polar é um importante mecanismo de espalhamento em materiais polares como o GaAs com transições intervalas.

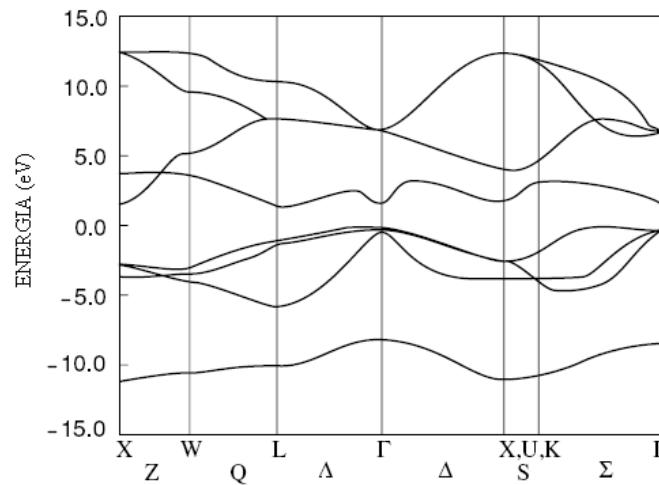


Figura 4.3: Estrutura de bandas para o GaAs (Extraído da Referência [38]).

Este tipo de transição ocorre entre vales não equivalentes (Γ para L , L para Γ , Γ para X , X para Γ , L para X e X para L), e vales equivalentes (L para L , e X para X) (Figura 4.3). Então podemos dizer que a região de energia de um semiconductor que interessa para os problemas de transportes está localizada no gap de energia e estende-se a alguns E_g acima do mínimo da banda de condução e abaixo do máximo da banda de valência. Mas nesta situação a energia desvia-se da forma quadrática e torna-se não parabólica. Para a banda de condução, uma forma de introduzir uma não parabolicidade é considerar uma relação do tipo:

$$\epsilon(1 + \alpha\epsilon) = \gamma(\epsilon) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (4.2)$$

onde α é chamado de fator de não parabolicidade que pode ser relacionada a outras quantidades da banda. Para o vale gamma, α pode ser aproximado para [12]:

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m^*}{m_0}\right) \quad (4.3)$$

a velocidade relacionada a esta banda não-parabólica em um estado \vec{k} será

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{\hbar\vec{k}}{m^*(1 + 2\alpha\epsilon)} \quad (4.4)$$

que nada mais é a velocidade de grupo dos portadores com a introdução de uma massa condutiva efetiva definida por:

$$m_c = m^*(1 + 2\alpha\epsilon) \quad (4.5)$$

4.3 O Método Monte Carlo

Atualmente, a denominação “método de Monte Carlo” tornou-se uma expressão geral associada ao uso de números aleatórios e estatística de probabilidade. Para que uma simulação de Monte Carlo esteja presente em um estudo basta que este faça uso de números aleatórios na verificação de algum problema [48] [49]. Ao estimar a probabilidade de ocorrência de um evento, pode-se simular um número independente de amostras do evento e computar a proporção de vezes em que o mesmo ocorre.

O método é utilizado na solução de equações diferenciais pela conversão destas em equações integrais. A associação do método Monte Carlo com integrais é feita de maneira também muito simples e intuitiva e sua vantagem está na possibilidade de reduzir sistemas com grande número de dimensões através da determinação de uma média. O mesmo baseia-se no princípio de que a integral de qualquer função de distribuição num intervalo da a a b pode ser definida pela integral de outra função, cujo resultado será números distribuídos randomicamente dentro de outro intervalo [50], digamos $(0 a 1)$. Por exemplo, seja $P(\beta)$ uma distribuição de probabilidade de alguma variável β numa escala de a a b , se os eventos são escolhidos randomicamente os diferentes valores de β é determinado gerando números randômicos que têm uma distribuição uniforme, dizemos entre 0 e 1.

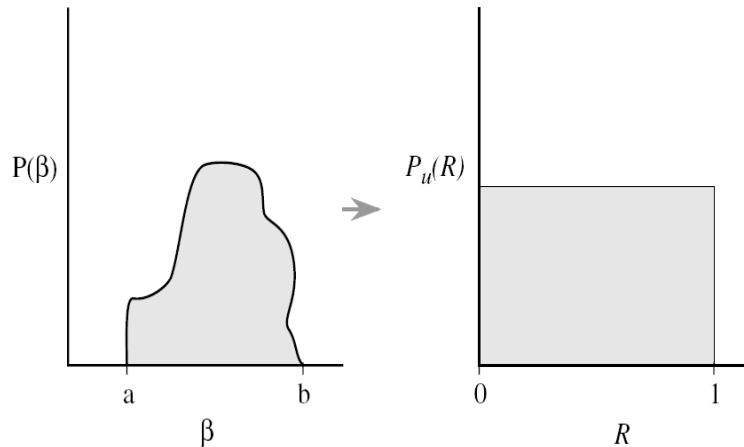


Figura 4.4: Mapeamento de uma função de probabilidade randômica.

Então para realizar um mapeamento de uma distribuição de probabilidade de um número randômico $P_u(R)$ para a função probabilidade $P(\beta)$ basta fazer

$$\int_0^{R_n} P_u(R) dR = \int_0^{\beta_n} P(\beta) d\beta \quad (4.6)$$

onde R_n é o número randômico gerado na n^{th} tentativa. Este resultado pode ser simplificado para:

$$\int_0^{\beta_n} P(\beta) d\beta = R_n \quad (4.7)$$

Este é o princípio do Método Monte Carlo que é utilizado para resolver qualquer tipo de integral por meio de uma amostragem uniforme de pontos β escolhidos aleatoriamente num intervalo $[0, \beta_n]$. Ele pode ser utilizado para sistema com dimensões maiores, onde a única diferença é que cada coordenada deve ser amostrada dentro dos respectivos intervalos de integração [51].

4.3.1 Simulação Monte Carlo

Existem duas alternativas para a simulação Monte Carlo, quando aplicado ao transporte de cargas em semicondutores. A primeira consiste na simulação do movimento de um elétron no cristal sujeito a um campo elétrico aplicado e um dado mecanismo de espalhamento. A segunda consiste na simulação dos portadores de carga em dispositivos [52]. Um fluxograma típico do método é apresentado na Figura 4.5. O movimento do elétron no cristal está sujeito a processos de deriva e colisão, que depende de parâmetros intrínsecos do material e do campo elétrico externo. O efeito das forças externas é determinístico, mas os processos de colisão afetam a trajetória do elétron de forma probabilística.

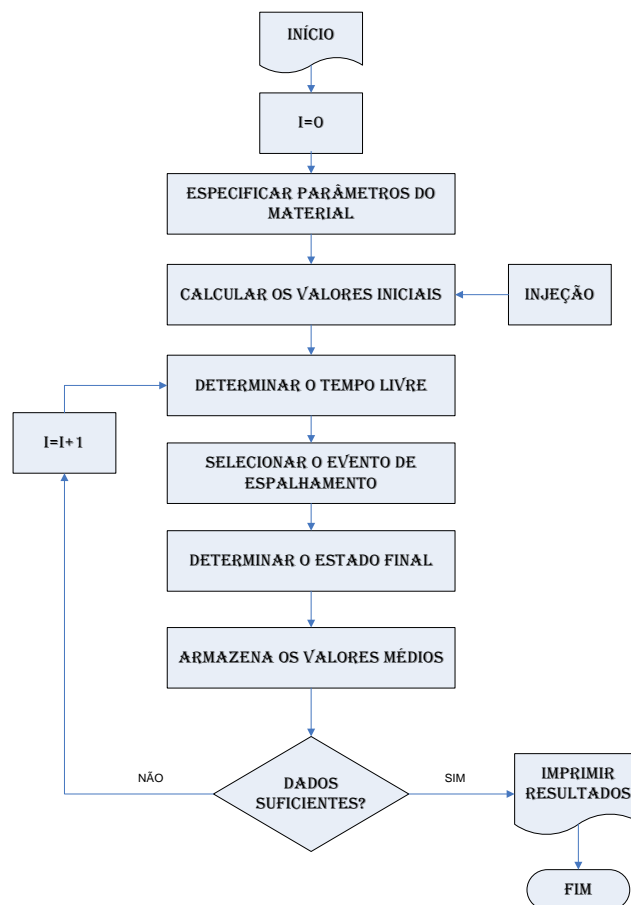


Figura 4.5: Fluxograma do Programa Monte Carlo utilizado para a determinação das taxas de espalhamento.

Os valores iniciais da energia, momento e posição do elétron podem ser realizados pela geração de números randômicos, pois o método monte Carlo dará apenas os valores médios finais calculados durante o tempo total de simulação.

O tempo de percurso livre é determinado pela geração de um primeiro número randômico. Durante este tempo o elétron é acelerado obedecendo às leis clássicas de movimento [53]. No final deste percurso o elétron deverá sofrer uma colisão que é determinado pelos tipos de espalhamento descritos no capítulo anteriormente, e sofrerá espalhamento por apenas um deles.

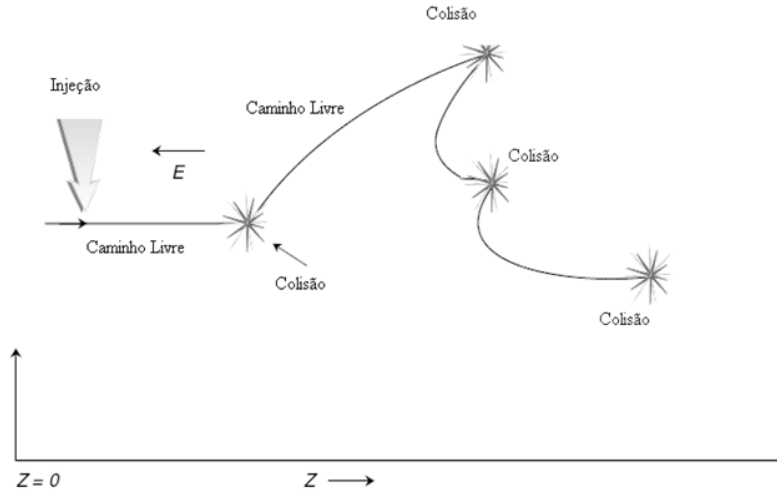


Figura 4.6: Ilustração do processo de colisão e deriva dos elétrons em condução submetido a um campo elétrico \vec{E} num cristal.

Então, para selecionar o evento de espalhamento geramos um segundo número randômico. E por fim, após a colisão, deve-se determinar o estado final dos portadores, ou seja, determinar a direção e o vetor de onda do elétron gerando uma nova série de números randômicos. Cada número randômico mencionado acima depende da aplicação do método Monte Carlo em diferentes integrais, cada uma com uma probabilidade específica de ocorrer, que iremos descrever a seguir.

4.3.2 Injeção de Portadores

A injeção de portadores tem grande relevância para o transporte de portadores sobre curtas distâncias ou tempos. A probabilidade de encontrar o elétron com velocidade entre \vec{v} e $\vec{v} + d\vec{v}$ é simplesmente dada pela distribuição de Maxwell [47]:

$$P(\vec{v}) = \left(\frac{m^*}{2\pi k_b T}\right)^{3/2} \left[\frac{-m^*}{2k_b T}(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)\right] \quad (4.8)$$

Se o campo elétrico estiver na direção do eixo z , vamos assumir que os elétrons terão velocidades positivas enquanto nos eixos x e y poderão ter velocidades negativas ou positivas e estes por suas vezes serão dados por:

$$\int_0^{R_n} P_u(R) dR = \int_{-\infty}^{v_{xn}} \left(\frac{m^*}{2\pi k_b T}\right)^{3/2} \left[\frac{-m^*}{2k_b T}(v_x^2)\right] dv_x \quad (4.9)$$

com uma expressão similar para y . Para encontrarmos a velocidade no eixo y , fazemos a aproximação de que a corrente é dada pela velocidade na direção do campo elétrico somente, isto é

$$\frac{J}{e} = \int_0^{\infty} v_z f(v_z) dv_z \quad (4.10)$$

onde o integrando é o fluxo de velocidade entre v_z e $v_z + dv_z$. Então a velocidade na direção z pelo método Monte Carlo será:

$$R_n = \frac{\int_0^{v_{zn}} v_z e^{-\frac{m^* v_z^2}{2k_b T}} dv_z}{\int_0^{\infty} v_z e^{-\frac{m^* v_z^2}{2k_b T}} dv_z} \quad (4.11)$$

Considerando que a probabilidade no denominador é normalizada e com resultado da integração acima teremos:

$$v_z = \sqrt{\frac{-2k_b T \ln(1 - R_n)}{m^*}} \quad (4.12)$$

Desde que os números randômicos gerados serão positivos e menores que 1, o termo $-\ln(1 - R_n)$ será sempre positivo. Um processo mais simples em determinar a energia inicial do portador é considerar que os elétrons estarão sujeitos a expressão da equipartição da energia com variações determinadas por:

$$\epsilon_n = \frac{3}{2} k_b T R_n \quad (4.13)$$

onde k_b é a constante de Boltzmann e T a temperatura. Esta expressão apresenta resultados similares a anterior, mas se torna inadequada quando se pretende determinar o percurso dos portadores, enquanto que a primeira é mais frequentemente utilizada na simulação dos dispositivos semicondutores [54].

4.3.3 Caminho Livre

Durante o percurso livre o elétron irá mover-se na direção do campo elétrico de acordo com a expressão

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = e\vec{E} \quad (4.14)$$

Se o campo elétrico for aplicado na direção do eixo z , temos as seguintes mudanças no momento do elétron após um tempo t :

$$\begin{aligned} p_x(t) &= p_x(0) \\ p_y(t) &= p_y(0) \\ p_z(t) &= p_z(0) + eEt \end{aligned} \quad (4.15)$$

e a posição será:

$$\begin{aligned}x(t) &= x(0) + \frac{p_x}{m^*} t \\y(t) &= y(0) + \frac{p_y}{m^*} t \\z(t) &= z(0) + \frac{\epsilon(t) - \epsilon(0)}{eE}\end{aligned}\tag{4.16}$$

com a mudança da energia dada por:

$$\epsilon(t) - \epsilon(0) = \frac{p^2(t)}{2m^*} - \frac{p^2(0)}{2m^*}\tag{4.17}$$

onde assumimos que o campo elétrico não varie no intervalo $[0, t]$ [13].

4.3.4 Determinação do Tempo Livre

A determinação do tempo livre é um parâmetro importante para obter uma eficiente implementação do algoritmo, por este motivo alguns métodos foram introduzidos:

- Técnica do Auto Espalhamento;
- Técnica do Tempo Constante;

Em ambos os métodos estas técnicas introduzem erros devido ao fato de que as equações do movimento são resolvidas durante intervalos de tempo Δt com um campo elétrico estático. Por sua vez a técnica de auto espalhamento é dividida em três esquemas:

- Esquema do Gamma Constante;
- Esquema do Gamma Constante Seccional;
- Esquema do Gamma Individual;

A depender da escolha da técnica utilizada, pode-se ter um aumento do tempo de operação da CPU da máquina ou uma diminuição da porcentagem dos mecanismos de espalhamento real [55]. Para a nossa simulação usaremos a Técnica do Auto Espalhamento no esquema do Gamma Constante que apresentaremos a seguir [56].

Seja $\Gamma(\vec{k}(t))$ a probabilidade de espalhamento em um intervalo de tempo Δt em torno de um tempo total t , neste caso $\Gamma(\vec{k}(t))$ é a taxa de espalhamento de um elétron ou buraco com vetor de onda $\vec{k}(t)$. A probabilidade em que a partícula não sofra colisão em um intervalo de tempo Δt pode ser expressa como [57]:

$$P(t)dt = \Gamma(\vec{k}(t)) \exp\left[-\int_0^t \Gamma(\vec{k}(t')) dt'\right] dt\tag{4.18}$$

Usando a aproximação Monte Carlo teremos,

$$\int_0^{R_n} P(t)dt = R_n\tag{4.19}$$

ou

$$R_n = \int_0^{t_f} \Gamma(\vec{k}(t)) \exp\left\{-\int_0^t \Gamma(\vec{k}(t')) dt'\right\} dt \quad (4.20)$$

simplificando:

$$R_n = 1 - \exp\left(-\int_0^{t_f} \Gamma(\vec{k}(t)) dt\right) \quad (4.21)$$

Para encontrarmos a solução vamos introduzir o conceito de auto-espalhamento definindo uma nova taxa

$$\Gamma \equiv \sum_{i=1}^n \Gamma_i(\vec{k}(t)) + \Gamma_{self} \quad (4.22)$$

onde a soma em i é sobre a taxa de todos os mecanismos de espalhamento. O Γ_{self} é um espalhamento fictício chamado de auto-espalhamento e não causa um espalhamento real. Com esta escolha teremos:

$$R_n = 1 - \exp\left(-\int_0^{t_f} \Gamma dt\right) = 1 - e^{-\Gamma t_f} \quad (4.23)$$

reorganizando,

$$t_f = \frac{-1}{\Gamma} \ln(1 - R_n) \quad (4.24)$$

Esta expressão é usada para calcular o tempo livre no qual o elétron é acelerado pelo campo elétrico. A depender do valor do espalhamento fictício uma pequena fração dos elétrons não sofrerá espalhamento real, eles simplesmente continuarão sendo acelerados pelo campo elétrico.

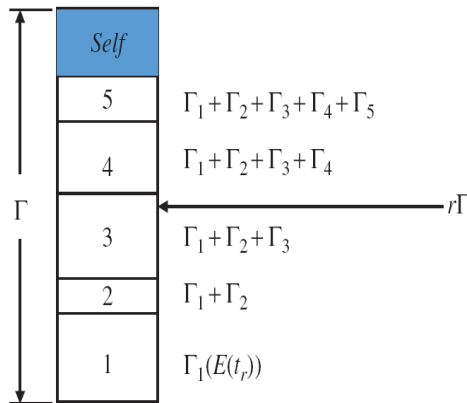


Figura 4.7: Esquema da Técnica do Gamma Constante. Durante a simulação um número randômico r é escolhido e multiplicado pelo taxa de espalhamento total, Γ . Após isso o programa seleciona entre todos os mecanismos de espalhamento quais taxas representa o produto $r\Gamma$.

Durante a simulação o valor de Γ_{self} deve ser escolhido de maneira a que Γ seja constante para qualquer valor de energia, por isto a nomenclatura de Técnica de Gamma Constante.

4.3.5 Natureza do Evento de Espalhamento

Após o tempo t_f , as propriedades dos elétrons são adaptadas. Isto requer o conhecimento do mecanismos de espalhamento envolvido na colisão. Para isto é gerado uma sequencia de números randômicos que obdeçam a inequação:

$$\Lambda_{n-1}(\mathbf{k}) < R_n \leq \Lambda_n(\mathbf{k}) \quad (4.25)$$

com

$$\Lambda_n(\mathbf{k}) = \frac{\sum_{i=1}^n \Gamma_i(\vec{k}(t))}{\Gamma} \quad (4.26)$$

que é a soma sucessiva das taxas de espalhamento normalizadas a Γ .

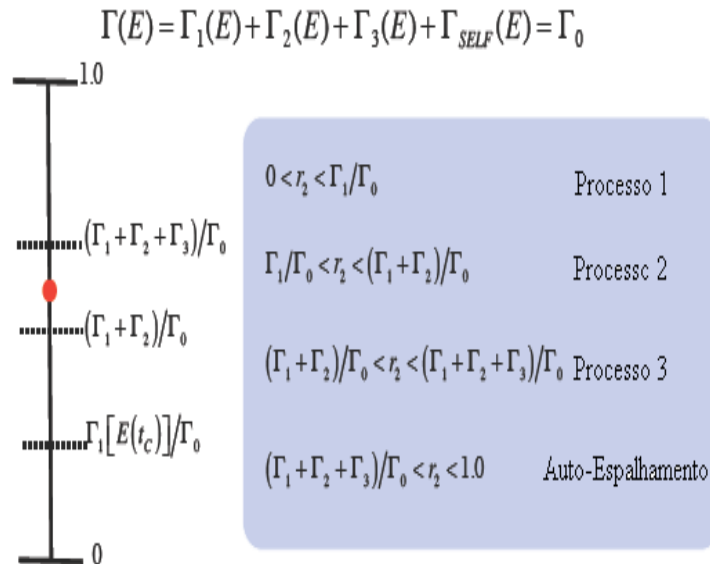


Figura 4.8: Seleção do Mecanismo de Espalhamento após um tempo t_f de percurso do elétron.

O mecanismo de espalhamento é selecionado se o número randômico gerado estiver dentro do intervalo do respectivo processo de espalhamento, caso contrário é selecionado outro número randômico e retomado a seleção.

4.3.6 Energia e Momento Após o Espalhamento

Após indentificado o mecanismo de espalhamento teremos que determinar a energia e momento do elétron após o evento. Desde que o tempo de espalhamento é assumido ser zero, a posição do elétron não é afetada pelo espalhamento. O processo de espalhamento é quem determina a variação da energia do portador. Para os tipos de espalhamento mais comuns temos:

- Impureza ionizada: $\Delta E = 0$
- Espalhamento Por Ligas: $\Delta E = 0$

- Fônon ótico Polar: $\Delta E = \pm \hbar \omega$
- Fônons Acústicos: $\Delta E \approx 0$

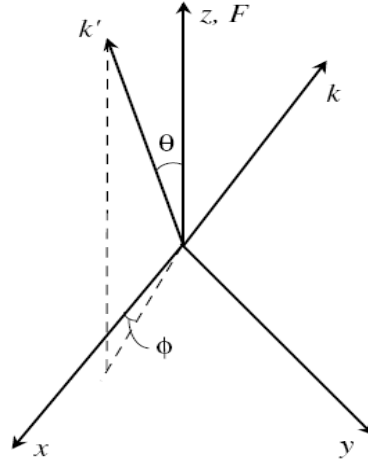


Figura 4.9: Sistemas de Coordenadas usadas no Método Monte Carlo.

A adaptação do momento requer outra geração de números randômicos. Para isto vamos considerar que as componentes do vetor de onda estejam localizadas em uma esfera de raio unitário centrada na localização do espaço onde ocorre o espalhamento. Em coordenadas esféricas os ângulos azimutal ϕ e o ângulo polar θ precisam ser determinados, para identificar qualquer ponto na esfera.

A probabilidade de selecionar um ponto na esfera num elemento ds na superfície é igual a $ds/4\pi$ desde que em coordenadas esféricas $ds = \sin(\theta)d\theta d\phi$ então:

$$\frac{ds}{4\pi} = \frac{\sin(\theta)}{4\pi} d\theta d\phi = P(\theta, \phi) d\theta d\phi \quad (4.27)$$

onde

$$P(\theta, \phi) = \frac{\sin(\theta)}{4\pi} \quad (4.28)$$

é a densidade de probabilidade. As densidades de propabilidade separadas para os dois ângulos são independentes.

$$P(\theta) = \int_0^{2\pi} P(\theta, \phi) d\phi = \frac{\sin(\theta)}{2} \quad (4.29)$$

$$P(\phi) = \int_0^{\pi} P(\theta, \phi) d\theta = \frac{1}{2\pi}$$

Utilizando o principio de monte carlo, os valores de θ e ϕ podem ser encontrados gerando dois números randômicos com:

$$\begin{aligned} \phi &= 2\pi r_1 \\ \cos(\theta) &= 1 - 2r_2 \end{aligned} \quad (4.30)$$

Então, as componentes de \vec{k} podem ser encontradas usando coordenadas cartesianas. A seleção do ângulo polar não é a mesma para os mecanismos de espalhamento, se o

processo de espalhamento não for randomizado, é necessária a utilização de algumas aproximações para o ângulo de espalhamento.

Como exemplo, para o espalhamento por impureza ionizada, o ângulo polar pode ser dado por:

$$\cos(\theta) = 1 - \frac{2(-R_n)}{1 + 4\frac{\epsilon}{\epsilon_\beta}R_n} \quad (4.31)$$

com

$$\epsilon_\beta = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m^*} \quad (4.32)$$

e

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (4.33)$$

onde λ é inverso do comprimento “screening”. Outras expressões podem ser encontradas na literatura [12], [47], [58] para diferentes tipos de espalhamento.

4.3.7 Valores Médios das Partículas

O tratamento descrito até agora foi para uma simples partícula. Este processo é conhecido com Método de Monte Carlo Simples (MCS). Para um conjunto de partículas o método é chamado de Ensemble Monte Carlo.

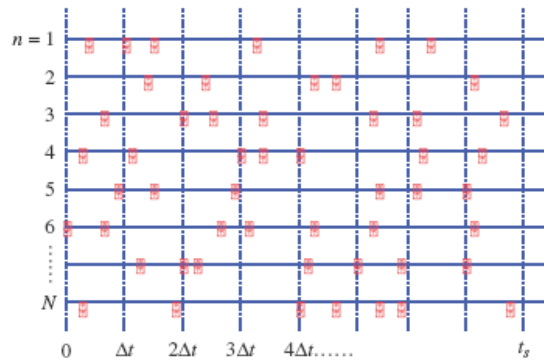


Figura 4.10: Aplicação do Ensemble Monte Carlo para um conjunto de partículas. A cada intervalo de tempo Δt é simulado um número N de partículas.

A única diferença está no cálculo dos valores finais de energia do sistema de partículas, pois o MCS é aplicado a cada partícula no sistema durante o tempo de simulação total. Os valores médios são obtidos considerando que a velocidade instantânea no semiconductor sujeito a um campo aplicado será dado por:

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \quad (4.34)$$

Entretanto, a velocidade média durante o tempo t pode ser escrita como,

$$\langle \vec{v} \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta E_{\vec{k}}}{\Delta \vec{k}} \quad (4.35)$$

onde $\Delta E_{\vec{k}}$ e $\Delta \vec{k}$ são pequenos incrementos da energia e consequentemente do vetor de onda do portador durante zero até o tempo total t . A energia média durante o tempo de simulação total pode ser calculada a partir de

$$\langle E \rangle = \frac{1}{t} \sum \langle E_{\Delta t} \rangle \Delta t \quad (4.36)$$

com

$$\langle E_{\Delta t} \rangle = \frac{E_i + E_f}{2} \quad (4.37)$$

onde E_i e E_f são as energias iniciais e finais dos portadores respectivamente. A soma precisa ser feita sobre todos os tempos livres.

4.4 Aplicação do Método Monte Carlo

Como uma primeira aplicação do método Monte Carlo em semicondutores, vamos obter as taxas de espalhamento para o arseneto de gálio utilizando um número reduzido de partículas, 10 mil. Normalmente para obter resultados confiáveis é necessária a simulação de 80 a 100 milhões de eventos de espalhamento, mas como estamos interessados em uma forma didática para verificação da rotina implementada, 10 mil partículas é suficiente. Os resultados para o GaAs ou Si já são bastante conhecidos [12] [59] [60] servindo-nos apenas para uma comparação dos nossos resultados.

Na Figura 4.11 abaixo, temos uma demonstração em duas dimensões do Método Monte Carlo onde foi adotado unidades arbitrárias. Em (a) temos o momento do elétron no espaço do vetor de onda da partícula sujeito a uma força elétrica orientada na direção x . Em (b) temos o percurso do elétron dentro do cristal. Observe que apesar do movimento de deriva, ele percorre uma distância dx a partir da posição inicial. Este processo é parecido com o problema da caminhada aleatória na Mecânica Estatística que também pode ser resolvido pelo Método Monte Carlo. Em (c) temos a velocidade média da partícula obtida em função do tempo de simulação. A seção esquerda da curva ($t < 12$) é obtida pela simulação das partes (a) e (b) da figura.

Para tempos longos ($t > 12$ na Figura 4.11c) a velocidade de deriva aproxima-se para um valor médio. Esta aproximação também pode ser obtida aumentando o número de partículas na simulação mantendo um tempo total fixo para cada uma delas, como apresentado na Figura 4.12.

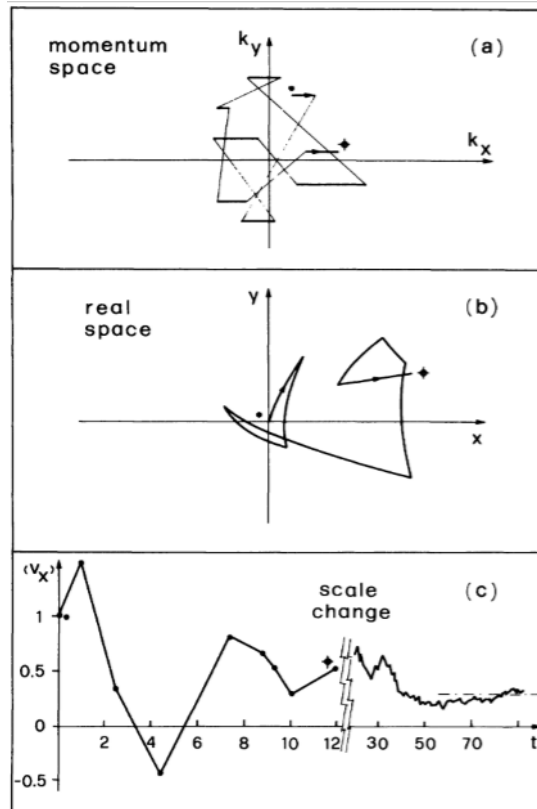


Figura 4.11: Princípio do Ensemble Monte Carlo. Em (a) a simulação das N partículas, no espaço do vetor de onda \vec{k} , sujeito a um campo elétrico na direção positiva do eixo x . Os segmentos escuros são devido ao efeito do campo durante o voo livre. As curvas representam variações descontínuas do vetor de onda devido aos processos de espalhamento. Em (b) o caminho da partícula no espaço real. Ele é composto de fragmentos de parábolas que correspondem à cada voo livre na parte (a) da figura. Em (c) a velocidade média da partícula em função do tempo de simulação. Todas as unidades são arbitrárias (Extraído da Referência [12]).

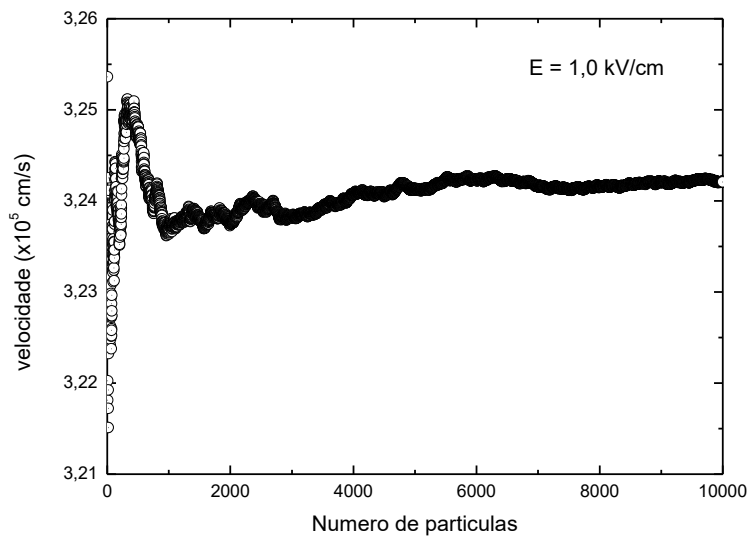


Figura 4.12: Velocidade de deriva obtida para o GaAs, pelo método Monte Carlo, para 10^4 partículas, mantendo o tempo de simulação fixo e para um campo elétrico aplicado de $E = 1,0 \text{ kV/cm}$.

Desta forma, obtemos por manter o tempo de simulação livre, pois a velocidade de deriva atingia um valor constante para as 10^4 partículas. O primeiro resultado obtido apresenta um comportamento típico para o GaAs tipo n (Figura 4.14) onde temos uma distinção na transição entre vales. Os parâmetros físicos utilizados na simulação encontram-se listados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Parâmetros físicos utilizados na simulação teste.

Material	GaAs
Massa Efetiva (m^*/m_0)	0,067
Gap (eV)	1,424
Concentração de Impurezas ionizadas (m^{-3})	$8,0 \cdot 10^{23}$
Concentração de Impurezas neutra (m^{-3})	$1,0 \cdot 10^{18}$
Constante dielétrica estática	12,9
Constante dielétrica no infinito	10,92
Densidade de massa (g/cm^3)	5,37
Frequência do fônon acústico (rad/s)	$4,5 \cdot 10^{13}$
Potencial de deformação acústico (eV)	7,0
Potencial de deformação intervala (V/cm)	$1,0 \cdot 10^9$
Velocidade acústica longitudinal (cm/s)	$5,22 \cdot 10^5$
Diferença entre Vales (X- Γ)	0,48
Massa efetiva do vale superior	0,58
Parâmetro de não parabocidade do vale Γ	0,576

Em campos elétricos baixos ($< 2,0 \text{ kV/cm}$) o elétron tem massa efetiva baixa e reside no vale Γ . Quando sua energia cinética for superior a energia de separação entre os vales, o elétron passa a ocupar o vale X , com massa efetiva maior representado pela queda na curva da Figura 4.13.

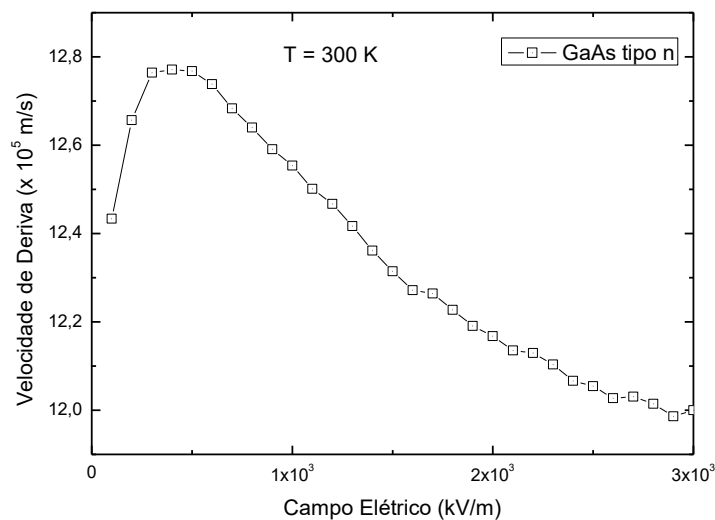


Figura 4.13: Velocidade de deriva obtida a partir do Método Monte Carlo em função do campo elétrico aplicado.

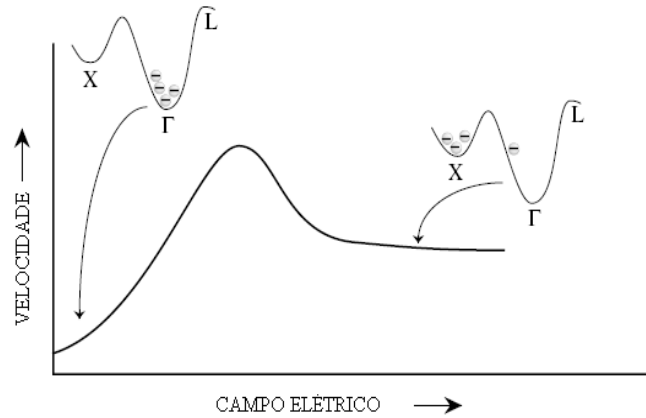


Figura 4.14: Transição Intervalos para o GaAs (Extraído da Referência [47]).

A energia de separação entre os vales Γ e X é da ordem de $0,48 \text{ eV}$. Na Figura 4.15 temos um resultado típico do método Monte Carlo para alguns semicondutores, sem impurezas ionizadas.

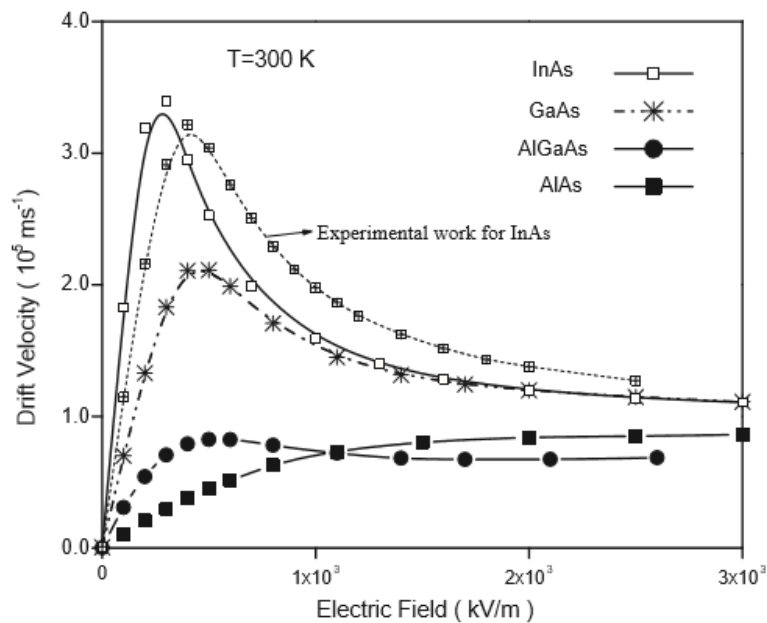


Figura 4.15: Velocidade média eletrônica para alguns semicondutores em função do campo elétrico aplicado. (Extraída da Referência [61]).

Com o crescimento do campo elétrico a porcentagem de cada mecanismo de espalhamento sofrido pelo elétron irá mudar. A baixos campos, predomina o espalhamento por emissão intervalo (aproximadamente 40% do espalhamento total) e diminui com o aumento da energia, dando lugar ao espalhamento por emissão de fônons óticos, chegando a 45% do total (Figura 4.16). Para o GaAs nós encontramos uma pequena porcentagem para o espalhamento por fônons acústicos ($< 2\%$). Isto é ocasionado devido ao valor da taxa de espalhamento ser a menor entre os calculados (em torno de 10^{11} s^{-1} a 300K) como ilustrado na Figura 4.17.

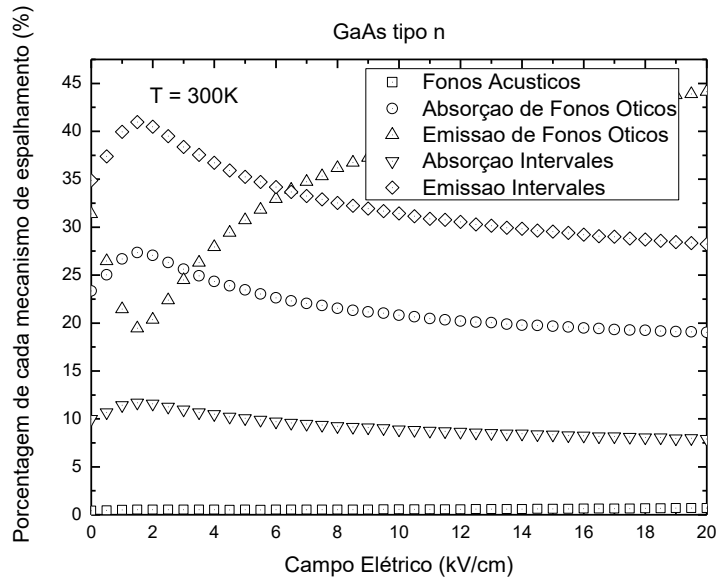


Figura 4.16: Porcentagem de cada mecanismo de espalhamento para o GaAs tipo *n* a 300 K.

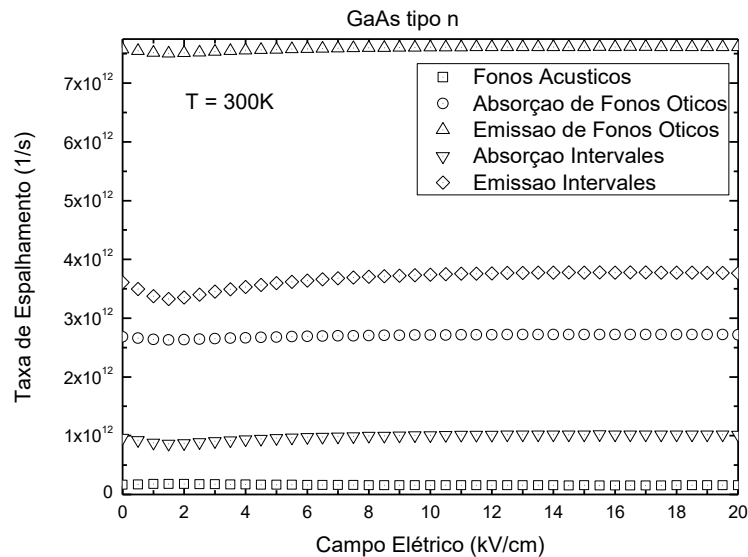


Figura 4.17: Valores das taxas de espalhamento calculadas a partir do método Monte Carlo.

Como a taxa de espalhamento por fônons acústicos ser baixa, o tempo livre médio que o elétron irá percorrer será maior do que os outros mecanismos de espalhamento, gerando assim uma diminuição da probabilidade do seu acontecimento, tendo maior probabilidade de ocorrência aqueles que têm maior taxa de espalhamento. Com a redução da temperatura, o comportamento da energia média dos elétrons muda, passando a ter uma pequena variação durante a simulação, ocasionada pelo predomínio de um único mecanismo de espalhamento, como pode ser observado na Figura 4.18.

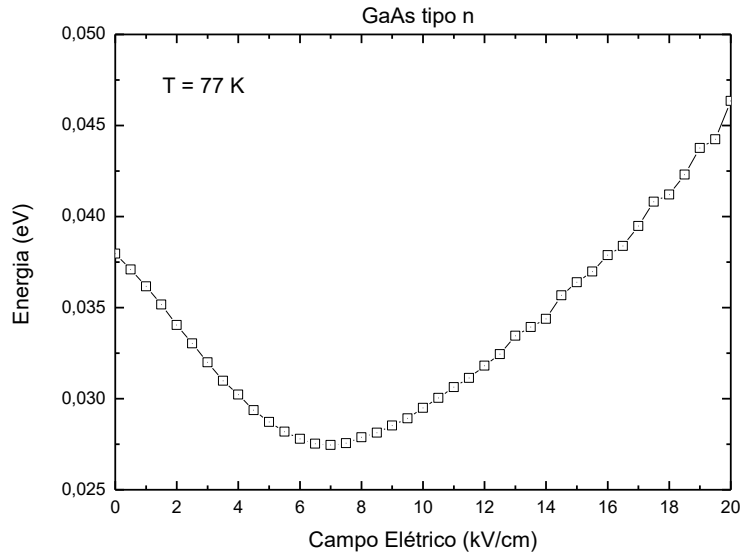


Figura 4.18: Energia média eletrônica para o GaAs em função do campo elétrico a 77K.

A Figura 4.18 indica que, para uma temperatura de 77K, os elétrons não têm energia cinética inicial suficiente para realizar transições intervalas, ou seja, em temperatura ambiente, a energia dos elétrons têm forte dependência com a temperatura ficando assim sujeitos a espalhamento por fônons da rede. Nesse processo, a emissão de fônons predomina, chegando a aproximadamente 90% do total dos mecanismos de espalhamento, como pode ser comprovado na Figura 4.19.

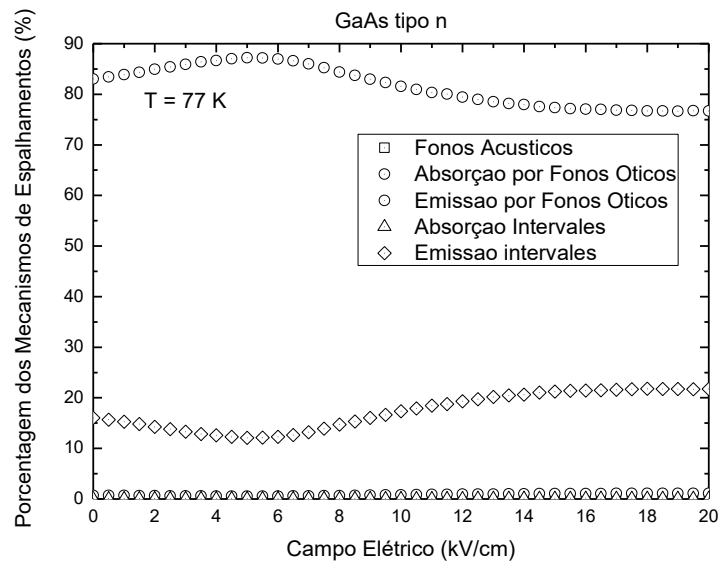


Figura 4.19: Porcentagem de cada Mecanismo de espalhamento a 77 K para o GaAs tipo n.

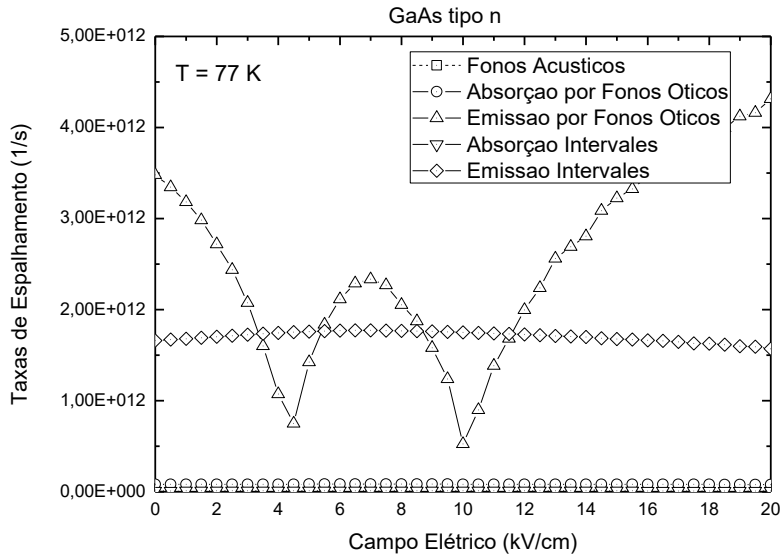


Figura 4.20: Taxas de Espalhamento a 77K para o GaAs tipo n.

A taxa de espalhamento, por sua vez, apresenta um comportamento singular nos valores da taxa de espalhamento com variações decorrente do processo de absorção de fônons, ou seja, na região de 0 a 4kV e de 5 a 10 kV ocorre uma redução do seu valor provocada pelo aumento da taxa de absorção dos fônons, como pode ser visto na Figura 4.20. Para obter outros resultados realizamos novos conjuntos de medidas com adição de impurezas ionizadas e neutras.

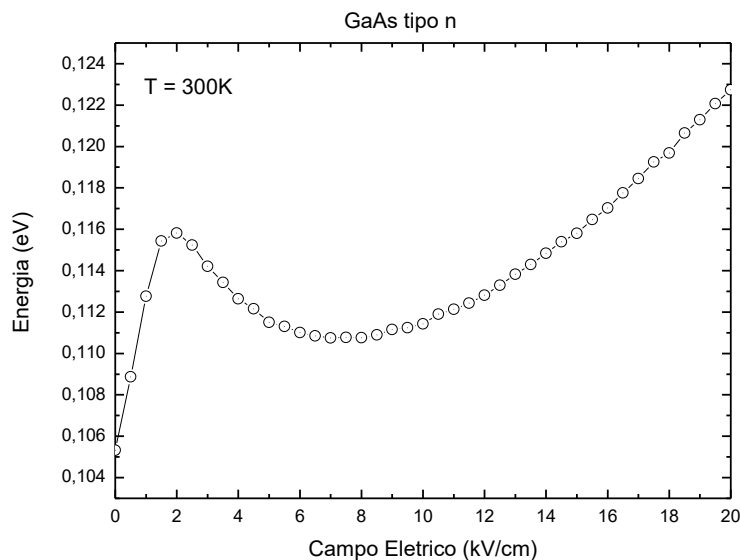


Figura 4.21: Energia eletrônica média para o GaAs em função do campo elétrico com um total de $8 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ impurezas.

A energia dos elétrons continuou a apresentar a variação típica de transição intervalar (Figura 4.21), mas à medida que o campo aumenta passou a ter um comportamento quase linear. Isto é ocasionado pela compensação entre taxas de espalhamento por impureza ionizada e emissão fônons. O espalhamento por impurezas

ionizadas é o predominante entre os outros tipos de espalhamento para a região do campo elétrico escolhido, e diminui à medida que o campo elétrico aumenta (Figuras 4.22 e 4.23).

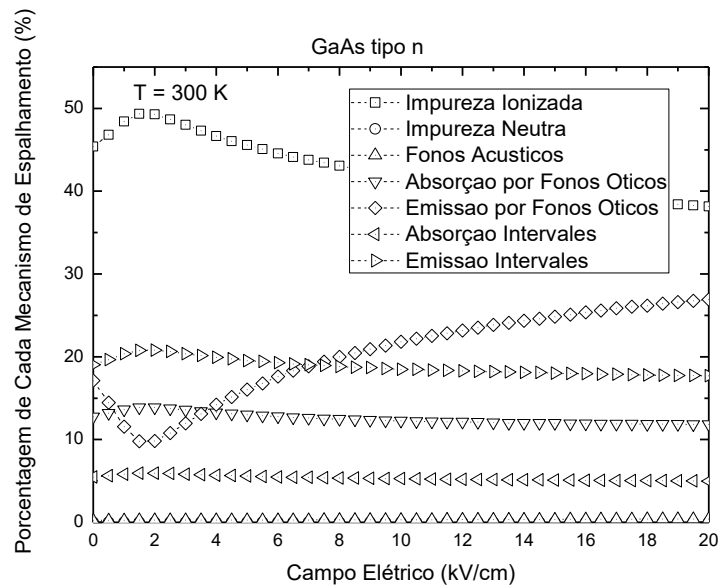


Figura 4.22: Porcentagem de cada mecanismo de espalhamento para o GaAs em função do campo elétrico com um total de $8 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ impurezas.

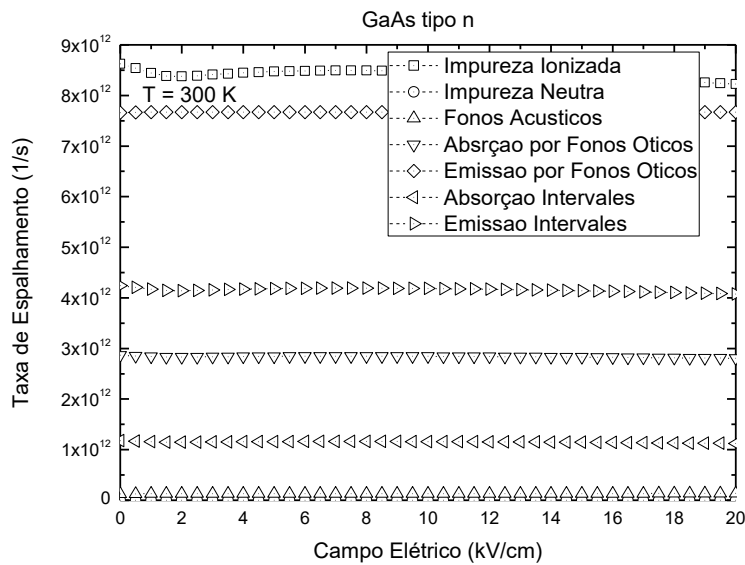


Figura 4.23: Taxas de espalhamento para o GaAs tipo n em função do campo elétrico com um total de $8 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ impurezas.

Os resultados apresentados foram obtidos com um programa implementados em linguagem Fortran e a rotina necessita do conhecimento de outros parâmetros físicos do semiconductor como potenciais de deformação intervalos e acústicos, constante dielétrica estática e no infinito, densidade de massa, parâmetro de não-parabolicidade, massa efetiva, etc. [12] que podem ser obtidos a partir de programas comerciais ou por medidas específicas de outros autores. Uma vantagem do método Monte Carlo é investigar

amostras depositadas sobre substratos metálicos ou semicondutores de filmes finos, como nas amostras de *CuO* ou *CIS*. Nesses casos a determinação da mobilidade pela medida Hall torna-se impraticável devido a uma possível influência do substrato. Portanto, quando tratamos de semicondutores em multicamadas, alguns métodos perdem sua aplicabilidade. Assim iremos analisar uma possível modificação na determinação das propriedades elétricas destes semicondutores utilizando as correntes de Foucault, que é um método de medida de condutividade sem contato.

5. *Correntes de Foucault*

Corrente de Foucault (ou ainda **correntes parasitas**) é o nome dado à corrente induzida em um condutor quando o fluxo magnético através de uma amostra de material condutor varia. O nome foi dado em homenagem **Jean Bernard Léon Foucault** (1819–1868), um físico e astrônomo francês mais conhecido pela invenção do pêndulo de Foucault, um dispositivo que demonstra o efeito da rotação da Terra. Em alguns casos a corrente de Foucault pode produzir resultados indesejáveis, como a dissipação por efeito Joule. Estas perdas são de extrema importância na fabricação dos transformadores, motores e outros equipamentos que funcionem em corrente alternada, o que leva a construção de núcleos laminados separados por material isolante extremamente fino, no intuito de interromper a geração destas correntes e reduzir a perda de energia.

Atualmente as correntes de Foucault são utilizadas na geofísica para determinar a condutividade e profundidade do solo, mapeamento terrestre, detecção de falhas em tubos, aquecedores indutivos. Na detecção de falta de homogeneidade no material tais como: trincas, deformações, inclusões, variações de espessura, corrosão, etc. E ainda medir espessura ou variação de espessura de camada não condutora aplicada em material condutor ou camada condutora aplicada em material de condutividade diferente. Além de detectar variações associadas à condutividade do material, falta de homogeneidade em ligas, superaquecimento local, erros de tratamento térmico, freios elétricos, etc. e variações associadas à permeabilidade magnética, por meio de medição das intensidades dos campos magnéticos. Ela é considerada como uma técnica de ensaios não destrutivos END (NDE em inglês).

Em virtude desta variedade de aplicações, iremos verificar sua possível utilização na determinação de propriedades elétricas em óxidos semicondutores de filmes finos sem a necessidade de contatos elétricos. Os métodos existentes de medidas como efeito Hall [33] e Teorema de Van der Pauw [32], utilizam de contatos soldados na amostra. O processo de soldagem dos contatos torna-se complicada quando se trata de óxidos semicondutores, pois fica mais difícil obter contatos ôhmicos, introduzindo assim, erros na medida. Outra possibilidade oferecida pelo método proposto é de efetuar a medida de condutividade em função da profundidade no filme que pode ser composto de várias camadas de materiais diferentes. Outros métodos existentes como Haynes-Shockley [24], espectroscopia de impedância [62], também necessita de contatos ou de configurações específicas dos semicondutores, como wafes, barras, etc. Para realizar nosso estudo partimos inicialmente da teoria clássica que envolve as equações de Maxwell e suas principais características, a modelização a partir do potencial vetor, com o intuito na utilização de filmes com múltiplas camadas e por fim um tratamento semi-clássico e quântico a partir dos efeitos em semicondutores quando estão imerso em um campo magnético.

5.1 *Teoria Clássica*

As correntes de Foucault são geradas quando um material condutor está imerso em um campo magnético \vec{H} que varia com o tempo. Uma montagem simples para provocar esta variação está mostrada na Figura 5.1 onde é composta por uma bobina alimentada por um gerador de corrente alternada que irá produzir um campo magnético

incidente sobre o material condutor. Este campo por sua vez irá induzir uma corrente na amostra gerando assim outro campo magnético.

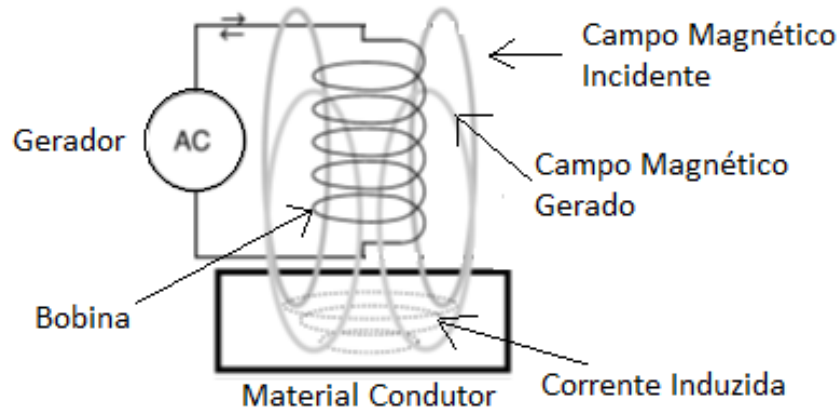


Figura 5.1: Ilustração da geração de correntes induzidas no meio condutor

Esta corrente induzida é originada por um campo elétrico \vec{E} rotacional que provoca o surgimento de uma densidade de corrente \vec{J} dada pela lei de Ohm

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (5.1)$$

em que σ é a condutividade do material, que é um escalar para materiais isotrópicos e homogêneos.

Nesta situação podemos ainda adotar as seguintes relações constituintes

$$\begin{aligned} \vec{D} &= \epsilon \vec{E} \\ \vec{B} &= \mu \vec{H} \end{aligned} \quad (5.2)$$

com \vec{D} , ϵ , e μ o vetor de deslocamento elétrico, a permissividade elétrica e a permeabilidade magnética do material condutor respectivamente e \vec{B} o vetor indução magnética. Considerando que no material não existem cargas livres, podemos escrever as equações de Maxwell como:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0 \rightarrow \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 \quad (5.3)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (5.4)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (5.5)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \sigma \vec{E} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \rightarrow \vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu \sigma \vec{E} + \epsilon \mu \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (5.6)$$

Calculando o rotacional da expressão (5.6) e utilizando a expressão (5.5) podemos mostrar que

$$\nabla^2 \vec{B} - \mu \sigma \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - \epsilon \mu \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = 0 \quad (5.7)$$

que é a equação de propagação de uma onda eletromagnética em um material absorvente [63].

De forma análoga é possível obter uma expressão para o campo elétrico. Considerando que o vetor de indução magnética necessário para gerar correntes parasitas oscila periodicamente no tempo sem propagação, poderemos escrevê-lo sob a forma:

$$\vec{B} = \vec{B}_0 e^{-i\omega t} \quad (5.8)$$

com ω a frequência de oscilação e \vec{B}_0 sua amplitude, onde a consideramos constante. Assim, a partir da equação de propagação, teremos:

$$\omega\mu(i\sigma - \omega\varepsilon)\vec{B} = 0 \quad (5.9)$$

que terá solução se e somente se $\omega = 0$ (como consideramos o campo oscilante, isto não é verdade) ou se $\omega = i\frac{\sigma}{\varepsilon}$. Neste caso a única solução real será para campos constantes no tempo, o qual pode ser aproximado para baixas frequências se a razão entre a condutividade e a permissividade do material for baixa. Fora isso, percebemos que um campo magnético oscilante no tempo dentro do material irá ter valores constantes ou irá decair exponencialmente a uma razão de ε/σ com o tempo, o que podemos considerar que existe um fator de amortecimento para as correntes induzidas. Na realidade, temos um gerador que impõe a existência de um campo oscilante e a propagação de uma onda eletromagnética pela bobina. Essa onda se propaga livremente no caso de um meio não condutor. Mas quando ela encontra o material, ela sofre uma atenuação, como também uma reflexão que vai modificar, dentro da bobina, a amplitude da corrente e sua fase em relação à fase do gerador.

5.2 Correntes de Foucault na Matéria

As equações de Maxwell expressam equações diferenciais às quais os campos elétricos e magnéticos obedecem para o eletromagnetismo. Quando o comprimento de onda da radiação incidente é muito maior que o comprimento da amostra, a corrente de deslocamento representada pela derivada de temporal de \vec{D} pode ser desprezada na equação (5.6) tornando-a em [11]:

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu\vec{J} \quad (5.10)$$

Se a indução magnética \vec{B} variar com o tempo em um condutor, pela lei de Faraday (equação 5.5), irá surgir uma densidade de corrente de magnitude e direção dado por:

$$\nabla \times \vec{J} = -\sigma \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (5.11)$$

Calculando o rotacional da expressão acima e considerando a equação 5.3 encontramos:

$$\nabla^2 \vec{J} - \mu\sigma \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} = 0 \quad (5.12)$$

Esta expressão representa uma equação de condução, parecida com a equação de condução de calor, mas usando vetores ao invés de escalares. Em coordenadas retangulares, cada componente se comporta como um escalar, mas em outros sistemas de coordenadas isto só é verdade em alguns casos especiais. Observe que a diferença da

equação (5.7) é o termo da derivada segunda que é introduzido a partir da existência do vetor deslocamento elétrico \vec{D} . Desta forma, é possível mostrar que quando incluímos a corrente de deslocamento teremos:

$$\nabla^2 \vec{J} - \mu\sigma \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \vec{J}}{\partial t^2} = 0 \quad (5.13)$$

Como geralmente iremos tratar amostras com dimensões reduzidas, a aproximação feita para obter a expressão (5.12) pode não ser válida, iremos considerar as duas situações para esta densidade de corrente gerada. Para simplificar um pouco, iremos considerar um meio que ocupe toda a região positiva do eixo z e que a densidade de corrente seja uniforme na direção do eixo x com frequência angular ω na superfície ($z = 0$), ou seja, $\vec{J} = J_x e^{-i\omega t} \hat{x}$.

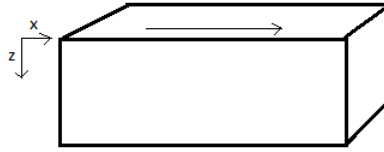


Figura 5.2: Direção da densidade de corrente induzida sobre uma amostra condutora.

Assim as expressões (5.12) e (5.13) tornam-se [64]:

$$\frac{d^2 J_x}{dz^2} = i\omega\mu\sigma J_x + \omega^2 \varepsilon\mu J_x = (\omega^2 \varepsilon\mu + i\omega\mu\sigma) J_x \quad (5.14)$$

$$\frac{d^2 J_x}{dz^2} = i\omega\mu\sigma J_x \quad (5.15)$$

As soluções destas equações diferenciais serão:

$$J_x = A e^{-(\omega^2 \varepsilon\mu + i\omega\mu\sigma)^{\frac{1}{2}} z} + B e^{(\omega^2 \varepsilon\mu + i\omega\mu\sigma)^{\frac{1}{2}} z} \quad (5.16)$$

e

$$J_x = C e^{-(i\omega\mu\sigma)^{\frac{1}{2}} z} + D e^{(i\omega\mu\sigma)^{\frac{1}{2}} z} \quad (5.17)$$

As constantes serão determinadas considerando que J_x é finito quando $z \Rightarrow \infty$ e que na superfície é constante e igual a J_0 . Assim podemos escrever:

$$J_x = J_0 e^{-(\omega^2 \varepsilon\mu + i\omega\mu\sigma)^{\frac{1}{2}} z} \quad (5.18)$$

ou

$$J_x = J_0 e^{-(i\omega\mu\sigma)^{\frac{1}{2}} z} \quad (5.19)$$

Tomando [11] $1 + i = (2i)^{\frac{1}{2}}$ podemos reescrever a densidade de corrente (com inclusão do termo oscilatório do tempo) em função de z da forma:

$$\vec{J}(z) = J_0 e^{-(\frac{1}{2}\omega\mu\sigma)^{\frac{1}{2}} \kappa z} e^{i\left[\omega t - (\frac{1}{2}\omega\mu\sigma)^{\frac{1}{2}} \kappa z\right]} \hat{x} \quad (5.20)$$

com $\kappa^2 = \left(1 - i\omega \frac{\varepsilon}{\sigma}\right)$. E, sem a inclusão do vetor de deslocamento elétrico:

$$\vec{J}(z) = J_0 e^{-\left(\frac{1}{2}\omega\mu\sigma\right)^{\frac{1}{2}}z} e^{i\left[\omega t - \left(\frac{1}{2}\omega\mu\sigma\right)^{\frac{1}{2}}z\right]} \hat{x} \quad (5.21)$$

Observe que estas soluções seriam iguais se considerarmos que o produto $\omega\sigma \gg \omega^2\varepsilon$, o que implicaria em uma das soluções da equação de propagação (eq. 5.7), onde também teríamos a condição de que $\omega \ll \frac{\sigma}{\varepsilon}$. Estes resultados mostram que a corrente cai exponencialmente e difere em fase da corrente na superfície. Para entendermos melhor o efeito da inclusão da corrente de deslocamento, iremos escrever κ na forma complexa,

$$\kappa = \alpha + i\beta \quad (5.22)$$

quadrando a expressão acima e igualando com a expressão dado por κ^2 teríamos:

$$\alpha^2 - \beta^2 = 1 \quad (5.23)$$

e

$$2\alpha\beta = -\omega \frac{\varepsilon}{\sigma} \quad (5.24)$$

isto levaria a soluções dadas por:

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{1 + \left(\frac{\omega\varepsilon}{\sigma}\right)^2} + 1 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (5.25)$$

onde assumimos apenas valores reais para α . E de maneira análoga,

$$\beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{1 + \left(\frac{\omega\varepsilon}{\sigma}\right)^2} - 1 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.26)$$

onde fica claro que se $\frac{\omega\varepsilon}{\sigma}$ for aproximadamente 0, não teríamos efeitos devido a corrente de deslocamento, e as expressões (5.20) e (5.21) seriam idênticas. A seguir, iremos abordar uma teoria que possa ser aplicada em meios com interfaces planares ou em materiais em multicamadas, onde iremos considerar que a densidade de corrente gerada irá depender da profundidade do material definida pelo eixo z e do raio ρ em coordenadas cilíndricas. Neste caso, não iremos considerar a corrente de deslocamento e vamos descrever densidade de corrente a partir do potencial vetor magnético. Esta abordagem será importante nos próximos capítulos, pois iremos determinar a mudança na impedância de uma bobina devido à presença amostra, que é a base do método das Correntes de Foucault e foi adaptada da referência [65].

5.3 Potencial Vetor no Espaço Livre

Seja uma densidade de corrente com simetria axial dada em coordenadas cilíndricas por,

$$\vec{J}(\vec{r}) = \check{J}(\rho', z') \hat{\phi}' \quad (5.27)$$

onde iremos utilizar o símbolo \vec{J} para diferenciar a densidade de corrente em coordenadas cilíndricas em relação a densidade de corrente em coordenadas retangulares \vec{J} e a linha sobre ρ' , z' e ϕ' para diferenciar o ponto da densidade de corrente em relação a outro ponto no espaço.

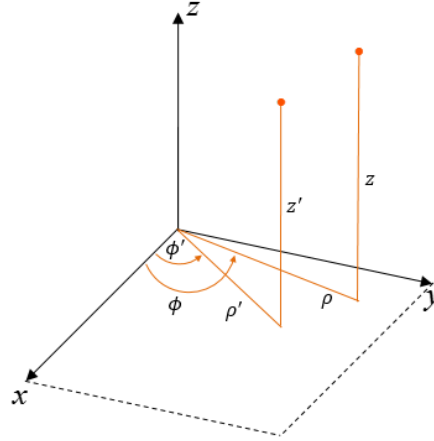


Figura 5.3: Sistema de coordenadas cilíndricas.

É possível escrever o potencial vetor a partir das equações de Maxwell, como uma solução da equação de Helmholtz [66]:

$$\vec{A}(\vec{r}) = \mu_0 \int G(\vec{r}|\vec{r}') \vec{J}(\vec{r}') d^3r' \quad (5.28)$$

sendo $G(\vec{r}|\vec{r}')$ a função de Green dinâmica dada por

$$G(\vec{r}|\vec{r}') = \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (5.29)$$

para fontes que variam harmonicamente no tempo no espaço livre. Como a densidade de corrente está em coordenadas cilíndricas precisamos escrever a função de Green nesse sistema de coordenadas. Para isto, usaremos a transformada de Fourier de uma função das duas variáveis, x e y .

4.3.1 Função de Green em Coordenadas Cilíndricas

A transformada de Fourier com respeito a x e y é dada por [67]:

$$f(u, v) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) e^{-i(ux+vy)} dx dy \quad (5.30)$$

e sua inversa

$$f(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(u, v, z) e^{i(ux+vy)} du dv \quad (5.31)$$

Assim, fazendo as substituições [68],

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \phi & y &= \rho \sin \phi \\ u &= a \cos \beta & v &= a \sin \beta \end{aligned} \quad (5.32)$$

encontramos:

$$\begin{aligned} u(x-x') + v(y-y') &= \alpha[\rho \cos(\phi - \beta) - \rho' \cos(\phi' - \beta)] \\ dudv &= \alpha d\alpha d\beta \\ \hat{\phi}' &= \hat{\phi} \cos(\phi - \phi') + \hat{\phi} \sin(\phi - \phi') \end{aligned} \quad (5.33)$$

onde podemos, mostrar por integração, que [69]:

$$G(\vec{r}|\vec{r}') = \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\alpha} e^{-\alpha|z-z'|} e^{iu(x-x')+iv(y-y')} dudv \quad (5.34)$$

O potencial vetor em coordenadas cilíndricas, \check{A} , pode ser determinado aplicando as equações (5.34) e (5.28). Logo,

$$\vec{A}(\vec{r}) = \check{A}(\vec{r})\hat{\phi} = \mu_0\hat{\phi} \int \check{G}(\rho, z|\rho', z')\check{J}(\rho', z')\rho' d\rho' dz' \quad (5.35)$$

onde

$$\begin{aligned} \check{G}(\rho, z|\rho', z') \\ = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\alpha} e^{-\alpha|z-z'|} e^{i\alpha[\rho \cos(\phi-\beta) - \rho' \cos(\phi'-\beta)]} \cdot \cos(\phi - \beta) \cos(\phi' - \beta) \alpha d\alpha d\phi' d\beta \end{aligned} \quad (5.36)$$

é a função de Green em coordenadas cilíndricas. Podemos simplificar a expressão acima chamando

$$\tilde{G}(z, z') = \frac{1}{2\alpha} e^{-\alpha|z-z'|} \quad (5.37)$$

e usando a representação integral das funções de Bessel de ordem inteiro [69]:

$$J_n(\zeta) = \frac{i^{-n}}{\pi} \int_0^{\pi} e^{i\zeta \cos(\theta)} \cos(n\theta) d\theta \quad (5.38)$$

E com a integração de (5.36) com respeito a ϕ' e a β resulta em:

$$\check{G}(\rho, z|\rho', z') = \int_0^{\infty} \tilde{G}(z, z') J_1(\alpha\rho) J_1(\alpha\rho') \alpha d\alpha \quad (5.39)$$

A equação (5.39) mostra que a função de Green dinâmica (equação 5.29) quando escrita em coordenadas cilíndricas irá depender de uma integral imprópria do produto de duas funções de Bessel de ordem 1 e de um função exponencial, cujo resultado não pode ser obtido analiticamente, mas podemos utilizar alguns métodos numéricos, como Monte Carlo ou Romberg [70], para obter um resultado aproximado. No subtítulo 4.3.2 iremos adotar estes resultados na determinação da impedância de uma bobina, que é de extrema importância no método das correntes de Foucault, pois é justamente a sua variação na presença de um meio condutor que contém as informações físicas deste.

4.3.2 Impedância de uma Bobina

Devido à simetria adotada para a densidade de corrente, os últimos resultados podem ser aplicados para descrever o potencial vetor devido a uma bobina de raio ρ_j com altura l_j , onde a densidade de corrente possa ser escrita como uma função delta, ou seja,

$$\check{J}(\rho', z') = \delta(\rho' - \rho_j) \delta(z' - l_j) \quad (5.40)$$

nesta situação podemos escrever a equação (5.35) como [65]:

$$\check{A}_j(\rho, z) = \mu_0 \int \check{G}(\rho, z | \rho', z') \check{J}(\rho', z') d\rho' dz' \quad (5.41)$$

Agora considere uma bobina, representada na Figura 5.4, que tenha simetria axial e com densidade de corrente distribuída uniformemente sobre a secção transversal da bobina onde cada volta tem a mesma fase e amplitude.

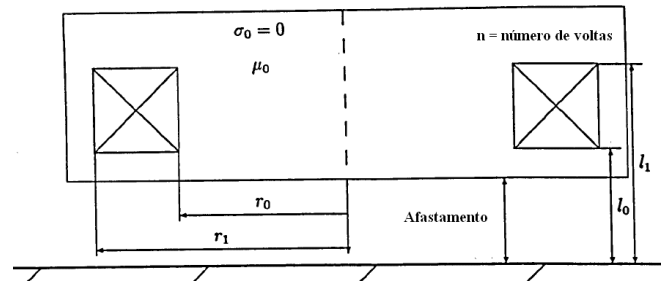


Figura 5.4: Bobina Modelo com núcleo de ar.

O potencial vetor pode ser encontrado pela superposição da expressão (5.41) e que devido às considerações adotadas, a frequência de operação da bobina deverá estar bem abaixo da frequência de ressonância, ou seja, a bobina deve ser construída de tal forma que não se comporte como um filtro passa alto. Aplicando a superposição teremos:

$$\check{A}(\rho, z) = -\mu_0 \sum_{j \in \Omega} \check{A}_j(\rho, z) = -\mu_0 \sum_{j \in \Omega} \check{G}(\rho, z | r_j, l_j) l_j r_j \quad (5.42)$$

com l_j a densidade de corrente aplicada à bobina de função delta de raio r_j . Agora vamos considerar que podemos aproximar a distribuição de corrente discreta por uma distribuição contínua e obtemos o potencial vetor para a bobina inteira:

$$\check{A}(\rho, z) = -\mu_0 \int \check{G}(\rho, z | r, l) l(r, l) dS \quad (5.43)$$

Assumindo que a bobina tem uma densidade de corrente aplicada $l_0 = \frac{In}{A_B}$ e a constante sobre as dimensões da bobina, com I a corrente total, n o número de espiras e $A_B = (l_1 - l_0)(r_1 - r_0)$ a área da bobina.

Assim,

$$\check{A}(\rho, z) = -\mu_0 l_0 \int_{r_0}^{r_1} \int_{l_0}^{l_1} \check{G}(\rho, z | r, l) r dl dr \quad (5.44)$$

Combinando as equações (5.44) e (5.39), depois de inverter a ordem de integração, obtemos:

$$\check{A}(\rho, z) = \frac{\mu_0 l_0}{2} \int_0^\infty \int_{r_0}^{r_1} \int_{l_0}^{l_1} r J_1(\alpha r) J_1(\alpha \rho) e^{-\alpha|z-l|} dl dr d\alpha \quad (5.45)$$

Integrando com respeito aos parâmetros da bobina r e l encontramos o potencial vetor $\check{A}_{acima}(\rho, z)$ para a região acima da bobina, $z > l_1$, como

$$\check{A}_{acima}(\rho, z) = -\frac{\mu_0 l_0}{2} \int_0^\infty \frac{\Psi(\alpha, r_0, r_1)}{\alpha} J_1(\alpha \rho) [e^{\alpha(l_1-z)} - e^{\alpha(l_0-z)}] d\alpha \quad (5.46)$$

onde

$$\Psi(\alpha, r_0, r_1) = \int_{r_0}^{r_1} r J_1(\alpha r) dr \quad (5.47)$$

Similarmente, para a região abaixo da bobina, $z < l_0$, teremos:

$$\check{A}_{abaixo}(\rho, z) = -\frac{\mu_0 l_0}{2} \int_0^\infty \frac{\Psi(\alpha, r_0, r_1)}{\alpha} J_1(\alpha \rho) [e^{\alpha(z-l_0)} - e^{\alpha(z-l_1)}] d\alpha \quad (5.48)$$

O potencial vetor na região $l_0 \leq z \leq l_1$ pode ser encontrado combinando os dois potenciais vetores acima resultando em [71]:

$$\check{A}_{bobina}(\rho, z) = -\frac{\mu_0 l_0}{2} \int_0^\infty \frac{\Psi(\alpha, r_0, r_1)}{\alpha} J_1(\alpha \rho) [2 - e^{\alpha(z-l_1)} - e^{\alpha(l_0-z)}] d\alpha \quad (5.49)$$

Conseqüentemente, a tensão total induzida pela bobina pode ser calculada como a soma sobre todos os loops e esta soma pode ser substituída por uma integral sobre a área transversal da bobina vezes o número de voltas. Desde que assumimos que a bobina tem um número de voltas por unidade de área constante, a tensão induzida será escrita como:

$$V_{bobina} = -\frac{2\pi i \omega n}{A_B} \int_{l_0}^{l_1} \int_{r_0}^{r_1} \rho \check{A}_{bobina}(\rho, z) d\rho dz \quad (5.50)$$

tendo a tensão induzida, obtemos a impedância da bobina a partir da expressão, $\bar{Z} = V_{bobina}/I$, o que após integrar sobre as dimensões da bobina irá resultar em:

$$\bar{Z} = -\frac{2\pi i \omega \mu_0 n^2}{A_B^2} \int_0^\infty \frac{\Psi^2(\alpha, r_0, r_1)}{\alpha} \left[(l_1 - l_0) + \frac{e^{-\alpha(l_1-l_0)} - 1}{\alpha} \right] d\alpha \quad (5.51)$$

com ω a frequência de oscilação da fonte. Observe que medindo a impedância por métodos diretos, como espectroscopia de impedância [72], e conhecendo-se os parâmetros estruturais da bobina, podemos obter a solução da integral imprópria acima, e compará-la com o valor aproximado obtido a partir do método numérico escolhido.

Este resultado é válido para o modelo de bobina escolhido e no espaço livre, mas a simples presença de um meio condutor próximo a ela causará uma variação em sua impedância devido às correntes induzidas no material. Como consequência, surgirão

outros termos na integral imprópria que conterá as informações do meio e dependerá do número de camadas existentes.

5.4 Interfaces Planares

Para iniciar nosso estudo sobre a variação da impedância de uma bobina causada pela presença de um meio condutor, iremos considerar que o mesmo é homogêneo, planar, sem falhas ou defeitos. Com esta consideração iremos abordar primeiramente um problema simples de interface planar em uma dimensão. E posteriormente iremos analisar somente as anomalias causada pelas condições de contorno entre simples regiões planares e homogêneas que possam ser comparadas com os tipos de semicondutores ao qual o trabalho estará direcionado, SnO₂:F que é depositado sobre substrato de vidro e o CIS que é formado sobre o SnO₂:F. Neste dois casos iremos considerar posteriormente que o vidro tem um condutividade nula e uma permeabilidade magnética igual ao do vácuo.

5.4.1 Interface 1D

Imagine duas regiões 0 e 1. Em cada região existe um meio associado e uma função distúrbio estacionária descrita por um potencial escalar ϕ_j , com $j = 0,1$ que satisfaz a equação:

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + k_j^2 \right] \phi_j(z) = 0 \quad (5.52)$$

onde k_j é o número de onda em cada região. A Figura 5.5 mostra a esta situação esquematicamente.

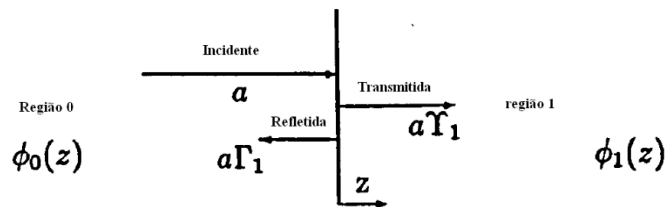


Figura 5.5: Problema unidimensional de uma interface planar

Supondo que no contorno, $z = 0$, as condições de interface serão:

$$\begin{aligned} \mu_0 \phi_0 &= \mu_1 \phi_1 \\ \frac{d\phi_0}{dz} &= \frac{d\phi_1}{dz} \end{aligned} \quad (5.53)$$

podemos obter as soluções de (5.53) da forma:

$$\phi_j = A_j e^{ik_j z} + B_j e^{-ik_j z}, \quad (5.54)$$

com A_j e B_j as amplitudes da onda incidente e refletida respectivamente. Se assumirmos que a onda incidente vindo da esquerda, com amplitude a , de uma fonte em alguma região na direção negativa de z , poderemos representar as ondas incidente e refletida pelas equações,

$$\begin{aligned}\phi_0(z) &= a[e^{-ik_0z} + \Gamma_1 e^{ik_0z}] \\ \phi_1(z) &= aY_1 e^{-ik_1z},\end{aligned}\tag{5.55}$$

com Γ_1 o coeficiente de reflexão, que descreve a magnitude e a fase da onda refletida na interface e Y_1 o coeficiente de transmissão, que reflete a magnitude e a fase da onda transmitida na interface. Para estas soluções impomos que o termo A_1 seja nulo quando z tende ao infinito para a função não divergir. Podemos determinar os coeficientes de transmissão e reflexão usando as condições de contorno na interface para o potencial escalar [73] e encontrar:

$$\begin{aligned}\mu_0(1 + \Gamma_1) &= \mu_1 Y_1 \\ \alpha_0(-1 + \Gamma_1) &= -\alpha_1 Y_1,\end{aligned}\tag{5.56}$$

onde $\alpha_j = -ik_j$. Resolvendo para os coeficientes de transmissão e reflexão, temos que

$$\begin{aligned}\Gamma_1 &= \frac{\mu_1 \alpha_0 - \mu_0 \alpha_1}{\mu_0 \alpha_1 + \mu_1 \alpha_0} \\ e \\ Y_1 &= \frac{2\mu_0 \alpha_0}{\mu_0 \alpha_1 + \mu_1 \alpha_0}\end{aligned}\tag{5.57}$$

observe que os coeficientes de reflexão e transmissão são obtidos a partir das condições impostas na interface. O passo a seguir é considerar que existam dois meios diferentes e iremos determinar a função de Green incluindo os coeficientes de reflexão e transmissão baseados na Referência [65].

5.4.2 Interface 2D

O que descreveremos a seguir é o problema tridimensional introduzindo um simples meio condutor que ocupe todo espaço em $z > 0$, x e y (região 1), com a direção positiva de z assumida pra baixo, e em $z = 0$ o topo da interface (Figura 5.6).

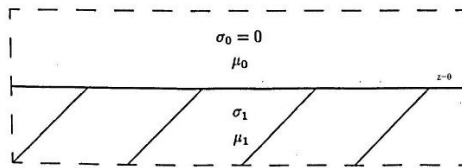


Figura 5.6: Modelo físico tridimensional.

Esta aproximação é válida somente para materiais espessos ou se a peça de trabalho tem grandes dimensões, mas servirá com base na discussão dos outros modelos físicos. Vamos assumir também que na região $z < 0$, região 0, exista o vácuo e que a função de Green satisfaz as seguintes condições:

$$\begin{aligned}(\nabla^2 + k_0^2)G_0(\vec{r}|\vec{r}') &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ (\nabla^2 + k_1^2)G_1(\vec{r}|\vec{r}') &= 0\end{aligned}\tag{5.58}$$

Com as condições de interface para a função de Green sendo as mesmas do potencial. Este problema tridimensional pode ser modificado para um problema unidimensional se utilizarmos a transformada de Fourier para o caso em coordenadas cilíndricas. Assim poderemos reescrever a equação (5.58) como sendo:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \alpha_0^2\right) \tilde{G}_0(z|z') = \delta(z - z') \quad (5.59)$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \alpha_1^2\right) \tilde{G}_1(z|z') = 0,$$

onde $\alpha_j = (\alpha^2 - k_j^2)^{\frac{1}{2}}$, $\alpha^2 = u^2 + v^2$. A forma das soluções será similar às dadas pelas equações (5.55) quando impomos as condições na interface, ou seja,

$$\tilde{G}_0(z|z') = \frac{1}{2\alpha_0} [e^{-\alpha_0|z-z'|} + \Gamma_1 e^{\alpha_0(z+z')}] \quad (5.60)$$

$$\tilde{G}_1(z|z') = \frac{1}{2\alpha_0} \Upsilon_1 e^{-\alpha_1 z - \alpha_0 z'}$$

Com a função de Green incidente dada pela expressão (5.60), B_0 e A_1 são iguais a zero, pois não haverá uma onda refletida na região zero e para que \tilde{G}_1 não tenda ao infinito quando z tender ao infinito. Assim o resultado final precisará ser modificado para conter um termo adicional dada pelo produto $\Gamma_1 e^{\alpha_0(z+z')}$ mais o termo responsável pela propagação pelo interior do meio. A seguir iremos tratar um meio com duas interfaces, que servirá como base para o tratamento nas amostras de dióxido de estanho.

5.4.3 Uma Camada Condutora

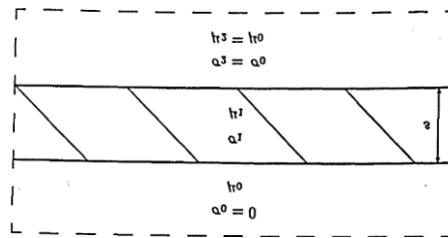


Figura 5.7: Modelo físico para camada condutora.

Suponha agora que o condutor ocupe apenas a região compreendida entre $0 \leq z \leq s$, e que para $z > s$ exista um material que tenha as propriedades próximas a da região 0 (figura 5.7), como o vidro por exemplo. Nesta situação, a função de Green obedecerá as seguintes equações:

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k_0^2)G_0(\vec{r}|\vec{r}') &= \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ (\nabla^2 + k_1^2)G_1(\vec{r}|\vec{r}') &= 0 \\ (\nabla^2 + k_0^2)G_2(\vec{r}|\vec{r}') &= 0 \end{aligned} \quad (5.61)$$

para as três regiões. Pelo procedimento adotado anteriormente, teremos as seguintes equações em coordenadas cilíndricas,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \alpha_0^2\right) \tilde{G}_0(z|z') &= \delta(z - z') \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \alpha_1^2\right) \tilde{G}_1(z|z') &= 0 \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \alpha_0^2\right) \tilde{G}_2(z|z') &= 0 \end{aligned} \quad (5.62)$$

A alteração surgiu nas condições de contorno utilizadas, pois teremos que considerar que em $z = s$ obedecerá à mesma forma dada por (5.67). Logo se as soluções das equações (5.62) são da forma:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_0(z|z') &= a[e^{\alpha_0|z-z'|} + A_0 e^{\alpha_0(z+z')} + B_0 e^{-\alpha_0(z+z')}] \\ \tilde{G}_1(z|z') &= a[A_1 e^{\alpha_1 z + \alpha_0 z'} + B_1 e^{-\alpha_1 z + \alpha_0 z'}] \\ \tilde{G}_2(z|z') &= a[A_2 e^{\alpha_0 z + \alpha_1 z'} + B_2 e^{-\alpha_0 z + \alpha_1 z'}] \end{aligned} \quad (5.63)$$

Como anteriormente, o A_0 seria igual ao coeficiente de reflexão no meio 1, A_1 agora será o coeficiente de reflexão do meio 2 e B_1 o coeficiente de transmissão do meio 1, A_2 tomaremos como nulo para não divergir no infinito e B_2 o coeficiente de transmissão no meio 2.

$$\begin{aligned} \tilde{G}_0(z|z') &= \frac{1}{2\alpha_0} [e^{-\alpha_0|z-z'|} + \Gamma_1 e^{\alpha_0(z+z')}] \\ \tilde{G}_1(z|z') &= \frac{1}{2\alpha_0} [\Gamma_2 e^{\alpha_1 z + \alpha_0 z'} + \Upsilon_1 e^{-\alpha_1 z + \alpha_0 z'}] \\ \tilde{G}_2(z|z') &= \frac{1}{2\alpha_0} \Upsilon_2 e^{-\alpha_2 z + \alpha_0 z'} \end{aligned} \quad (5.64)$$

Onde desprezamos as reflexões internas no meio 1. Aplicando as condições de interface em $z = 0$ e em $z = s$ teremos:

$$\begin{aligned} \mu_0[1 + \Gamma_1] &= \mu_1[\Gamma_2 + \Upsilon_1] \\ \mu_1[\Gamma_2 e^{\alpha_1 s} + \Upsilon_1 e^{-\alpha_1 s}] &= \mu_0 \Upsilon_2 e^{-\alpha_2 s} \\ \alpha_0[1 - \Gamma_1] &= \alpha_1[\Gamma_2 - \Upsilon_1] \\ [\alpha_1 \Gamma_2 e^{\alpha_1 s} - \alpha_1 \Upsilon_1 e^{-\alpha_1 s}] &= [-\alpha_2 \Upsilon_2 e^{-\alpha_2 s}] \end{aligned} \quad (5.65)$$

Desta forma, os coeficientes podem ser determinados resolvendo o sistema de equações. Não iremos determinar os coeficientes agora, pois faremos algumas aproximações para

utilização em semicondutores de filmes finos que tornarão este sistema de equações mais simples.

5.4.4 Duas Camadas Conductoras

Quando temos duas camadas conductoras, um de espessura l e a outra de espessura s , o processo na determinação da função de Green em cada região é o mesmo adotado anteriormente, com a diferença que aplicando as condições de interface teremos um sistema com 6 equações e 6 incógnitas a serem determinadas.

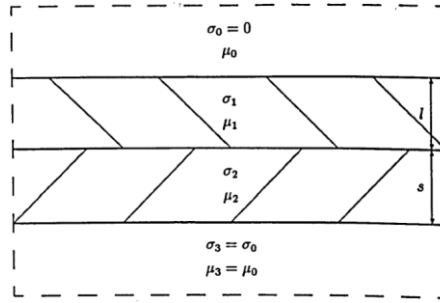


Figura 5.8: Modelo físico para duas camadas conductoras.

Assim, com os argumentos adotados anteriormente teremos as seguintes equações:

$$\begin{aligned}
 \tilde{G}_0(z|z') &= \frac{1}{2\alpha_0} [e^{-\alpha_0|z-z'|} + \Gamma_1 e^{\alpha_0(z+z')}] \\
 \tilde{G}_1(z|z') &= \frac{1}{2\alpha_0} [\Gamma_2 e^{\alpha_1 z + \alpha_0 z'} + Y_1 e^{-\alpha_1 z + \alpha_0 z'}] \\
 \tilde{G}_2(z|z') &= \frac{1}{2\alpha_0} [\Gamma_3 e^{\alpha_2 z + \alpha_0 z'} + Y_2 e^{-\alpha_2 z + \alpha_0 z'}] \\
 \tilde{G}_3(z|z') &= \frac{1}{2\alpha_0} Y_3 e^{-\alpha_3 z + \alpha_0 z'}
 \end{aligned} \tag{5.66}$$

Aplicando as condições de interface teremos:

$$\begin{aligned}
 \mu_0[1 + \Gamma_1] &= \mu_1[\Gamma_2 + Y_1] \\
 \mu_1[\Gamma_2 e^{\alpha_1 l} + Y_1 e^{-\alpha_1 l}] &= \mu_2[\Gamma_3 e^{\alpha_2 l} + Y_2 e^{-\alpha_2 l}] \\
 \mu_2[\Gamma_3 e^{\alpha_2 s} + Y_2 e^{-\alpha_2 s}] &= \mu_0[Y_3 e^{-\alpha_3 s}] \\
 \alpha_0[1 - \Gamma_1] &= \alpha_1[\Gamma_2 - Y_1] \\
 [\alpha_1 \Gamma_2 e^{\alpha_1 l} - \alpha_1 Y_1 e^{-\alpha_1 l}] &= [\alpha_2 \Gamma_3 e^{\alpha_2 l} - \alpha_2 Y_2 e^{-\alpha_2 l}] \\
 [\alpha_2 \Gamma_3 e^{\alpha_2 s} - \alpha_2 Y_2 e^{-\alpha_2 s}] &= [-\alpha_3 Y_3 e^{-\alpha_3 s}]
 \end{aligned} \tag{5.67}$$

Assim, os coeficientes de reflexão, Y , e transmissão, Γ , poderão ser determinados resolvendo este sistema de equações. O que tratamos até aqui servirá como base para determinarmos a variação da impedância de uma bobina a partir da função de Green reletida na interface, pois podemos escrever o potencial vetor como um produto desta e a

densidade de corrente. Como esta última depende apenas das características físicas da bobina, a presença de um meio condutor nas proximidades pode ser tratada como uma alteração na expressão da função de Green para o vácuo.

5.5 Aplicações em Semicondutores de Filmes Finos

A primeira abordagem do que foi descrito anteriormente será em semicondutores de filmes finos não magnéticos. Vamos adotar também que o comprimento de onda do campo magnético incidente gerado pela bobina é muito maior que as dimensões da amostra. Esta consideração teria como consequências a discriminação do termo referente à corrente de deslocamento nas equações de Maxwell. Quando não consideramos semicondutores magnéticos, podemos igualar as permeabilidades magnéticas existentes, o que simplificaria os sistemas de equações tratados anteriormente. Assim, iremos reconstruir a teoria básica descrita até aqui em função destes argumentos, analisando os efeitos devido à espessura da amostra, do tipo de portador e de uma possível utilização em fotocondução e injeção de portadores.

5.5.1 Correntes de Foucault em Semicondutores de Filmes Finos

O método das correntes de Foucault tem como princípio de funcionamento a identificação na variação da impedância de uma bobina quando ela está próxima de uma superfície condutora. A variação é causada devido ao surgimento de correntes induzidas no material e estas correntes geram um campo magnético que interage com o campo da bobina, variando sua impedância. Para bons condutores esta variação é significativa, pois o número de elétrons livres é grande. Em semicondutores, onde a concentração de portadores livres varia entre 10^{16} a 10^{21} cm^{-3} , deveremos esperar uma pequena variação, mas que pode ser identificada com o uso de equipamentos de boa qualidade, tais como osciloscópios e geradores de sinais.

Como vimos no capítulo anterior, a densidade de corrente irá oscilar com uma defasagem em relação ao campo magnético incidente e irá atenuar em função da profundidade a amostra, de uma forma exponencial, que é dada pelas equações (5.16) e (5.17) que reindexaremos aqui,

$$\vec{J}(z) = J_0 e^{-\frac{\kappa z}{\delta}} e^{i[\omega t - \frac{\kappa z}{\delta}]} \hat{x} \quad (5.68)$$

$$\vec{J}(z) = J_0 e^{-\frac{z}{\delta}} e^{i[\omega t - \frac{z}{\delta}]} \hat{x} \quad (5.69)$$

em que $\kappa^2 = \left(1 - i\omega \frac{\epsilon}{\sigma}\right)$. Além disso, definimos o termo de atenuação na expressão (5.21) como sendo a profundidade de atenuação, δ (skin depth), ou seja,

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2} \omega \mu \sigma}} \quad (5.70)$$

que tem a dimensão do inverso do comprimento. A razão z/δ traz informações sobre o quanto a densidade de corrente deverá cair à medida que a profundidade aumenta. A espessura dos semicondutores de filmes finos varia entre 0,08 e $1,2 \mu\text{m}$ e a condutividade

em torno de 10^{-6} a 10^4 (Ωcm)⁻¹ dependendo do nível de dopagem. Para uma melhor visualização vejamos como se comporta a densidade de corrente para o dióxido de estanho dopado com flúor e o disseleneto de cobre e índio cuja condutividade está em torno 5.5×10^4 (Ωm)⁻¹ [8] e 0.5×10^2 (Ωm)⁻¹ [74] respectivamente. Assim considerando apenas a expressão (5.69) teremos:

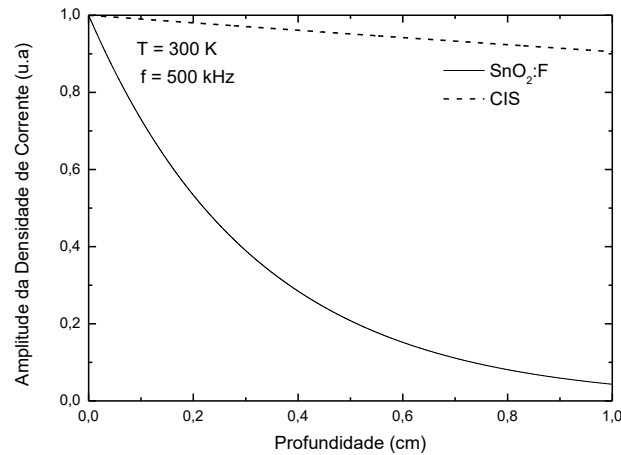


Figura 5.9: Comportamento da densidade de corrente em função da espessura das amostras a de SnO₂:F e CIS a uma frequência de 500 KHz.

Observe que devido à condutividade do dióxido de estanho (SnO₂:F) ser superior à do CIS a densidade de corrente cairá mais rapidamente. Mas como a espessura das amostras são de $0,6 \mu\text{m}$ para o SnO₂:F e de $1,2 \mu\text{m}$ para o CIS podemos considerar que não teríamos atenuação na densidade de corrente dentro do material a esta frequência se considerarmos o modelo físico de um camada condutora visto no subtítulo 5.4.2. Nesta situação, o termo oscilatório da equação 5.69 também não apresenta uma defasagem significativa na densidade de corrente da superfície $J(0)$ em relação à densidade de corrente na espessura final do semiconductor (Figura 5.10) devido à razão z/δ ser pequena nos dois casos.

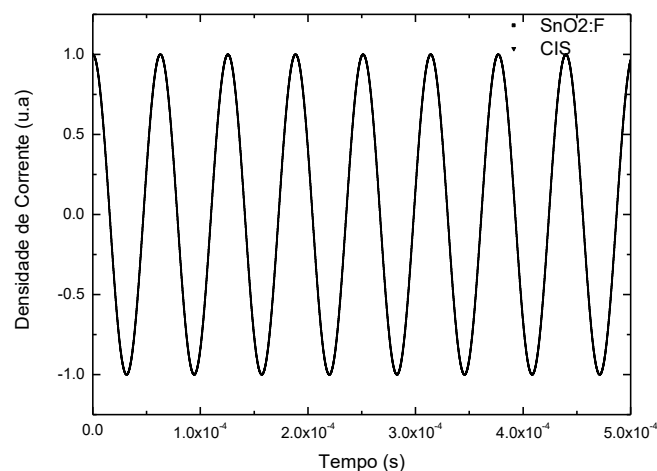


Figura 5.10: Termo oscilante da densidade de corrente em função do tempo para as amostras de dióxido de estanho e CIS em uma frequência de 500 KHz.

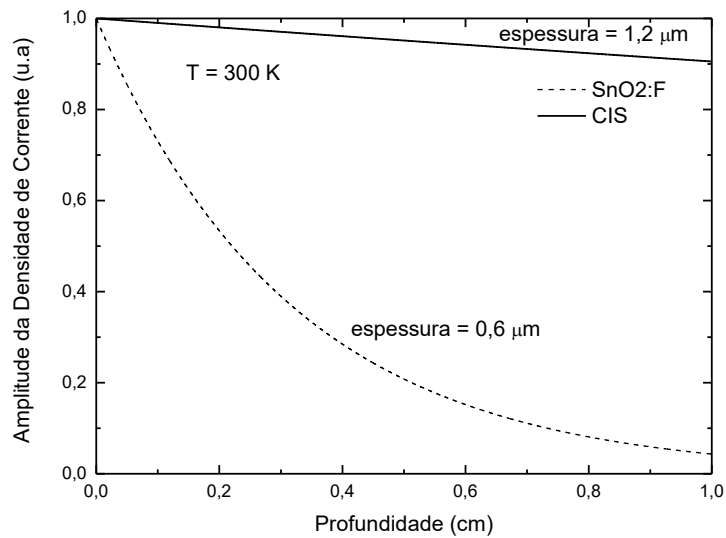


Figura 5.11: Comportamento da densidade corrente dada pela expressão 5.69 em função da espessura das amostras a uma frequência de 500 KHz.

Quando consideramos a expressão (5.68) que leva em conta o termo referente a κ , podemos reorganizar esta expressão para encontrarmos

$$\vec{J}(z) = J_0 e^{-(\alpha-\beta)\frac{z}{\delta}} e^{i\left[\omega t - (\alpha+\beta)\frac{z}{\delta}\right]} \hat{x} \quad (5.71)$$

com α e β definidos pelas expressões (5.25) e (5.26) respectivamente.

Nesta situação podemos observar na Figura 5.12 que não existe diferença significativa em relação a Figura 5.11, pois os termos $(\alpha - \beta)$ e $(\alpha + \beta)$ tem valores próximos a um para os valores da função dielétrica estática, $\epsilon(0)$, cujo valores para o SnO₂:F e CIS são 13.5 e 15.2 respectivamente [22]. Conseqüentemente também não detectaríamos uma diferença significativa na fase de oscilação da densidade de corrente.

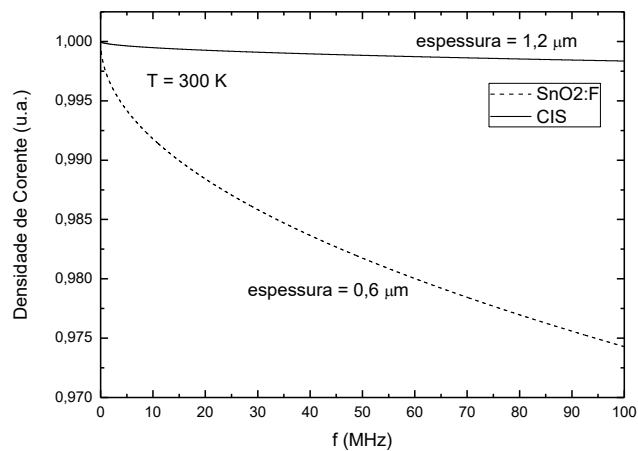


Figura 5.12: Variação da densidade de corrente em função da frequência para o SnO₂:F e CIS nas espessuras de 0,6 μm e 1,2 μm respectivamente.

Para que ocorra uma variação significativa teríamos que aumentar a frequência de oscilação da densidade de corrente na superfície de forma que o material com maior condutividade, neste caso o SnO₂:F, gerasse uma forte atenuação sobre ela. A figura a seguir apresenta este comportamento.

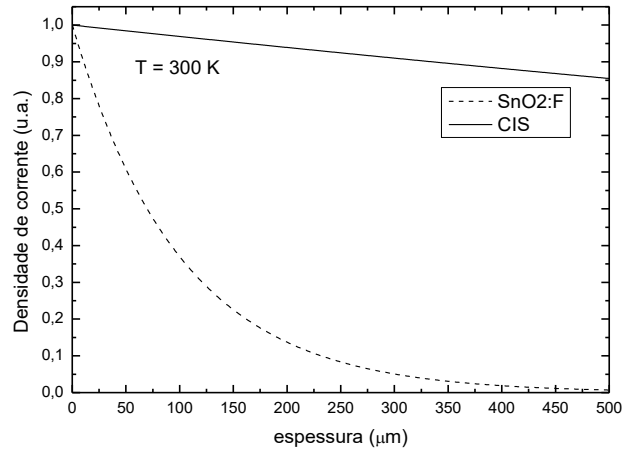


Figura 5.13: Variação da densidade de corrente em função da profundidade a uma frequência de 10 MHz.

Mesmo considerando uma frequência de 10MHz, devido as espessuras dos materiais estudados, a atenuação da densidade de corrente para o SnO₂:F ocorrerá para espessuras maiores que 450 μm. Este efeito seria mais significativo nesta escala de frequência em semicondutores com baixa condutividade como o TiO₂, por exemplo, cuja resistência está acima de 10MΩ, o que torna a medida de suas propriedades elétricas difíceis de serem realizadas. As figuras 5.14 e 5.15 demonstram este comportamento quando supomos um semicondutor cuja condutividade está em torno de $0.5 \times 10^{-6}(\Omega m)^{-1}$, com uma espessura de 80nm e $\epsilon(0) = 15.2$.

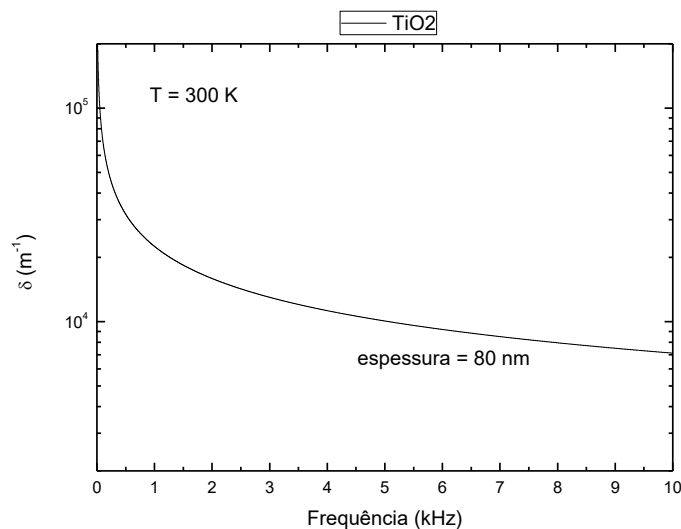


Figura 5.14: Comportamento de δ em função da frequência para um semicondutor com baixa condutividade.

Por sua vez o comprimento de atenuação, δ , tem um valor elevado em baixas frequências e decai rapidamente, já a amplitude da densidade de corrente toma valores aproximadamente constantes.

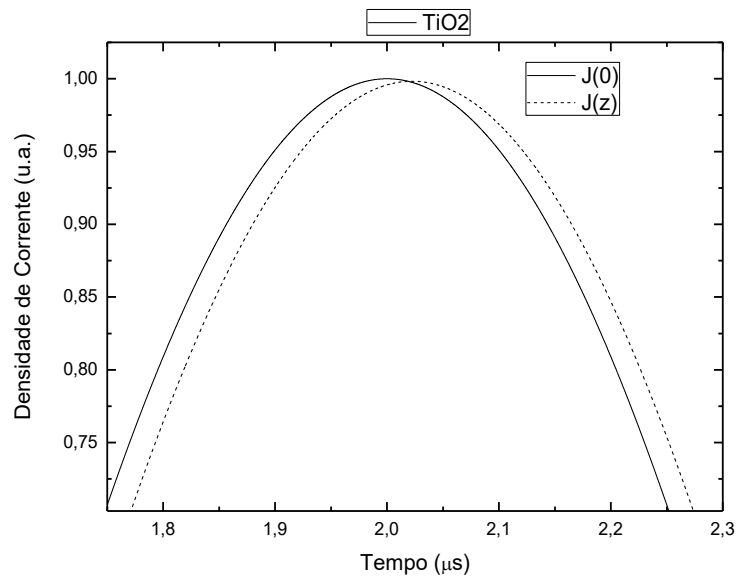


Figura 5.15: Variação da fase na densidade de corrente na superfície, $J(0)$, e para uma densidade de corrente a uma profundidade z de 80nm, $J(z)$.

Nesta situação os valores de α e β aumentam com a frequência de uma forma quase linear, o que implicaria em valores elevados para altas frequências, aumentando assim a defasagem entre a densidade de corrente na superfície $J(0)$ e a densidade de corrente a uma profundidade $z = 80 \text{ nm}$. Estes resultados nos leva a crer que o número complexo κ é de aproximadamente um para materiais com alta condutividade e diferente de 1 para materiais com baixa condutividade, quando consideramos a mesma frequência de oscilação da densidade de corrente induzida. A Figura 5.15 mostra qual seria a diferença de fase entre a densidade de corrente na superfície e a densidade de corrente a uma profundidade de 80 nm para o TiO_2 a uma frequência de 500 kHz.

Observe que apesar da espessura deste semiconductor é muito menor que a do CIS e a do SnO_2 , a baixa condutividade fornece uma variação na fase e na amplitude de forma mensurável. Assim para determinar a espessura dos filmes finos com alta condutividade teríamos que trabalhar numa escala de alta frequência de tal forma que pudéssemos detectar a variação na amplitude da densidade de corrente, mas isto não impediria de medir a condutividade do material. Uma maneira direta para verificar em qual escala de frequência seria necessária para determinar a espessura do semiconductor é observar a razão ϵ/σ , ou seja, a escala de frequência seria determinada tomando valores próximos do inverso desta razão. Mostraremos mais adiante que este valor é igual ao tempo de relaxação para os metais ou o tempo de recombinação para os semicondutores. Para melhor entender este resultado vejamos a Tabela 5.1 onde calculamos esta razão para alguns semicondutores.

Então podemos dizer que, para o arseneto de gálio, poderemos medir sua condutividade e sua espessura utilizando frequências em torno de 2 kHz, mas para

determinar a espessura de um filme fino de silício, por exemplo, teríamos que trabalhar na casa dos 30GHz o que tornaria impraticável sua medida, restando apenas a determinação da condutividade do filme. Por outro lado, esta medida em baixa frequência seria um método indireto na determinação da permissividade elétrica.

Tabela 5.1: Valores de ϵ/σ para alguns semicondutores (valores intrínsecos e a 300K).

Semicondutor	$\epsilon_r(0)$	σ (S/m)	ϵ/σ (s)
SnO₂	13.5	5.0×10^4	2.39×10^{-15}
CuInSe₂	15.2	50.0	2.69×10^{-12}
GaAs	12.8	2.38×10^{-7}	4.76×10^{-4}
Cu₂O	7.1	2.86	2.19×10^{-11}
Si	11.9	3.16	3.33×10^{-11}
Ge	16.2	2.1	6.83×10^{-11}
TiO₂*	-	-	-
PbO*	-	-	-
CuO*	-	0.55	-

A ideia exposta a seguir será uma modificação do experimento de Haynes-Shockley utilizado na determinação direta da mobilidade do semicondutor a partir da injeção de portadores, que pode ser por luz direta sobre a amostra ou oriunda de uma fonte elétrica. O objetivo será identificar uma possível variação na impedância da bobina quando aumentamos a concentração de portadores no material e medi-la diretamente com o uso de um lock-in ou de um osciloscópio.

5.6 Injeção de Portadores e Correntes Induzidas

5.6.1 Efeitos da Difusão nas Correntes Induzidas

A teoria descrita para o experimento de Haynes-Shockley no Capítulo 2 servirá com base para interpretação e introdução das correntes de Foucault. O raciocínio a seguir é considerar que as expressões para as correntes induzidas, equações (5.68) e (5.69) continuem sendo válidas e que elas obedeçam a equação de continuidade.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0 \quad (5.72)$$

Adotando a densidade de corrente dada pela equação 5.4, por ser uma expressão mais abrangente, a equação de continuidade continua sendo válida. Agora se injetarmos portadores de carga em algum ponto na superfície do semicondutor por um determinado instante de tempo t , a equação da continuidade para os portadores adicionados será:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \sigma(x, t) \cdot \vec{E}(z, t) + \sigma(x, t) \nabla \cdot \vec{E}(z, t) + e D_n \nabla \cdot \nabla n(x, t) - e D_p \nabla \cdot \nabla p(x, t) = 0 \quad (5.73)$$

com $\vec{E}(z, t) = E_0 e^{-(\alpha-\beta)\frac{z}{\delta}} e^{i[\omega t - (\alpha+\beta)\frac{z}{\delta}]}$, $\sigma(x, t) = e \mu_p p(x, t) - e \mu_n n(x, t)$ e e a carga elementar, onde escrevemos a densidade de corrente como sendo composta do movimento de deriva dos elétrons e dos buracos sujeitos ao campo elétrico induzido $\vec{E}(z, t)$ e do movimento de difusão dos portadores [29]. Para descrever a distribuição de

portadores dentro do cristal, a equação de transporte para elétrons e buracos precisa ser resolvida,

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = & -\mu_p p(x, t) \nabla \cdot \vec{E}(z, t) \\ & - \frac{\partial}{\partial x} \left[p(x, t) \mu_p e^{-(\alpha-\beta)\frac{z}{\delta}} e^{i[\omega t - (\alpha+\beta)\frac{z}{\delta}]} - D_p \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (5.74)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = & \mu_n n(x, t) \nabla \cdot \vec{E}(z, t) \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left[n(x, t) \mu_n e^{-(\alpha-\beta)\frac{z}{\delta}} e^{i[\omega t - (\alpha+\beta)\frac{z}{\delta}]} + D_n \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (5.75)$$

acoplada com a equação de Poisson

$$\nabla \cdot \vec{E}(z, t) = \frac{e}{\varepsilon} [p(x, t) - n(x, t)] \quad (5.76)$$

Visto que as expressões para os elétrons e buracos são idênticas vamos considerar a partir de agora apenas a equação dada para os buracos, e iremos reorganiza-la em termos da mobilidade e do coeficiente de difusão, pois serão os termos independentes de x . Supondo o semiconductor homogêneo e composto de apenas uma única camada, teremos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = & D_p \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} - \mu_p e^{-(\alpha-\beta)\frac{z}{\delta}} e^{i[\omega t - (\alpha+\beta)\frac{z}{\delta}]} \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \\ & - \mu_p p(x, t) \nabla \cdot \vec{E}(z, t) \end{aligned} \quad (5.77)$$

Observe que esta expressão se iguala a expressão 5.74 quando consideramos o campo elétrico induzido constante e que seja válida a relação $\vec{v} = \mu \vec{E}$. De maneira análoga, podemos escrever o terceiro termo do lado direito na equação 5.77 como um processo de recombinação dos portadores e defini-lo com sendo [75]:

$$p(x, t) \nabla \cdot [\mu_p \vec{E}(z, t)] = \frac{p(x, t)}{\tau_p} \quad (5.78)$$

Com τ_p um *novo tempo de recombinação* dos buracos. Se considerarmos que a variação do campo elétrico com z seja pequena (a exponencial igual a 1) e que podemos aproximar sua parte real como $\cos \left[\omega t - (\alpha + \beta) \frac{z}{\delta} \right]$ teremos,

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} - \mu_p \cos \left[\omega t - (\alpha + \beta) \frac{z}{\delta} \right] \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} - \frac{p(x, t)}{\tau_p} \quad (5.79)$$

que é a equação diferencial a ser resolvida. Se a injeção de portadores ocorrer num regime estacionário a expressão 5.86 se torna

$$\frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\mu_p}{D_p} \cos \left[\omega t - (\alpha + \beta) \frac{z}{\delta} \right] \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} - \frac{p(x, t)}{L_p^2} = 0 \quad (5.80)$$

com $L_p^2 = \sqrt{D_p \tau_p}$ o comprimento de difusão. Até agora não levamos em conta que o $\nabla \cdot \vec{E}(z, t)$ é nulo pela expressão dada para o campo elétrico, o que leva a inexistência do tempo de recombinação [75] e como consequência direta, a partir da equação de Poisson, um equilíbrio entre as concentrações de elétrons e buracos no semiconductor. Assim, podemos escrever a expressão geral para injeção de portadores em semicondutores de filmes finos sujeito a correntes induzidas como:

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} - \mu_p \cos \left[\omega t - (\alpha + \beta) \frac{z}{\delta} \right] \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} \quad (5.81)$$

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} - \mu_n \cos \left[\omega t - (\alpha + \beta) \frac{z}{\delta} \right] \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} \quad (5.82)$$

com

$$n(x, t) = p(x, t) \quad (5.83)$$

A seguir iremos analisar o comportamento das correntes induzidas quando os portadores são criados a partir de uma fonte luminosa. O que esperamos é que para uma mesma frequência do campo magnético incidente, poderemos verificar variações na impedância da bobina em função do comprimento de onda da luz incidente devido a variações da condutividade do material.

5.6.2 Fotocondução

Até agora supomos que os portadores são injetados no semiconductor a partir de um contato elétrico, mas para os experimentos de fotocondução e fotoacústica onde os portadores são gerados quando iluminamos o semiconductor, a partir das transições eletrônicas, deveremos levar em conta as taxas de geração e recombinação dos portadores, que iremos nomeá-las pelas letras G e R respectivamente, e que por sua vez irá depender do tipo de armadilhamento que os elétrons e buracos estarão sujeitos. Se um semiconductor sujeito as correntes induzidas for iluminado por um determinado período de tempo t deveremos ter uma contribuição na densidade de corrente dada por:

$$J = J_i + J_g \quad (5.84)$$

onde os índices i e g referem-se à corrente induzida e a corrente gerada respectivamente. Como o $\nabla \cdot J_i$ é nulo, pois consideramos o caso ideal onde as linhas de corrente são abertas, pela equação da continuidade teremos apenas o termo das correntes geradas, o que torna a equação de transporte em:

$$\frac{\partial n(z, t)}{\partial t} = G(z) - R(z, t) + \frac{\partial}{\partial z} \left[n(z, t) \mu_n E(z) + D_n \frac{\partial}{\partial z} n(z, t) \right] \quad (5.85)$$

e

$$\frac{\partial p(z, t)}{\partial t} = G(z) - R(z, t) - \frac{\partial}{\partial z} \left[p(z, t) \mu_p E(z) - D_p \frac{\partial}{\partial z} p(z, t) \right] \quad (5.86)$$

que precisam ser resolvidas junto com a equação de Poisson. Neste caso consideramos que o semiconductor é iluminado em todo o plano x, y e isto leva ao surgimento de um

campo elétrico interno $E(z)$ devido à acumulação espacial de carga [76]. Visto que esta solução é a mesma descrita para a teoria de fotocondução poderemos escrever a variação da condutividade no semiconductor como sendo [22]:

$$\Delta\sigma = e[\mu_n n(z, t) + \mu_p p(z, t)] \quad (5.87)$$

Como o método das correntes de Foucault mede variações na impedância da bobina devido à presença da amostra, poderíamos detectar também a variação devido à incidência de luz no semiconductor. Com este resultado obteríamos o valor da energia de gap do semiconductor, como fazemos normalmente nos experimentos de fotocondução. A seguir iremos realizar um tratamento semi-clássico das correntes induzidas com o intuito em obter uma expressão mais geral que leve em conta parâmetros intrínsecos do semiconductor. Isto será feito a partir da equação de Boltzmann de maneira análoga à realizada para o efeito Hall, e logo após iremos modifica-la para campos magnéticos alternados.

5.7 Descrição Semi-Clássica das Correntes de Foucault em Semicondutores

Na teoria descrita no capítulo três, encontramos uma expressão geral para a condutividade na presença do campo magnético (eq. 3.47) que demonstra uma relação direta com este e é levada em conta quando σ_0 é da ordem de β_0 e γ_0 . Caso contrário, teremos apenas a condutividade determinada pela lei de Ohm e não apresentaria os efeitos da magnetorresistência. O tratamento até aqui é válido tanto para campos estáticos quanto para campos oscilantes e a diferença proposta é substituir o campo elétrico \vec{E} por $-\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ onde \vec{A} é o potencial vetor para o campo magnético. Esta alteração servirá para a análise das correntes induzidas, pois elas são geradas diretamente a partir da lei de Faraday. Com isto, se considerarmos um campo oscilante dada pela expressão 5.8, a densidade de corrente induzida será:

$$J_i = \omega e^{i(\omega t - \frac{\pi}{2})} \left[\sigma_{ij} A_j + \sigma_{ijl} A_j \frac{\partial A_j}{\partial x_l} + \sigma_{ijlm} A_j \frac{\partial A_j}{\partial x_l} \frac{\partial A_j}{\partial x_m} \right] \quad (5.88)$$

Este resultado mostra que a densidade de corrente tem uma defasagem de $\pi/2$ em relação à oscilação da fonte e aumenta linearmente com a frequência. Outra consequência desta expressão é que se a amplitude do campo magnético oscilante for constante e em uma única direção podemos simplificar a expressão acima para:

$$J_i = \omega e^{i(\omega t - \frac{\pi}{2})} [\sigma_{ij} A_j + \sigma_{ijl} A_j^2] \quad (5.89)$$

ou seja, se o campo magnético oscila na direção z a densidade de corrente induzida terá duas componentes e será dada por:

$$\vec{J} = (\omega \gamma_0 A_y^2, \omega \sigma_0 A_y, 0) e^{i(\omega t - \frac{\pi}{2})} \quad (5.90)$$

Vimos, classicamente, que a amplitude da densidade de corrente induzida em semicondutores de filmes finos não sofre alterações significativas, isto significa que podemos determinar sua amplitude a partir da expressão acima, logo, pelo método de medida a partir das correntes de Foucault, poderemos determinar o coeficiente Hall

calculando a razão entre a densidade de corrente na direção x pelo quadrado da densidade de corrente na direção y , ou seja,

$$R_H = -\frac{J_x}{J_y^2} \omega e^{i(\omega t + \frac{\pi}{2})} \quad (5.91)$$

Desta forma, se for possível mensurar estas densidades de corrente a partir do campo magnético gerado por elas, poderemos determinar a concentração de portadores (e o tipo) no semicondutor, calculando o módulo da expressão 5.90, além da sua condutividade e como consequência direta, a mobilidade e a função dielétrica em baixa frequência a partir da eq. 5.32, considerando $\alpha = 1$.

6. Montagem Experimental

6.1 Método Monte Carlo

Pelo texto original [21] o coeficiente Hall é determinado considerando que o campo elétrico aplicado pode ser decomposto em duas componentes, a primeira na direção da velocidade de deriva dos elétrons e a segunda referente ao campo Hall, sendo este último perpendicular ao campo magnético e a própria velocidade de deriva. Nesta situação, a mobilidade eletrônica definida classicamente difere da mobilidade Hall (encontrada a partir da equação de Boltzmann) pelo fator Hall, ou seja, $\mu_H = r_H \mu$. Assim, propomos que o coeficiente Hall possa ser reescrito em termos da intensidade do campo magnético aplicado reescrevendo a equação 3.50 para:

$$\frac{1}{R_H} = \frac{(\sigma_0)^2}{\gamma_0} + \gamma_0 (B_z)^2 = -\frac{ne}{r_H} + \gamma_0 (B_z)^2 \quad (6.1)$$

onde consideramos que $\sigma_0 \gg \beta_0 B_z^2$. Esta última expressão indica uma variação linear em n cuja inclinação só depende do tipo de portador, e com os parâmetros da reta poderemos determinar σ_0 e γ_0 se medirmos o coeficiente Hall em função do campo magnético aplicado.

Vale apenas ressaltar que este efeito é mais pronunciado para campos magnéticos intensos [77] [78] visto que na maioria dos casos $\sigma_0 \gg \gamma_0$. A Figura 6.1 ilustra o resultado para uma amostra de Bismuto dopado com Gálio em diferentes temperaturas [79], onde, pode-se perceber três regiões distintas para temperaturas abaixo de 169 K que tendem a um caráter linear a medida em que a intensidade do campo magnético aumenta.

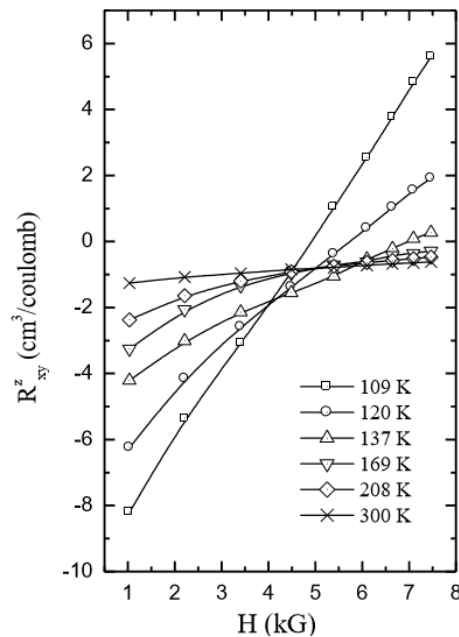


Figura 6.1: Variação do coeficiente Hall com o campo magnético para amostras de Bi:Ga em diferentes temperaturas (Extraída da referência [79]).

A equação 6.1 ainda contém duas incógnitas, r_H e γ_0 . Assim, iremos encontrar uma equação que os relacione com a condutividade do material, visto que ambas dependem do tempo de relaxação.

Sabendo que a relação entre o valor médio e o valor quadrático médio de uma medida é dada pela *dispersão*, ou segundo momento [80], que é o valor médio do desvio quadrático dado por:

$$\langle(\Delta\tau)^2\rangle = \langle\tau^2\rangle - \langle\tau\rangle^2 \quad (6.2)$$

Logo, utilizando as definições dadas para σ_0 e γ_0 (Equações 3.44 e 3.45) e reorganizando-as em função do tempo de relaxação, teremos:

$$\langle(\Delta\tau)^2\rangle = -\frac{m^{*2}}{ne^3} \left[\gamma_0 + \frac{\sigma_0^2}{ne} \right] \quad (6.3)$$

Por outro lado, se utilizarmos a definição dada para o fator Hall, $r_h = \frac{\langle\tau^2\rangle}{\langle\tau\rangle^2}$, a dispersão será escrita como:

$$\langle(\Delta\tau)^2\rangle = \langle\tau\rangle^2(r_h - 1) \quad (6.4)$$

Logo, o fator Hall vai indicar o quanto a determinação do tempo de espalhamento obtido via Monte Carlo será diferente do valor real. Sabendo que o fator Hall varia entre 1 e 2 para a maioria dos semicondutores [37] e se considerarmos que o valor médio do tempo de relaxação é em torno de 10^{-14} s, poderemos aproximar $\langle(\Delta\tau)^2\rangle \approx 0$ o que resultaria em:

$$\gamma_0 \approx -\frac{\sigma_0^2}{ne} \quad (6.5)$$

Tabela 6.1: Valores de γ_0 para alguns semicondutores em temperatura ambiente.

Semicondutor	n (m^{-3})	σ (S/m)	γ (m/ΩC)
SnO₂	2.5×10^{25}	5.0×10^4	0.6×10^3
CuInSe₂	1×10^{23}	50.0	0.16
GaAs	1×10^{13}	2.38×10^{-7}	0.35×10^{-7}
Cu₂O	2.55×10^{21}	2.86	0.02
Cu	8.49×10^{28}	56.14×10^6	0.23×10^6
Si	1.5×10^{16}	4.39×10^{-4}	0.8×10^{-4}
Si (dopado)	2×10^{22}	3200	32
Ge	2.5×10^{19}	2.1	1.1
InGaAsP	3.47×10^{23}	12.84×10^3	2.97×10^3

Esta aproximação também seria justificada quando verificamos que a razão $\frac{m^*2}{ne^3}$ é em torno de $10^{-20} \text{ kg}^2\text{m}^3\text{C}^{-3}$ para a maioria dos semicondutores. Se assumimos que a condutividade é devida apenas aos elétrons a mobilidade será dada por:

$$\mu_n = \frac{\gamma_0}{\sigma_0} \quad (6.6)$$

onde a dimensão de $1/\gamma_0$ é $[\Omega\text{C}/m] = [\Omega\lambda]$ com λ uma densidade linear de carga. A tabela a 6.1 apresenta os valores de γ_0 para alguns semicondutores obtidos a partir da expressão acima. De acordo com a tabela, γ_0 é duas vezes menor que a condutividade (para Ge) chegando a trezentas vezes (para o CuInSe_2). Isto significa que, a depender do material, a aproximação $\sigma_0 \gg \gamma_0 B_z$ não é válida na determinação do coeficiente Hall dada pela expressão 3.51, principalmente quando utilizamos campos magnéticos intensos. Assim surgirá uma dependência do coeficiente Hall com o campo magnético dada pela expressão 6.1. A figura a seguir apresenta o comportamento de R_h para o Ge com os dados da Tabela 6.1.

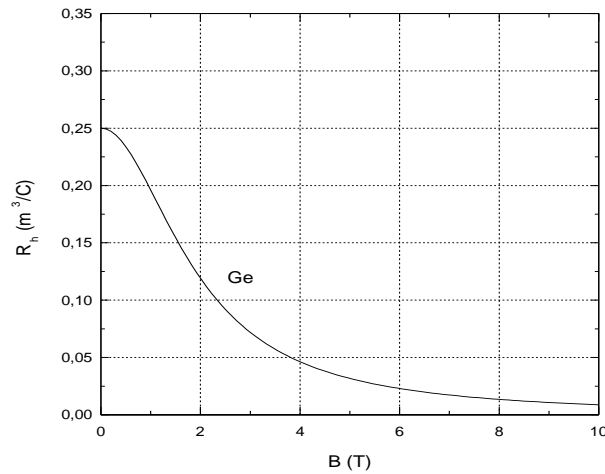


Figura 6.2: Comportamento do coeficiente Hall com o campo magnético para o germânio obtida a partir da equação 6.1.

Até agora não levamos em conta que no semicondutor podem existir os dois tipos de portadores de carga e nem uma possível dependência do tempo de relaxação com o campo magnético aplicado. Quando isto for verdade teremos uma combinação entre a resistividade linear de cargas para os elétrons e para os buracos em função do campo. Estes fatores alterariam o comportamento do coeficiente Hall com o campo aplicado, que se não levados em conta, ocasionariam erros durante a medida da concentração de portadores.

Outro ponto importante é verificar o comportamento de γ_0 com a energia do elétron. Para isto deveremos analisar os mecanismos de espalhamento predominante e determinar as taxas de espalhamento dos elétrons, visto que ele é recíproco ao tempo de relaxação. O comportamento do coeficiente hall com a temperatura assume um caráter mais complexo, visto que existem dois parâmetros dependentes da temperatura: o primeiro é a concentração de portadores, n , que depende da temperatura a partir da

distribuição de Fermi-Dirac, f_0 . O segundo é o valor médio do tempo de relaxação $\langle \tau \rangle$ cuja dependência está relacionada com o tipo de espalhamento no material, que apresentamos anteriormente.

A principal vantagem na modificação do método, é que poderemos estimar o valor de γ_0 , visto que o método Monte Carlo calcula valores individuais do tempo de relaxação e depois encontra o valor médio, sendo assim, poderemos modificar o programa para calcular o valor quadrático médio do tempo de relaxação e analisar seu comportamento em função do campo elétrico ou da temperatura, obtendo assim a mobilidade, resistividade, fator Hall e coeficiente Hall dos materiais.

6.2 Medidas de Efeito hall

A medida de condutividade e efeito Hall foi realizada variando a temperatura numa faixa entre 30 e 400 K com um criostato de ciclo fechado DE-202 da Advanced Research System (ARS) que utiliza o gás hélio a alta pressão [81]. O método de Van der Pauw é utilizado para medir a condutividade e o sistema foi montado e testado durante o trabalho de mestrado [8]. Como continuidade desde trabalho, foi adquirido um sistema de medidas Hall do fabricante Keithley no qual realiza o processo de comutação dos contatos de forma automatizada e que permite a realização de medidas simultâneas de condutividade e coeficiente Hall.

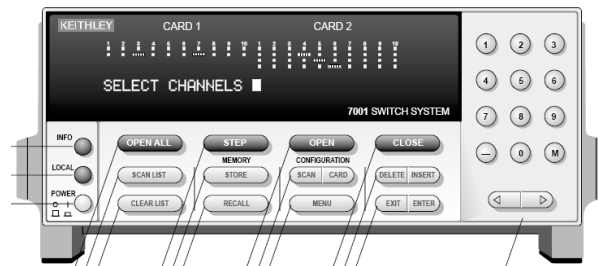


Figura 6.3: Equipamento utilizado para as medidas de efeito Hall.

Para as medidas de resistividade o fabricante indica uma leitura das resistências de folha na sequência apresentada abaixo,

$$R_a = \frac{R_1 + R_2 + R_5 + R_6}{4} \quad (6.7)$$

$$R_b = \frac{R_3 + R_4 + R_7 + R_8}{4} \quad (6.8)$$

os índices indicam os pontos de ligação na amostra. Com isso a resistividade ρ é dada por

$$\rho = R_s d \quad (6.9)$$

em que d é a espessura da amostra. Para realizarmos a medida do coeficiente Hall, devemos utilizar a seguinte expressão:

$$R_{HC} = \frac{2.510^7 d}{BI} (V_2 - V_1 + V_5 - V_6) \quad (6.10)$$

$$R_{HD} = \frac{2.510^7 d}{BI} (V_4 - V_3 + V_7 - V_8) \quad (6.11)$$

$$R_H = \frac{R_{HC} + R_{HD}}{2} \quad (6.12)$$

com V_i ($i = 1,2,3 \dots$) são as tensões Hall após comutações dos contatos, B e I as intensidades do campo magnético aplicado e da corrente respectivamente, R_{HC} e R_{HD} os valores dos coeficientes Hall quando se inverte o sentido do campo magnético. A Figura 6.4 esquematiza as ligações realizadas entre o cartão Hall, a amostra e os instrumentos.

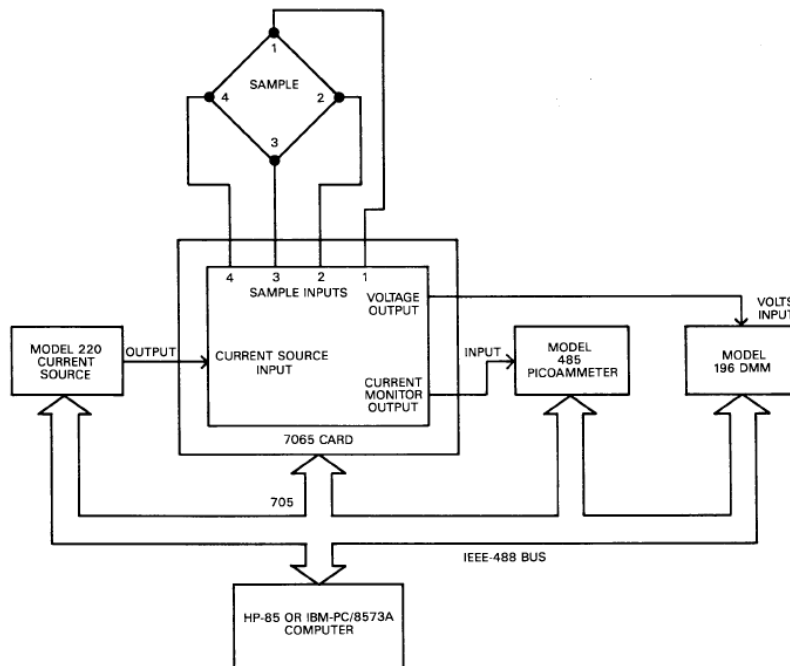


Figura 6.4: Esquematização do sistema de aquisição para medidas de mobilidade e condutividade (Extraído da Referência [82]).

O procedimento de medida é realizado a partir de um programa escrito em Visual Basic® e a comunicação entre os principais equipamentos é via GPIB (IEE 488 BUS) como ilustrado na Figura 6.5. Neste programa é possível realizar medidas de calibração do eletroímã, curva $I \times V$, além da medida do coeficiente Hall em função da temperatura e do campo magnético de forma automatizada.

Um gaussímetro mede a intensidade do campo magnético aplicado e envia um sinal analógico para o sistema de inversão que é responsável em inverter o sentido do campo magnético do eletroímã, selecionar se a leitura no voltímetro será a do gaussímetro ou o da tensão Hall além de ajustar o valor da corrente que deverá ser fornecida pela fonte de corrente do eletroímã. Este procedimento é realizado a partir da fonte de corrente por uma saída RS232 que recebe o comando via GPIB do microcomputador.

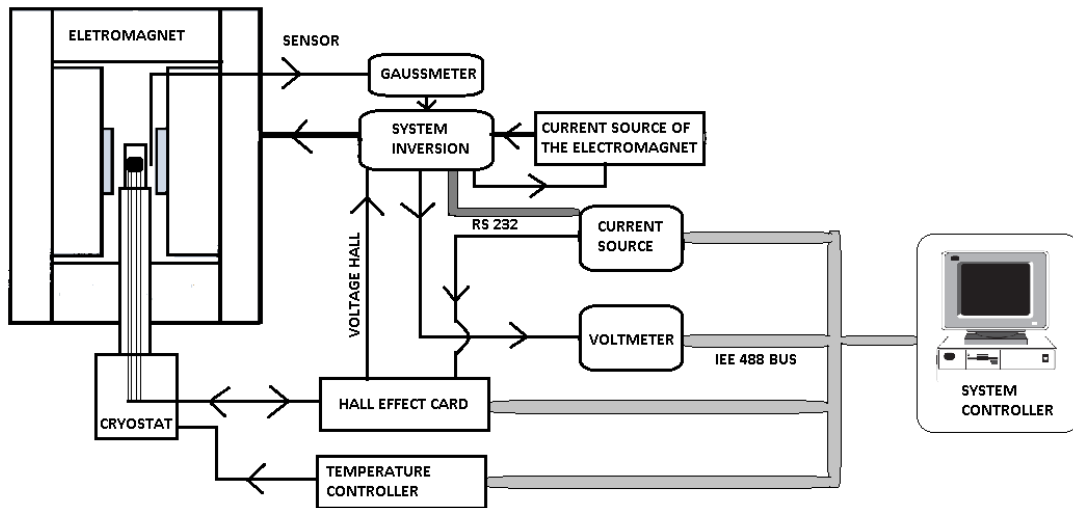


Figura 6.5: Sistema de Aquisição desenvolvido no Laboratório Hall

A fonte de corrente, por sua vez, também envia as informações sobre qual deverá ser a corrente que passará pela amostra e qual será a intensidade do campo magnético aplicado. O voltímetro se limita em ler a tensão selecionada (gaussímetro ou tensão Hall) e enviá-la via GPIB ao microcomputador.

6.1.1 Medidas de Efeito Hall Variando o Campo Elétrico e Magnético

Vimos que as densidades de corrente nas direções x-y dependem dos campos elétricos nestas respectivas direções, logo propomos variar o campo elétrico na direção x e medir respectivamente a corrente e a tensão Hall, diferente do método usual que fixa um valor de corrente sem saber o valor da tensão aplicada. Desta forma, esperamos obter o seguinte gráfico.

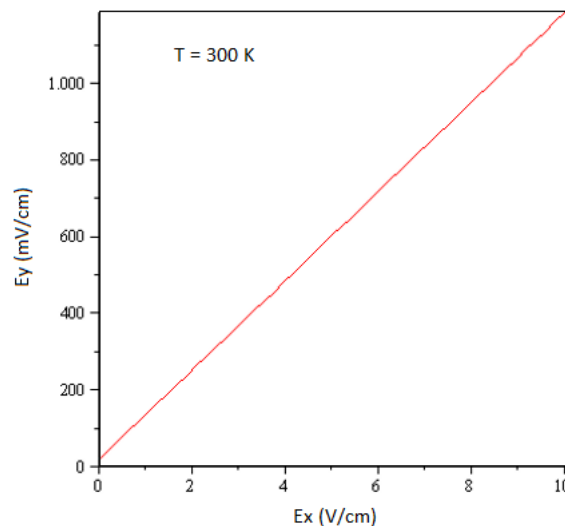


Figura 6.6: Campo Hall, E_y , com o campo elétrico aplicado, E_x .

Veja que quando E_x tende a zero a densidade de corrente não será nula, o que diferencia dos metais, tendo então o valor de E_y e conhecendo B_z posso determinar γ_0 . Por outro lado, a inclinação da curva será o valor de σ_0 pois vamos tomar a mesma consideração anterior ($\sigma_0 \gg \beta_0 B_z^2$). Para verificarmos esta consideração poderemos medir os valores de J_x variando o campo magnético, pois devido a magnetoresistência

este valor deverá variar linearmente com B_z , se $\sigma_0 \gg \beta_0 B_z^2$ ou parabolicamente caso contrário. Neste caso, também iremos medir a tensão Hall gerada. Assim, conhecendo o valor de E_x e utilizando a equação da parábola podemos determinar os coeficientes da expressão.

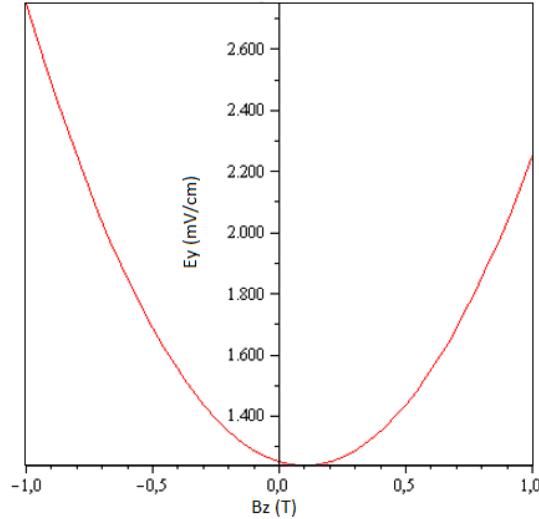


Figura 6.7: Campo Hall, E_y , com o campo magnético aplicado, B_z .

6.1.2 Medidas de Efeito Hall com Tensão Alternada

Em alguns casos o valor da tensão hall pode ser pequena impossibilitando a medida através do multímetro de bancada. Sendo assim, propomos um método no qual utilizamos uma corrente oscilante na amostra e realizamos a leitura da tensão Hall através de um amplificador síncrono. Para realizarmos medida de corrente alternada, primeiro iremos verificar o comportamento da tensão Hall utilizando o processo de difusão discutido anteriormente. No estado estacionário, o movimento dos portadores de carga interagindo com o campo magnético produz um acúmulo de cargas nas extremidades perpendiculares ao fluxo de corrente. Quando retiramos o fluxo, este acúmulo de cargas não deve cessar instantaneamente com a corrente, pois deverá existir um tempo de queda porque neste momento o processo de difusão deverá ocorrer fazendo com que a tensão Hall caia a zero algum tempo depois de cessado o fluxo de corrente. Considerando que este acúmulo de cargas gera uma concentração do tipo

$$n(x, t) = n(x)e^{-t/\tau} \quad (6.13)$$

e de acordo com o experimento de Haynes-Shockley, deveremos ter que a densidade de corrente na direção y será,

$$\begin{aligned} J_y &= eD_n \nabla n(x, t) = eD_n e^{-t/\tau} \nabla n(x) \\ &= (\sigma_0 + \beta_0 B_z^2) E_y \end{aligned} \quad (6.14)$$

tomando $\sigma_0 \gg \beta_0 B_z^2$ temos que

$$E_y = \frac{eD_n}{\sigma_0} e^{-t/\tau} \nabla n(x) \quad (6.15)$$

e escrevendo $\sigma_0 = ne\mu$ e com a relação de Einstein resulta em:

$$eE_y = k_B T e^{-t/\tau} \frac{\nabla n(x)}{n} \quad (6.16)$$

Pelo formalismo de Boltzmann, podemos escrever a concentração de portadores como

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int f_0 d^3 k \quad (6.17)$$

então

$$n(x) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int f d^3 k \quad (6.18)$$

Vamos supor que $f = f_0 + f_1$ com f_1 a nova função de distribuição devido ao acúmulo das cargas. Vale a pena ressaltar que a diferença entre f e f_0 deverá ser pequena de modo que podemos aproximar

$$\nabla f \cong \nabla f_0 \quad (6.19)$$

desta forma

$$\nabla n(x) \cong \nabla n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int \nabla f_0 d^3 k \quad (6.20)$$

e podemos encontrar que

$$\nabla f_0 = \frac{\partial f_0}{\partial E_k} \left[-\nabla E_f - \frac{(E_k - E_f)}{T} \nabla T \right] \quad (6.21)$$

e com

$$\frac{\partial f_0}{\partial E_k} = -\frac{1}{k_B T} f_0 (1 - f_0) \quad (6.22)$$

podemos escrever

$$\nabla f_0 \cong \frac{1}{k_B T} f_0 \nabla E_f \quad (6.23)$$

onde usamos a aproximação $\frac{\partial f_0}{\partial E_k} \approx -\frac{1}{k_B T} f_0$. Assim

$$\nabla n = \frac{2}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \int f_0 \nabla E_{f_0} d^3 k \quad (6.24)$$

substituindo:

$$\begin{aligned} eE_y &= k_B T e^{-t/\tau} \frac{1}{k_B T} \frac{\int f_0 \nabla E_{f_0} d^3 k}{\int f_0 d^3 k} \\ &= e^{-t/\tau} \langle \nabla E_f \rangle \end{aligned} \quad (6.25)$$

Isto implica que a retirada do campo elétrico provoca variações espaciais no nível de Fermi. O primeiro membro representa uma força restauradora que se opõe ao mecanismo de difusão. A Figura 6.8 apresenta a previsão deste comportamento.

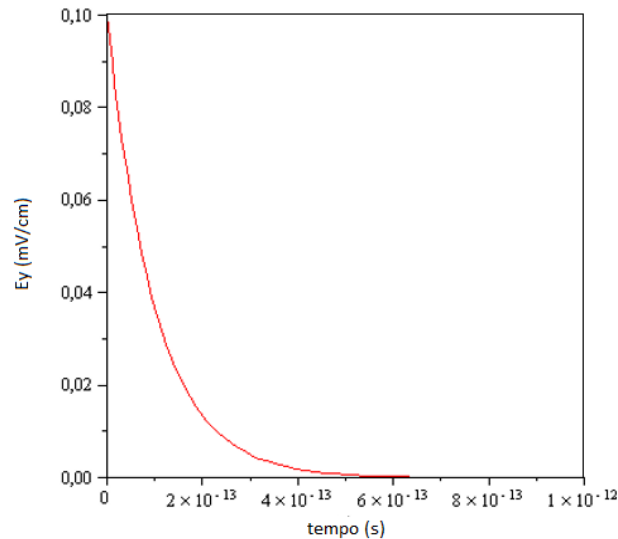


Figura 6.8: Campo Hall após retirada da tensão aplicada.

Observe que para os valores típicos do tempo de relaxação dos semicondutores, em torno de 10^{-10} a 10^{-14} s, a tensão Hall cairá a zero muito rapidamente, esta é uma dificuldade experimental para a medição do valor médio do gradiente da energia de quase-fermi. Por outro lado, com a utilização de um campo elétrico oscilante em baixa frequência implicaria numa oscilação da tensão Hall em fase com este campo.

Uma das dificuldades de medidas Hall é o baixo valor da tensão Hall gerada em amostras com alta condutividade (para os metais é praticamente zero) devido ao valor médio de τ^2 ser próximo de zero. Em vista disso, a utilização de um Lock-in irá ajudar nas medidas para este tipo de amostras. Para isso, vamos utilizar uma resistência em série com a amostra para a leitura da corrente e um gerador de frequência com controle da tensão na montagem descrita na Figura 6.9:

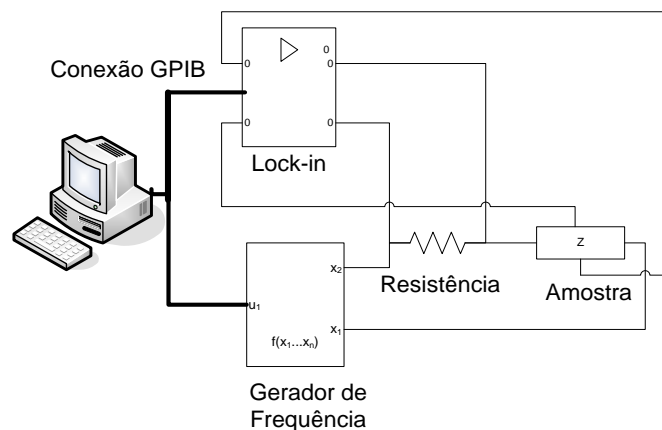


Figura 6.9: Sistema de aquisição para medidas hall em corrente alternada

A vantagem quando se utiliza um sinal alternado a possibilidade de eliminar a inversão da corrente do eletroímã para as medidas, pois o valor médio da tensão Hall calculada por este método será dado diretamente pelo lock-in. Para verificar a interferência dos contatos poderemos tentar medir a tensão pelas entradas analógicas do lock-in e verificar a diferença nas amplitudes dos semicírculos (se o sinal for senoidal) da

tensão Hall. A queda de tensão na resistência informará o valor da corrente que atravessa a amostra e servirá também como referência de tensão para o Lock-in.

Observe que o tratamento descrito até aqui é independente da temperatura, mas sabemos que o tempo de relaxação pode aumentar com a diminuição da temperatura, isso implicaria no surgimento de uma defasagem entre os sinais que poderemos tentar verificar em frequências mais elevadas. Outro ponto a discutir é o efeito piezoelétrico na tensão Hall e na condutividade, pois não foi levada em consideração.

Com a simulação Monte Carlo, poderemos verificar o comportamento dos tempos de relaxação para os diferentes mecanismos de espalhamento em função da temperatura e incluir o efeito Hall e campos alternados [12]. Isto torna este método uma ferramenta poderosa no entendimento dos resultados que poderão ser obtidos a partir desta sugestão.

6.3 Detecção das correntes de Foucault

O circuito eletrônico desenvolvido é composto de dois osciladores a 0,89 MHz, um servindo de referência e o outro de sensor. Os sinais desses dois osciladores são multiplicados na base de um transistor que produz assim um batimento entre as duas frequências vizinhas. A saída é filtrada por um passa-baixo. O sinal detectado é amplificado por um circuito amplificador push-pull com realimentação (Figura 6.10), cuja saída pode ser direcionada para poder ouvir o batimento em um fone de ouvido de 16Ω ou por um osciloscópio. Inicialmente o circuito apresentou um problema de estabilidade com a temperatura que foi resolvido utilizando capacitores do tipo COG/NPO nos dois osciladores.

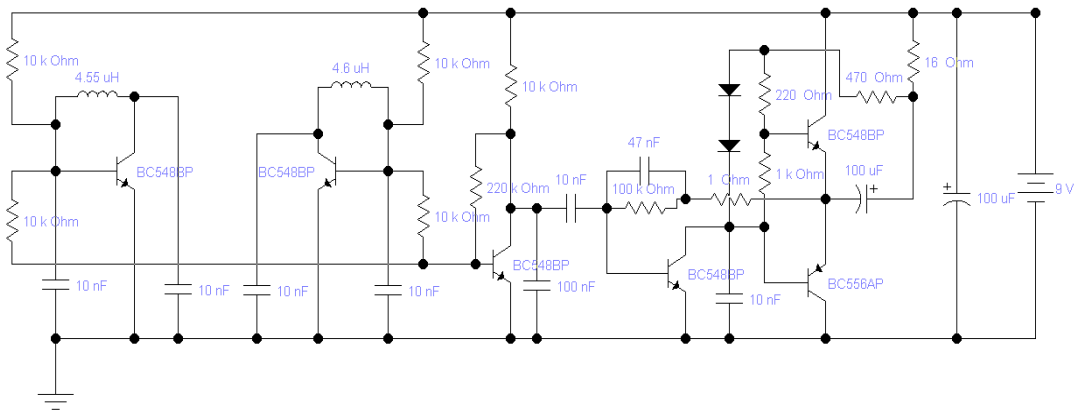


Figura 6.10: Esquema do circuito utilizado para a detecção das correntes de Foucault. Os osciladores das bobinas de referência e de detecção são formados na configuração de um circuito LC.

As bobinas de referência e detecção são do tipo bobina chata com diâmetro variando de 7 a 11 mm de raio, espessura de 4 mm e 17 espiras, formando indutâncias de $6,4 \mu H$. A frequência de ressonância obtida foi de 0,89 MHz. O coração do circuito são os dois osciladores utilizados, o primeiro funciona como um sinal de referência e o segundo como uma sonda.

Neste circuito (Figura 6.11) as variáveis são V_b e V_c , as tensões de base e de coletor do transistor, i , i_1 , i_2 e i_3 as correntes atravessando respectivamente a resistência

de carga R_c , o capacitor C_1 , o capacitor C_2 e a indutância L (por enquanto a resistência induzida pela amostra R é ignorada), e as três correntes do transistor i_b , i_e e i_c .

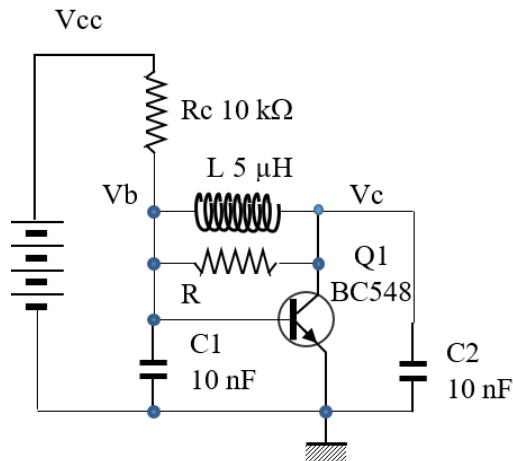


Figura 6.11: Circuito do oscilador utilizado na detecção das correntes de Foucault. A frequência de operação é determinada pelo circuito LC em série.

Tabela 6.2: Lista dos componentes utilizados no circuito de detecção

Transistores:	Resistores:	Diodos:
5 BC548	1 220 Ω	2 1N4007
1 BC556	1 470 Ω	Diversos:
Capacitores:	1 1 k Ω	1 conector de pilha de 9 V
6 10 nF COG/NPO	5 10 k Ω	1 interruptor
1 47 nF	1 100 k Ω	1 fone de ouvido 16 Ω
1 100 nF	1 220 k Ω	1 plugue estéreo 3 mm
2 100 μ F	1 47 k Ω (saída para osciloscópio)	1 plugue mono 3 mm
		1 pilha de 9 V

Fazendo abstração do transistor e de sua carga R_c , fica um circuito oscilante composto por L e os dois capacitores C_1 e C_2 em série. Praticamente, $C_1 = C_2 = C$ de tal maneira que a frequência de ressonância é dada por $L.C.\omega^2 = 2$, seja $f \approx 1$ MHz.

A observação das tensões V_b e V_c calculadas pelo aplicativo Electronic Workbench[®] revela o seguinte: As tensões V_b e V_c são basicamente senoidais, em oposição de fase, apesar de uma pequena defasagem (comparar V_b e $-V_c$). Mas a soma das duas tensões, $V_b + V_c$, não é constante, mas com um aumento quase linear, interrompida a cada ciclo por um decaimento rápido da ordem de 90 mV.

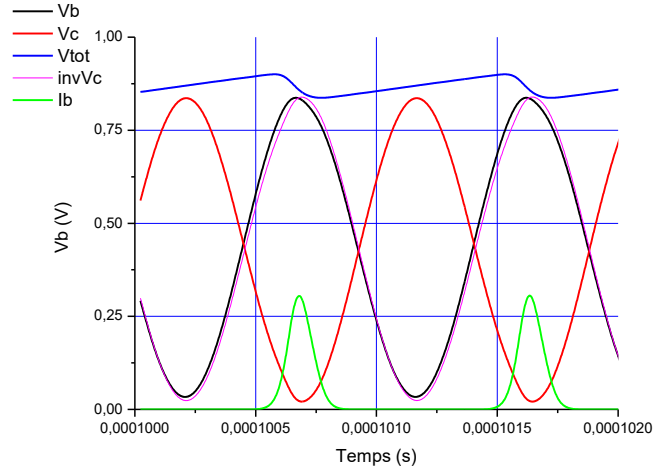


Figura 6.12: Simulação do circuito oscilante com o programa Electronic WorkBench®

Atribuindo a subida lenta da soma das tensões durante o ciclo ao carregamento em regime quase contínuo dos dois capacitores C_1 e C_2 pela corrente fluindo através de R_c , interrompido periodicamente por uma queda rápida. Esse decaimento rápido corresponde, sem dúvida, à aparição de um pico de corrente na junção base-coletor do transistor quando a tensão V_b alcança seu máximo (curva calculada verde). É essa descarga rápida no final de cada ciclo que mantém o oscilador ativo, e que encurta levemente o período de oscilação. A análise das correntes e tensões conduz às seguintes equações:

$$\begin{aligned}
 i &= i_1 + i_b + i_3 & V_{CC} - V_b &= R_c \cdot i \\
 i &= i_1 + i_e + i_2 & V_b - V_c &= L \cdot di_3/dt \\
 i_3 &= i_c + i_2 & i_1 &= C \cdot dV_b/dt \\
 i_b + i_c &= i_e & i_2 &= C \cdot dV_c/dt
 \end{aligned} \tag{6.26}$$

Se $V_c \geq V_b$:

$$\begin{aligned}
 i_e &= i_0 \cdot \left(\exp\left(\frac{q \cdot V_b}{n \cdot k \cdot T}\right) - 1 \right) \\
 i_c &= \beta \cdot i_b
 \end{aligned} \tag{6.27}$$

Se $V_c < V_b$:

$$\begin{aligned}
 i_e &= i_0 \cdot \left(\exp\left(\frac{q \cdot V_b}{n \cdot k \cdot T}\right) - 1 \right) \\
 i_c &= i_0 \cdot \left(1 - \exp\left(\frac{q \cdot (V_b - V_c)}{n \cdot k \cdot T}\right) \right)
 \end{aligned} \tag{6.28}$$

Eliminando as correntes, encontra-se um sistema de equações em V_b e V_c :

$$\frac{V_{CC} - V_b}{R_c} = C \cdot \frac{d(V_b + V_c)}{dt} + i_e \quad (6.29)$$

$$V_b - V_c = L \cdot C \cdot \frac{d^2 V_c}{dt^2} + L \cdot \frac{di_c}{dt}$$

e usando o fato de que $V_c = (V_c - V_b)/2 + (V_c + V_b)/2$ encontramos:

$$\frac{V_{CC} - V_b}{R_c} = C \cdot \frac{d(V_b + V_c)}{dt} + i_e \quad (6.30)$$

$$V_c - V_b + \frac{L \cdot C}{2} \cdot \frac{d^2(V_c - V_b)}{dt^2} = L \cdot \frac{d}{dt} \left(\frac{V_b}{2R_c} + i_c - \frac{i_e}{2} \right)$$

Como a tensão de base está baixa quando a tensão de coletor está alta, as correntes de emissor e de coletor são desprezíveis. No único momento em que a corrente de base está alta corresponde ao máximo de V_b e, nesse caso, o ganho é unitário. Então, fora esse momento, essas equações se simplificam em:

$$\frac{V_{CC} - V_b}{R_c} = C \cdot \frac{d(V_b + V_c)}{dt} \quad (6.31A)$$

$$V_c - V_b + \frac{L \cdot C}{2} \cdot \frac{d^2(V_c - V_b)}{dt^2} = \frac{L}{2R_c} \cdot \frac{dV_b}{dt} \quad (6.32B)$$

A equação (6.25B) indica uma oscilação da diferença das tensões, de pulsação $L \cdot C \cdot \omega^2 = 2$. Supondo que V_c está em oposição de fase com V_b , a soma dessas duas tensões é constante e a equação (6.31A) indica uma evolução exponencial (seja linear para períodos de tempo curtos) de $V_b + V_c$ para V_{CC} . As soluções seguintes podem ser testadas:

$$V_b(t) = V_{b0} \cdot (1 - e^{-\gamma t}) + V_{b1} \cdot e^{i\omega t} \quad (6.33A)$$

$$V_c(t) = V_{c0} \cdot (1 - e^{-\gamma t}) + V_{c1} \cdot e^{i\omega t} \quad (6.33B)$$

A equação (6.25A) indica que $V_{b0} = V_{c0} = V_{CC}$ e $\gamma = \frac{1}{2R_c \cdot C}$ e também

$V_{b1} \cdot \left(1 - \frac{i}{R_c \cdot C \cdot \omega} \right) + V_{c1} = 0$. Assim a subida da soma das tensões se faz com uma velocidade de $1/R_c \cdot C$ e os componentes alternados de V_b e V_c são em oposição de fase, mais uma defasagem de $1/R_c \cdot C \cdot \omega$.

Com os valores da montagem $\gamma \approx 5000 \text{ s}^{-1}$ e $\text{tg}\phi = 0,016$ ($0,9^\circ$). A resolução da equação (6.34B) conduz a uma equação para ω

$$\left(1 - L.C.\omega^2\right)\left(1 - \frac{i}{R_c.C.\omega}\right) + 1 = 0 \quad (6.34)$$

Essa equação tem, na ordem zero, a solução $L.C.\omega^2 = 2$. O termo em $i/(R_c.C.\omega)$ faz aparecer um componente imaginário que indica uma leve atenuação da oscilação com o tempo. As soluções dessa análise foram calculadas no MathCad® e estão em acordo com a simulação do Electronic WorkBench®:

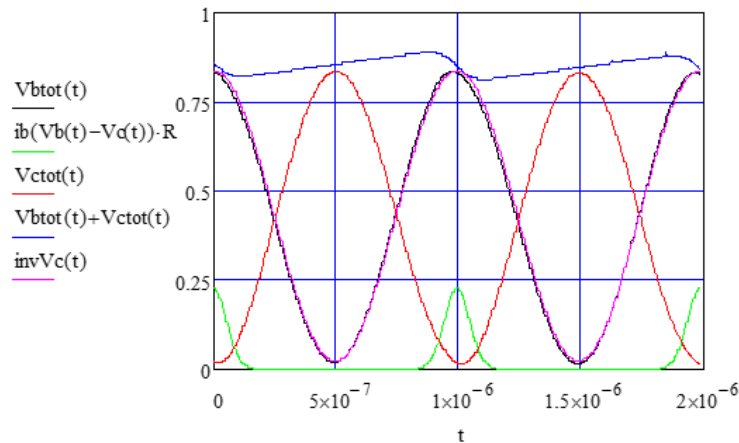


Figura 6.13: Soluções do sistema de equações diferenciais realizadas com o programa MathCad®

6.2.1 Análise do oscilador com resistência induzida pela amostra

A introdução de uma resistência R paralela à indutância L , resultando da interação do campo magnético com a amostra condutora, modifica um pouco o sistema de equações:

(i) Modificação da equação para i_3 em (6.26) para: $i_3 + i_4 = i_c + i_2$

(ii) Definição de i_4 : $V_b - V_c = R.i_4$.

A resolução desse sistema de equações modificado conduz na mesma equação (6.33A) e a uma equação (6.33B) modificada:

$$V_c - V_b + \frac{L}{R} \cdot \frac{d(V_c - V_b)}{dt} + \frac{L.C}{2} \cdot \frac{d^2(V_c - V_b)}{dt^2} = \frac{L}{2.R_c} \cdot \frac{dV_b}{dt} \quad (6.35)$$

Essa nova equação conduz a uma nova determinação de ω :

$$\left(1 + i \cdot \frac{L.\omega}{R} - \frac{L.C}{2} \cdot \omega^2\right)\left(2 - \frac{i}{R_c.C.\omega}\right) + i \cdot \frac{L.\omega}{2.R_c} = 0 \quad (6.36)$$

Na primeira ordem, basta resolver: $1 + i \frac{L\omega}{R} - \frac{L.C}{2} \omega^2 = 0$, cuja solução é:

$$\omega = \frac{i}{R.C} \pm \sqrt{\frac{2}{L.C} - \frac{1}{R^2.C^2}} \quad (6.37)$$

Esse resultado mostra que o efeito da resistência induzida é de reduzir levemente a frequência de ressonância e, sobretudo, de amortecer a ressonância pelo termo $e^{-\frac{t}{R.C}}$. É então importante ressaltar novamente o papel do transistor na manutenção da oscilação.

6.2.2 Manutenção da oscilação

Para isso, vamos tentar determinar de maneira precisa o momento em que a condução do transistor compensa o amortecimento do oscilador. Como foi vista, a tensão da base pode ser expressa na forma:

$$V_b(t) = V_{cc} \cdot \left(1 - e^{-\frac{t}{2R_c.C}}\right) + V_{b0} + V_{b1} \cdot e^{-\frac{t}{R.C}} \cdot \cos(\omega_0 \cdot t) \quad (6.38)$$

Em $t = 0$ (início do ciclo), temos: $V_b(0) = V_{b0} + V_{b1} = V_{max}$. A questão é de saber quando V_b vai atingir de novo esse valor. Deve ser em um instante $t_1 = T - \delta t$, onde T é o período de oscilação natural do ressoador. Seja:

$$V_{max} = V_{b0} + V_{b1} = V_{cc} \cdot \left(1 - e^{-\frac{T-\delta t}{2R_c.C}}\right) + V_{b0} + V_{b1} \cdot e^{-\frac{T-\delta t}{R.C}} \cdot \cos(\omega_0 \cdot (T - \delta t)) \quad (6.39)$$

Como estamos perto do máximo de $\cos(\omega_0 \cdot t)$, e como $R_c.C$ e $R.C$ são grandes comparados a T , podemos fazer o desenvolvimento limitado:

$$V_{b1} \cdot \left(1 - \left(1 - \frac{T - \delta t}{R.C}\right) \cdot \left(1 - \frac{\omega_0^2 \cdot \delta t^2}{2}\right)\right) = V_{cc} \cdot \frac{T - \delta t}{2R_c.C} \quad (6.40)$$

Seja, definindo $\phi = \omega_0 \cdot \delta t$:

$$\phi^3 + \phi^2 \cdot (R.C \cdot \omega_0 - 2\pi) + \phi \cdot \left(\frac{V_{cc}}{V_{b1}} \cdot \frac{R}{R_c} - 2\right) + 2\pi \cdot \left(2 - \frac{V_{cc}}{V_{b1}} \cdot \frac{R}{R_c}\right) = 0 \quad (6.41)$$

Nessa equação do terceiro grau, os coeficientes de ϕ^2 , ϕ^1 e ϕ^0 são muito superiores a 1, enquanto ϕ é a priori menor do que 1 rad (57°), de tal maneira que o termo ϕ^3 é desprezível. Desta forma temos que resolver um trinômio cujas soluções são:

$$\phi = \frac{-\left(\frac{V_{cc}}{V_{bl}} \cdot \frac{R}{R_c} - 2\right) + \sqrt{\left(\frac{V_{cc}}{V_{bl}} \cdot \frac{R}{R_c} - 2\right)^2 + 8 \cdot \pi \cdot \left(\frac{V_{cc}}{V_{bl}} \cdot \frac{R}{R_c} - 2\right) \cdot (R \cdot C \cdot \omega_0 - 2 \cdot \pi)}}{2 \cdot (R \cdot C \cdot \omega_0 - 2 \cdot \pi)} \quad (6.42)$$

Expressão que, devido ao fato de que $\frac{V_{cc}}{V_{bl}} \ll R \cdot C \cdot \omega_0$, pode ser simplificada em:

$$\phi = \sqrt{2 \cdot \pi \cdot \frac{\frac{V_{cc}}{V_{bl}} \cdot \frac{R}{R_c} - 2}{R \cdot C \cdot \omega_0 - 1}} \quad (6.43)$$

Quando não há corrente induzida na amostra, temos a defasagem:

$$\phi_0 = \sqrt{\frac{V_{cc}}{V_{bl}} \cdot \frac{2 \cdot \pi}{R_c \cdot C \cdot \omega_0}} \quad (6.44)$$

A diferença de fase induzida pela presença da amostra é então:

$$\delta\phi = \sqrt{\frac{2 \cdot \pi}{R \cdot C \cdot \omega_0 - 1} \cdot \left(\frac{V_{cc}}{V_{bl}} \cdot \frac{R}{R_c} - 2\right)} - \sqrt{\frac{V_{cc}}{V_{bl}} \cdot \frac{2 \cdot \pi}{R_c \cdot C \cdot \omega_0}} \quad (6.45)$$

E podemos deduzir a variação de período δT e de frequência δf :

$$-\frac{\delta T}{T} = \frac{\delta f}{f} = \frac{\delta\phi}{2 \cdot \pi} \approx \sqrt{\frac{V_{cc}}{V_{bl}} \cdot \frac{T}{R_c \cdot C}} \cdot \left(\frac{T}{2 \cdot C} - \frac{V_{bl}}{V_{cc}} \cdot R_c\right) \cdot \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot R} \quad (6.46)$$

Considerando $V_{cc} = 9 \text{ V}$, $V_{bl} = 0,42 \text{ V}$, $T = 1 \mu\text{s}$, $R_c = 10 \text{ k}\Omega$, $C = 10 \text{ nF}$ e R da ordem de $80 \text{ k}\Omega$ (para o $\text{SnO}_2:\text{F}$), obtém-se:

$$-\frac{\delta T}{T} = \frac{\delta f}{f} = \frac{\delta\phi}{2 \cdot \pi} \approx \sqrt{\frac{9}{0,42} \cdot \frac{10^{-6}}{10^4 \cdot 10^{-8}}} \cdot \left(\frac{10^{-6}}{2 \cdot 10^{-8}} - \frac{0,42}{9} \cdot 10^4\right) \cdot \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot R} \quad (6.47)$$

$$\frac{\delta f}{f} \approx \frac{-191,82}{2 \cdot \pi \cdot R} = -3,8 \cdot 10^{-4}$$

6.2.3 Determinação da Resistência Induzida Devido à Presença da Amostra

Para estimarmos o valor de R precisamos analisar a intensidade da corrente induzida na amostra do semicondutor de filme fino. Logo, considere uma bobina chata e uma corrente induzida no filme da amostra, circulando segundo um circuito de raio r , largura dr e espessura a , centrado na projeção do campo \vec{B} suposto normal à amostra, e supondo um campo quase constante em toda a área definida por esse circuito, o fluxo desse campo na amostra será:

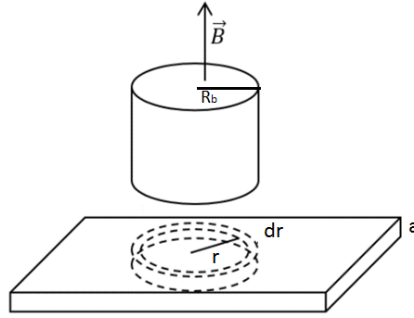


Figura 6.14: Estimativa da corrente induzida na amostra

$$\Phi \approx \pi r^2 \frac{\mu_0 N I}{2} \frac{R_b^2}{(x^2 + R_b^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (6.48)$$

onde R_b é o raio da bobina e x a distância dela ao ponto onde é calculado o fluxo magnético.

Esta estimativa foi realizada a partir da lei de Biot-Savart e pela definição de fluxo magnético. Vamos supor também que existe uma corrente senoidal na bobina do tipo $I = I_0 \cos \omega t$ e considerando uma resistência no circuito de raio r , largura dr e espessura a , a resistência deste circuito pode ser escrita como: $R_a = \rho \cdot \frac{2 \cdot \pi \cdot r}{a \cdot dr}$. Aqui, estamos supondo que a espessura do filme a é menor do que a profundidade de penetração δ (skin depth) no material. Neste caso, a d.d.p. gerada no circuito será dada pela lei de Faraday e a lei de Ohm indica que ela é consumida pela corrente induzida, e = $R_a \cdot di$, ou seja:

$$\rho \cdot \frac{2 \pi r}{a} \cdot \frac{di}{dr} \approx -\pi \cdot r^2 \cdot \frac{\mu_0 \cdot N}{2} \cdot \frac{R_b^2}{(x^2 + R_b^2)^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{dI}{dt} \quad (6.49)$$

Então, a corrente induzida também será senoidal, com defasagem de $\pi/2$, como vimos no capítulo 5, ou seja:

$$\frac{di}{dr} \approx \omega \cdot \frac{\mu_0 \cdot a \cdot r \cdot N}{4 \cdot \rho} \cdot \frac{R_b^2}{(x^2 + R_b^2)^{\frac{3}{2}}} \cdot I_0 \cdot \sin \omega t \quad (6.50)$$

Supondo que o campo é constante em toda superfície da bobina, a corrente induzida total é obtida integrando de zero até o raio da bobina, R_b :

$$i \approx \omega \cdot \frac{\mu_0 \cdot a \cdot N}{8 \cdot \rho} \cdot \frac{R_b^4}{(x^2 + R_b^2)^{\frac{3}{2}}} \cdot I_0 \cdot \sin \omega t \quad (6.51)$$

Consequentemente, esta corrente no filme gera um campo magnético que vai opor-se ao campo magnético da bobina dado por:

$$B' = \frac{\mu_0 \cdot N}{2} \cdot \frac{R_b^2 \cdot I_0}{(x^2 + R_b^2)^{\frac{3}{2}}} \left(\cos \omega t - \omega \cdot \frac{\mu_0 \cdot a}{8 \cdot \rho} \frac{R_b^4}{(x^2 + R_b^2)^{\frac{3}{2}}} \cdot \sin \omega t \right) \quad (6.52)$$

e esta relação mostra que o efeito do filme sobre o campo da bobina é de aumentar a tensão induzida na bobina:

$$e' = -\frac{d\Phi'}{dt} = -N \cdot \pi \cdot R^2 \frac{dB'}{dt} = \frac{\pi \cdot \mu_0 \cdot \omega \cdot R_b \cdot N^2 \cdot I_0}{2} \left(\sin \omega t + \omega \cdot \frac{\mu_0 \cdot R_b \cdot a}{8 \cdot \rho} \cdot \cos \omega t \right) \quad (6.53)$$

Assim, essa última relação mostra que aparece uma defasagem da tensão induzida $tg \varphi = \omega \cdot \frac{\mu_0 \cdot R_b \cdot a}{8 \cdot \rho}$ e um aumento da indutância da bobina chata de:

$$\frac{\Delta L}{L} = \sqrt{1 + \left(\frac{\mu_0 \cdot \omega \cdot R_b \cdot a}{8 \cdot \rho} \right)^2} - 1 \quad (6.54)$$

Mas a influência do filme condutor sobre a indutância da bobina é de subtrair um termo imaginário: $L' = L - i \cdot k \omega$. Em termos de impedância, isso pode ser visto como: (a) o acréscimo de uma baixa resistência à indutância da bobina: $Z_b = i \cdot L \cdot \omega + R$, ou (b) à colocação de uma forte resistência em paralelo: $\frac{1}{Z_b} = \frac{1}{i \cdot L \cdot \omega} + \frac{1}{R}$. Essa segunda possibilidade corresponde melhor à situação descrita pelo modelo, visto que:

$$Z_b = \frac{i \cdot L \cdot \omega}{1 + i \cdot \frac{L \cdot \omega}{R}} \approx i \cdot L \cdot \omega \cdot \left(1 - i \cdot \frac{L \cdot \omega}{R} \right) \equiv i \cdot \frac{\pi \cdot \mu_0 \cdot \omega \cdot R_b \cdot N^2}{2} \left(1 - i \cdot \omega \cdot \frac{\mu_0 \cdot R_b \cdot a}{8 \cdot \rho} \right) \quad (6.55)$$

deduz então que

$$R = \frac{4 \cdot \pi \cdot \rho \cdot N^2}{a} \quad (6.56)$$

6.4 Medidas de Fotocondução

O aparato experimental para medida da fotocondutividade é mostrado esquematicamente na Figura 6.15. Uma lâmpada halógena do tipo H4 de 12V/60W é usada com fonte de luz para as medidas, com ela é possível obter espectros de 0.4 μm a 25 μm .

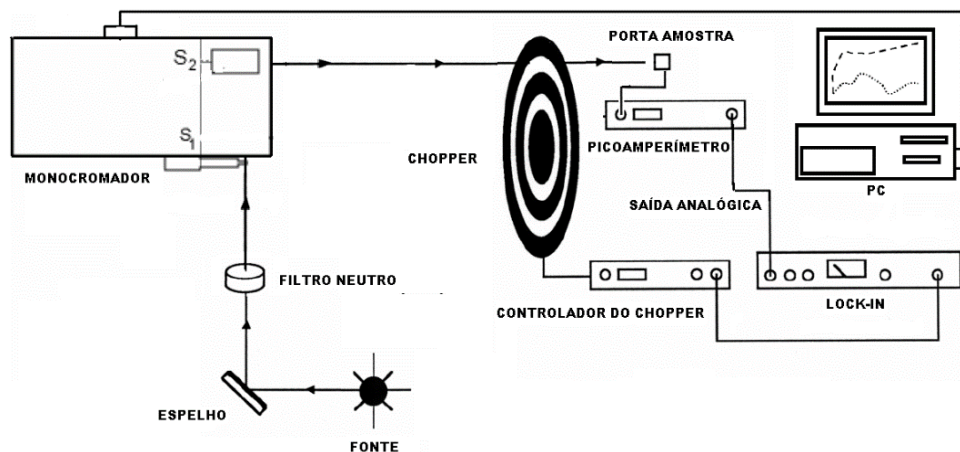


Figura 6.15: Configuração para medida de fotocondutividade.

Utilizamos um filtro neutro após a fonte para reduzir a intensidade luminosa na entrada do monocromador que é composto de dois espelhos quadrados de 56 mm de lado e 250 mm de distância focal, de uma rede de difração quadrada de 600 traços/mm e um par de fendas de 1.56 mm. O chopper foi instalado na sua saída de modo que a luz modulada incidisse diretamente sobre a amostra (Figura 6.16).

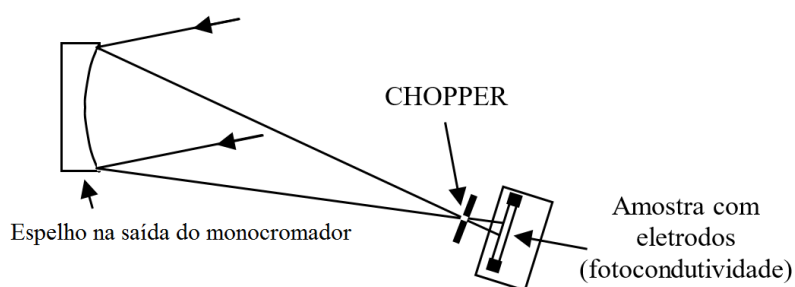


Figura 6.16: Esquema do monocromador em absorção.

Para a injeção de corrente na amostra, optamos por utilizar o picoamperímetro/fonte de tensão 6487 da Keithley Instruments (Figura 6.17) que fornece uma tensão contínua de $200\mu\text{V}$ até 505V , sendo capaz de ler correntes de 20fA a 20mA com uma resolução de 10fA . Ele contém uma saída analógica com ganho ao qual foi inserida diretamente na entrada do lock-in.

O sinal lido pelo picoamperímetro é enviado diretamente ao microcomputador via conexão GPIB ao qual também controla o motor de passo do monocromador. A vantagem em se utilizar o picoamperímetro é que com sua saída analógica podemos acompanhar a modulação da corrente diretamente com um osciloscópio. Para a realização das medidas, foi ajustado um valor de tensão fixa para todas as amostras, com isso temos um ponto de referência em relação à fotocorrente gerada e a corrente no escuro, visto que a intensidade de luz que chegava sobre elas seria aproximadamente a mesma.

O porta-amostra foi confeccionado com dois BNC, um para entrada de tensão e outro para a saída da corrente que seria lida pelo picoamperímetro. Sua posição era mantida fixa e perpendicular ao feixe incidente, bem como o suporte para o sensor de luz, necessário para extrair o espectro da lâmpada halógena.



Figura 6.17: Picoamperímetro utilizado nas medidas de fotocondução.

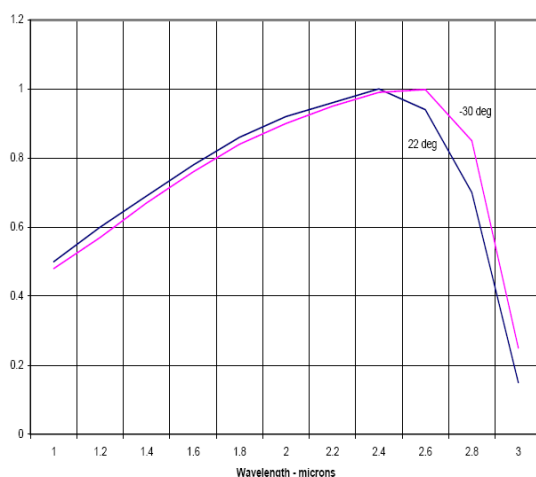


Figura 6.18: Resposta espectral típica do sensor PbS.

O sensor de luz utilizado para medida do espectro da lâmpada foi um de PbS que têm uma resposta espectral de até 3 μm (Figura 6.18), cujo sinal era lido diretamente via lock-in. As medidas foram realizadas numa faixa de 0.4 a 1.4 μm devido à emissão espectral da lâmpada. O espectro da lâmpada medido é então normalizado pela resposta do detector (Figura 6.19). A montagem descrita é semelhante à aquela realizada por Araújo *et al* [83] com a diferença na faixa espectral utilizada pelos autores, de 0.78 a 1.2 μm .

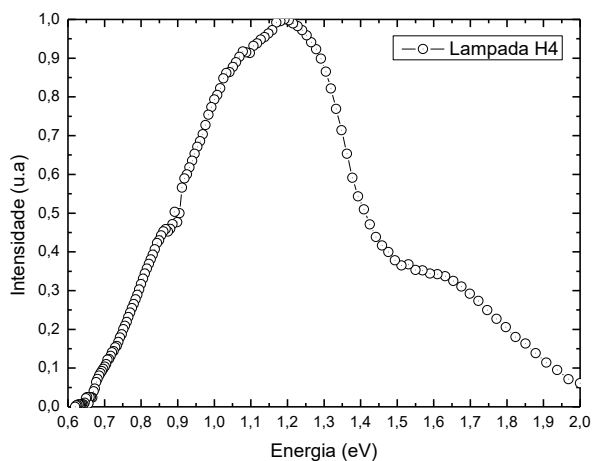


Figura 6.19: Resposta espectral da lâmpada H4 obtida com um sensor de PbS.

7. *Resultados*

Os resultados obtidos serão apresentados de acordo com as sugestões do capítulo anterior. Inicialmente apresentaremos os resultados na determinação do coeficiente Hall via método Monte Carlo na tentativa da interpretação do comportamento das medidas de efeito Hall em função da temperatura, cuja simulações das amostras foram realizadas para materiais com interesse tecnológico ou somente para simples comparação entre resultados. Em seguida as medidas de efeito Hall e condutividade variando a temperatura para a amostra de SnO₂:F. Neste caso, não foram realizadas medidas com a amostra de CIS, pois durante os testes estávamos medindo apenas o substrato de SnO₂:F. As outras amostras de interesse não estavam disponíveis durante os testes.

Em seguida realizamos a medida da resistividade pelo método das correntes de Foucault onde a montagem experimental apresentou boa concordância para as amostras de SnO₂:F. Por fim as medidas de fotocondutividade para amostras de silício com diferentes dopantes, onde apresentaram um comportamento peculiar, necessitando de um modelamento teórico mais detalhado para compreender a montagem experimental. As amostras de dióxido de estanho dopado com flúor não apresentaram comportamento fotocondutivo e as amostras de CIS tiveram interferência do substrato ao qual foram depositadas.

7.1 *Resultados da Simulação Monte Carlo*

O método Monte Carlo é utilizado com um campo elétrico aplicado intenso pois ele considera os elétrons como partículas e a partir daí determina a energia final devido à aceleração do campo. Assim os valores a baixo campo são obtidos aproximando as curvas obtidas a zero, nesta condição os valores apresentam uma variação entre duas a quatro vezes dos valores reais, mas sempre mantendo a mesma ordem de grandeza. Além disso, ele utiliza expressões teóricas no cálculo das taxas de espalhamento, que neste caso foram obtidas a partir de livros e artigos sobre o tema [29] [46] [47] [59] [84], juntamente com os parâmetros necessários na sua determinação. Em algumas amostras não foram encontrados todos os parâmetros físicos, o que limitou a simulação, pois alguns tipos de espalhamento não puderam ser simulados. Para outras foram utilizados os mesmos valores do arseneto de gálio ou silício. A Tabela 7.1 resume os tipos de amostras utilizadas e seus respectivos parâmetros [85]. Os dados repetidos são referentes ao GaAs e em todas as simulações foram consideradas que o número de portadores da impureza é igual a um.

Estes parâmetros físicos são características intrínsecas de cada material, como massa efetiva, gap ótico, potencial de deformação acústico, velocidade do som, diferença de energia entre vales, parâmetros de não parabolicidade do vale principal etc., o que dificulta a simulação, pois estes são parâmetros chave para o resultado. Logo, foram obtidos de valores teóricos ou experimentais de outros autores.

Mas notamos nas comparações dos resultados que a depender dos parâmetros principais, como gap, concentração de elétrons, densidade e massa efetiva o efeito nas taxas de espalhamento é reduzido, não afetando o comportamento das curvas e nem do resultado final.

Tabela 7.1: Parâmetros utilizados no Método Monte Carlo para as amostras estudadas [85].

Parâmetro	SnO ₂ :F	CIS	CuO	Cu ₂ O	InSb	GaSb
Massa Efetiva (m^*/m_0)	0,275	0,66	0,78	0,56	0,014	0,05
Gap (eV)	3,596	1,02	1,35	2,17	0,24	0,75
Concentração de Impurezas ionizadas (m^{-3})	$1,5 \cdot 10^{26}$	$5,0 \cdot 10^{25}$	$1,0 \cdot 10^{25}$	$1,0 \cdot 10^{25}$	$1,0 \cdot 10^{25}$	$1,0 \cdot 10^{24}$
Concentração de Impurezas neutra (m^{-3})	$1,0 \cdot 10^{16}$	$1,0 \cdot 10^8$	$1,0 \cdot 10^{16}$	$1,0 \cdot 10^{16}$	$1,0 \cdot 10^{18}$	$1,0 \cdot 10^{18}$
Constante dielétrica estática	9,6	15,2	7,5	7,11	17,9	15,69
Constante dielétrica no infinito	13,5	8,5	6,46	6,46	15,7	14,44
Densidade de massa (g/cm^3)	6,99	5,77	6,515	5,749	5,79	5,613
Frequência do fônon acústico (rad/s)	$3,68 \cdot 10^{12}$	$1,5 \cdot 10^{12}$	$5,28 \cdot 10^{12}$	$5,28 \cdot 10^{12}$	$3,79 \cdot 10^{13}$	$5,0 \cdot 10^{13}$
Potencial de deformação acústico (eV)	30	7,8	2,4	2,4	5,96	3,0
Potencial de deformação intervala (V/cm)	xx	$50,0 \cdot 10^8$	$1,0 \cdot 10^9$	$1,0 \cdot 10^9$	$9,0 \cdot 10^8$	$1,0 \cdot 10^9$
Velocidade acústica longitudinal (cm/s)	xx	$9,11 \cdot 10^5$	$4,5405 \cdot 10^5$	$4,5405 \cdot 10^5$	$3,7 \cdot 10^5$	$4,24 \cdot 10^5$
Diferença entre Vales (L- Γ) (eV)	xx	0,7	0,36	0,36	0,76	0,36
Massa efetiva do vale superior	xx	0,087	0,35	0,35	0,22	0,09
Parâmetro de não parabolicidade do vale Γ	xx	0,72	0,576	0,576	5,72	0,576

7.1.1 Resultados da Simulação Monte Carlo para o SnO₂:F

Os primeiros resultados obtidos com o Método Monte Carlo foram para a amostra de SnO₂:F em duas temperaturas, 300 e 77 K. Este material é utilizado principalmente como contatos transparentes em diversos dispositivos à temperatura ambiente e quando dopado com flúor torna-se um material tipo *n* com alta concentração de elétrons na banda de condução e de gap direto.

Pela tendência das curvas (Figura 7.1), a determinação das taxas de espalhamento mostra que, em temperatura ambiente, os elétrons são espalhados principalmente pelos fônons óticos (absorção e emissão de fônons) e que o alto teor de impureza ionizada não representa uma mudança significativa em suas propriedades. Ou seja, mesmo aumentando a temperatura, estes dois tipos de espalhamentos cresceriam, não alterando seu comportamento.

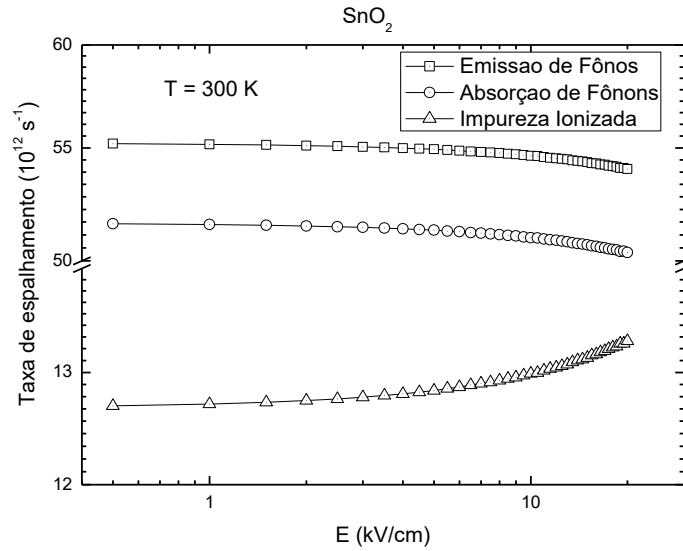


Figura 7.1: Taxas de espalhamento para SnO₂:F a 300 K.

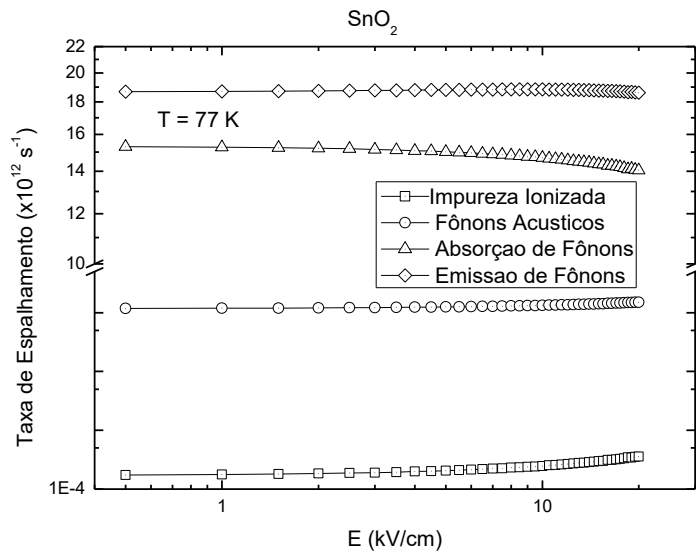


Figura 7.2: Taxas de espalhamento para SnO₂:F a 77 K

Agora em baixa temperatura, 77 K, a taxa de espalhamento por impureza ionizada perderia lugar pelo espalhamento por fônons acústicos, como pode-se ver pela Figura 7.2. Isto apresenta certa coerência, pois a concentração de elétrons devido as impurezas ionizadas diminuem com a temperatura.

Analisando a velocidade de deriva, ela apresentou um comportamento linear com o campo elétrico aplicado (Figura 7.3), diferente dos resultados obtidos para o arseneto de gálio (Figura 4.13). Isto demonstra que, de acordo com a expressão 3.1 e um ajuste linear das curvas, a mobilidade de deriva deste material irá variar entre 46,1 e 109,5 cm^2/V_S para as temperaturas de 77 K e 300 K respectivamente.

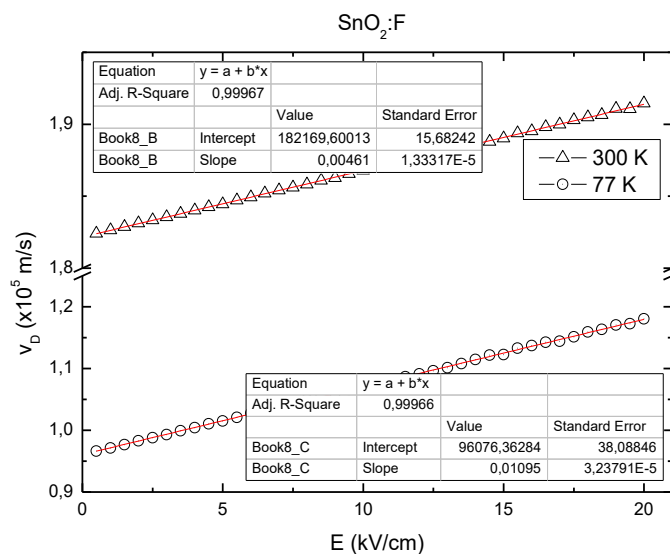


Figura 7.3: Velocidade de deriva em função do campo elétrico aplicado para o SnO₂:F em duas temperaturas.

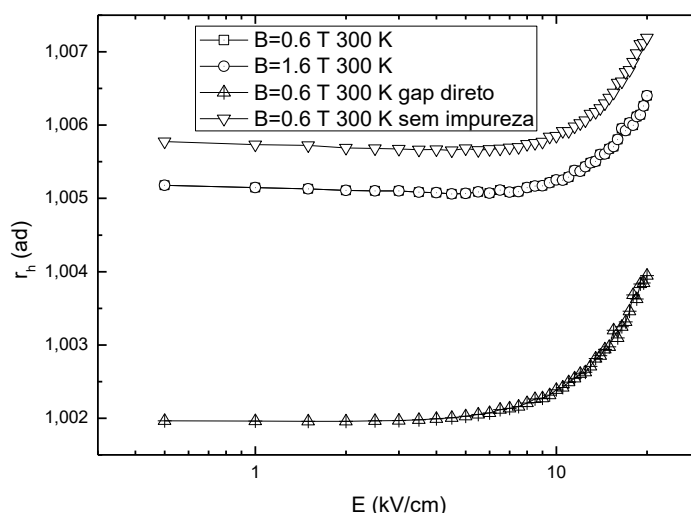


Figura 7.4 Fator Hall para o SnO₂:F variando o campo magnético e o campo elétrico a 300 K.

O fator Hall, expresso como sendo $r_H = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}$, é encontrado calculando o tempo de relaxação de cada partícula e depois calculando os valores médio $\langle \tau \rangle$ e $\langle \tau^2 \rangle$. Assim de acordo com a expressão 6.2, ele indicará também qual o desvio do valor real, logo quanto mais próximo de um, melhores são os resultados.

Para o SnO₂:F foram realizadas as simulações variando a temperatura, o campo elétrico e o campo magnético mas em todas ele permaneceu próximo de 1, não ocorrendo variações significativas (Figura 7.4). Na tentativa de forçar uma variação do coeficiente Hall supomos também uma baixa concentração de impureza e um material de gap indireto, e que também não provocaram alterações significativas.

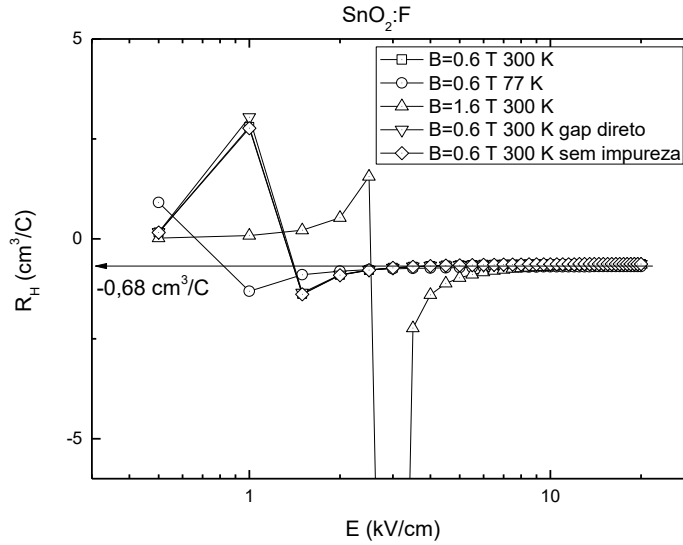


Figura 7.5: Variação do Coeficiente Hall com a temperatura, campo elétrico e o campo magnético aplicado para uma amostra de SnO₂:F.

O coeficiente Hall foi obtido a partir da expressão 6.1 e mostrou-se praticamente independente da temperatura, do campo elétrico e do campo magnético, onde para o valor da concentração estimada ele estaria em torno de $-0,68 \text{ cm}^3/\text{C}$. Como o coeficiente Hall depende inversamente da concentração de elétrons, foi incluída na simulação a dependência da temperatura na concentração dos elétrons, mas não provocou alterações significativas. Acreditamos que a baixa dependência da taxa de espalhamento por impurezas ionizadas elimina a dependência com a temperatura do coeficiente Hall, ou a competição entre esta taxa de espalhamento e a taxa de espalhamento por fônons equilibram os tempos de colisão no material.

Além disso, o coeficiente Hall apresentou um pico para um campo elétrico aplicado de aproximadamente $3,0 \text{ kV/cm}$, quando simulamos com um campo magnético de $1,6 \text{ T}$ e em temperatura ambiente. Como este pico não apresentou na simulação do fator Hall e a concentração de elétrons independe do campo, então de acordo com a expressão 6.1, podemos afirmar que a densidade linear de carga, γ_0 , é a responsável. Isto sugere que de acordo com a expressão para γ_0 , equação 3.45, o valor de $\langle \tau^2 \rangle$ provoca uma alteração significativa na condutividade deste material.

Para determinar a resistividade do material iremos primeiramente escrever a mobilidade a partir da equação 6.6 para:

$$\mu_n = \frac{e\langle \tau^2 \rangle}{m^*\langle \tau \rangle} \quad (7.1)$$

e pela expressão $\sigma = ne\mu$ podemos encontrar:

$$\rho = \frac{R_H}{\mu_n} \quad (7.2)$$

A figura a seguir mostra o valor da resistividade encontrada em função do campo elétrico à temperatura ambiente. O sinal negativo na resistividade é devido somente ao coeficiente Hall, R_H .

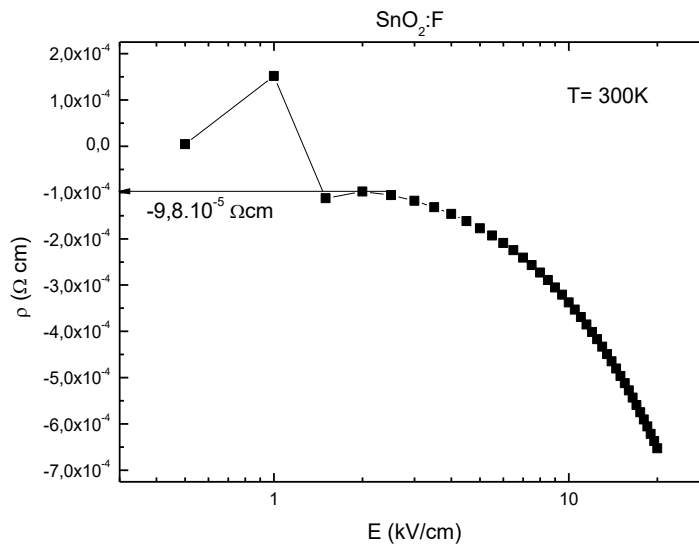


Figura 7.6: Resistividade para o SnO₂:F em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente. O sinal negativo na resistividade indica que se trata de um material tipo n durante a simulação.

Este resultado mostra que a partir de 3 kV/cm a resistividade cresce rapidamente em função do campo elétrico e que em baixo campo o seu valor é de aproximadamente $1,0 \cdot 10^{-4} \text{ } \Omega \text{ cm}$. Os valores negativos no gráfico acima são devido ao sinal do coeficiente Hall e a variação em campos baixo é devida provavelmente a erros gerados pelo próprio método Monte Carlo, pois este se aplica a campos intensos. Em temperaturas mais baixas o comportamento da resistividade permaneceu o mesmo, alterando apenas o seu valor.

7.1.2 Resultados da Simulação Monte Carlo para o CIS

As simulações a seguir forma realizadas para um campo magnético aplicado de $0,6 \text{ T}$ para medida de comparação entre os resultados, além disso foi mantida a mesma carga da impureza, $Z = 1$ e também consideramos o material tipo n . Os resultados para o CIS mostram que a taxa de espalhamento predominante continua sendo devido principalmente por fônons com uma diferença em relação ao dióxido de estanho. Com a redução da temperatura a taxa de espalhamento por impureza ionizada sofre um aumento considerável em relação aos fônons acústicos (Figuras 7.7 e 7.8), o que não aconteceu com o SnO₂:F. Para exemplificar melhor, enquanto as taxas de espalhamento por fônons diminuem com a redução da temperatura, a taxa de espalhamento por impurezas ionizadas sofre um pequeno acréscimo, onde de uma maneira geral, podemos assumir que permanece constante nesta faixa de temperatura.

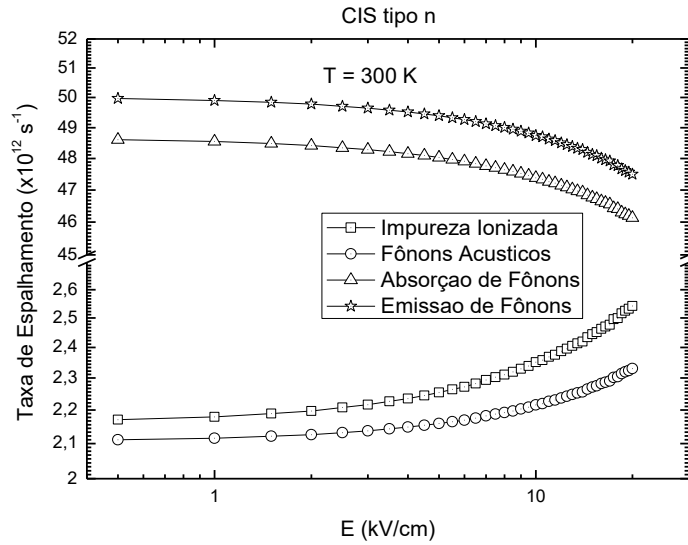


Figura 7.7: Taxas de espalhamento para o CIS à 300 K.

Este comportamento deve ser explicado a partir da dependência da concentração de elétrons com a temperatura, ou seja, como a simulação envolve a seleção do mecanismo de espalhamento em função da energia cinética inicial e do número de partículas, a redução da temperatura seguido da redução da concentração de elétrons não produz alterações significativas da taxa de espalhamento por impurezas ionizadas, e sim, favorece este tipo de mecanismo de espalhamento.

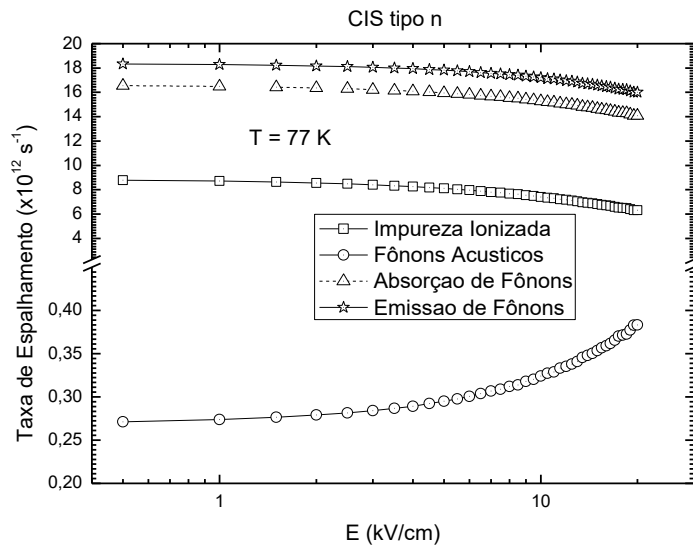


Figura 7.8: Taxas de espalhamento para o CIS à 77 K.

De acordo com o ajuste linear das curvas da velocidade de deriva em função do campo elétrico, a mobilidade do CIS deve variar entre 168 e $314 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ entre as temperaturas de 77 e 300 K e o fator Hall permaneceu com pouca diferença com a variação do campo elétrico e com a temperatura ficando próximo de um.

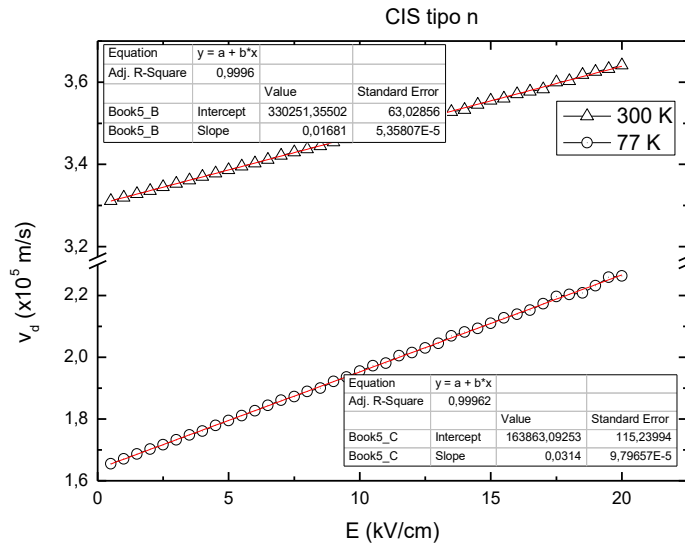


Figura 7.9: Velocidade de deriva para o CIS em função do campo elétrico nas temperaturas de 300 e 77 K.

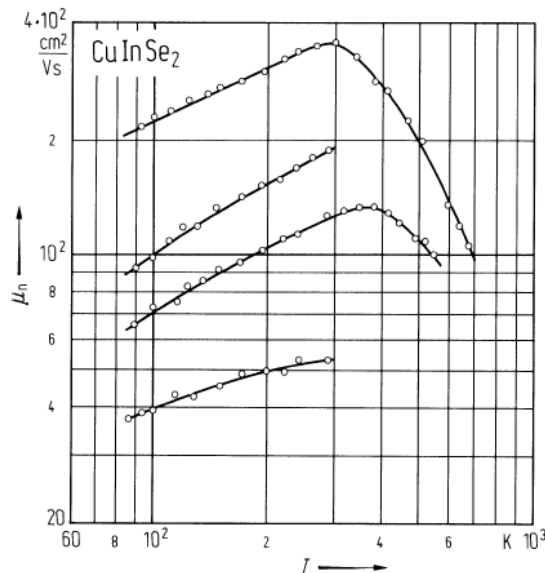


Figura 7.10: Mobilidade elétrica em função da temperatura para quatro amostras de CIS com dopagens tipo n (Extraída da Referência [85]).

O coeficiente Hall a 300 K apresentou-se praticamente constante com a variação do campo elétrico, ficando em torno de $-0,6 \text{ cm}^3/\text{C}$ em baixo campo. Quando reduzimos a temperatura para 77 K, surgiu uma forte dependência com o campo elétrico como pode ser visto na figura 7.11. Com este comportamento, não pudemos determinar seu valor em baixo campo pois aparentemente ele apresenta um crescimento quase linear até o campo elétrico aplicado de 3 kV/cm e depois torna-se praticamente constante.

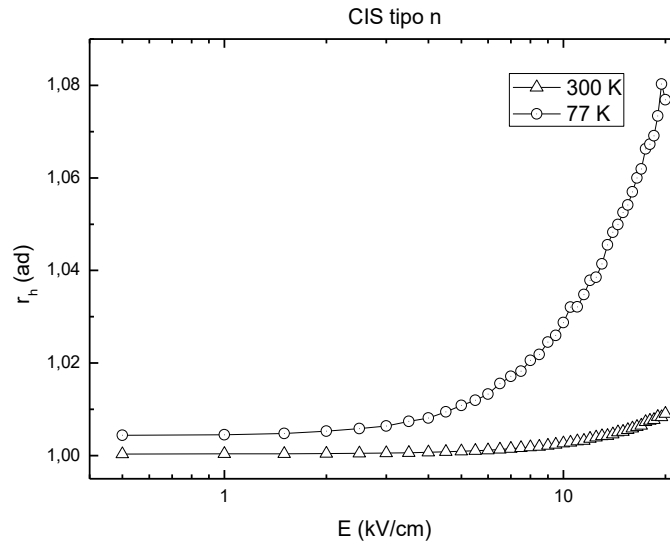


Figura 7.10: Variação do fator Hall com a temperatura e o campo elétrico para o CIS.

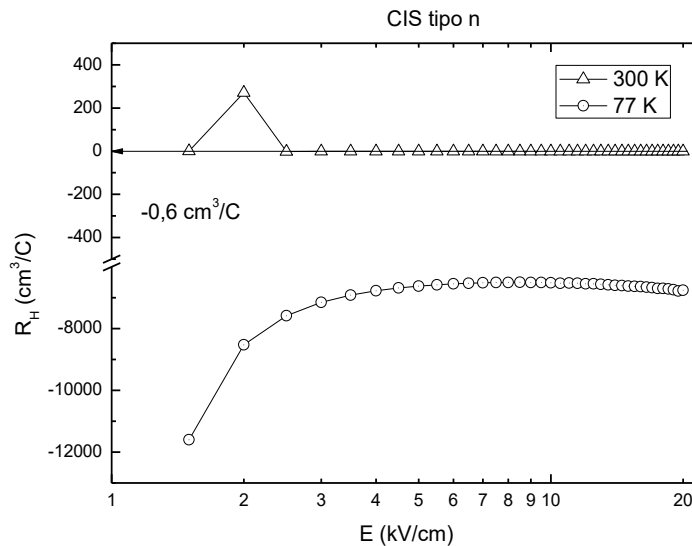


Figura 7.11: Variação do Coeficiente Hall com a temperatura e o campo elétrico para o CIS. O sinal negativo no coeficiente Hall indica um tipo de portador durante a simulação.

Aplicando a equação 7.2, a resistividade nestas duas temperaturas variou entre $200 \Omega cm$ e $1,2 \cdot 10^6 \Omega cm$ com as curvas apresentando comportamentos distintos. Aparentemente a baixo campo a resistividade tende a obter um comportamento constante em baixa temperatura, enquanto a temperaturas maiores ele tende a um acréscimo. A grande diferença entre estes valores acompanha o comportamento do coeficiente Hall descrito anteriormente.

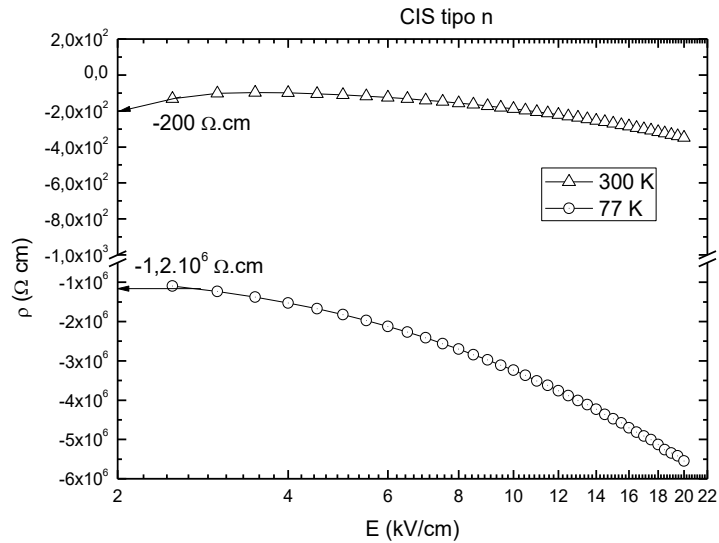


Figura 7.12: Resistividade em função do campo elétrico aplicado nas temperaturas de 77 K e 300 K para o CIS tipo n.

7.1.3 Resultados da Simulação Monte Carlo para o GaAs

O arseneto de gálio foi utilizado anteriormente para os testes do método Monte Carlo e os resultados das taxas de espalhamento e velocidade de deriva foram apresentados no capítulo três desta tese. Aqui apresentaremos apenas o comportamento referente a mudança proposta na simulação, no intuito de comparar com os resultados obtidos como CIS e o dióxido de estanho. O resultado do fator Hall (Figuras 7.13 e 7.14) para este material mostrou uma forte dependência com o campo elétrico, ficando próximo de 1,52 em baixo campo e a 300 K e caindo para 1,14 em 77 K.

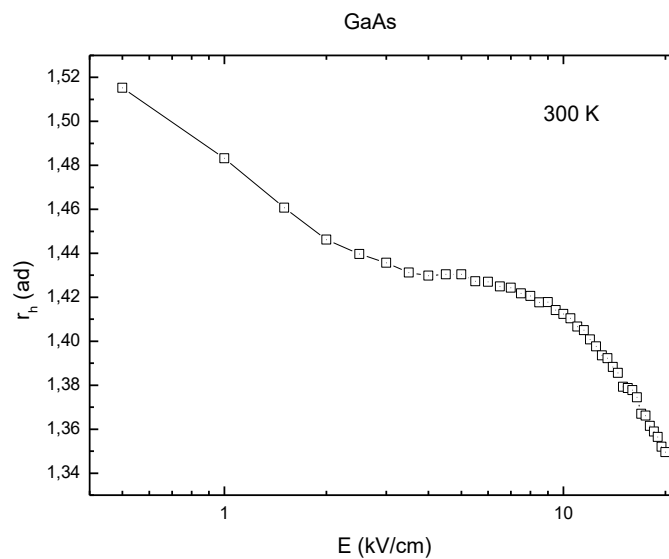


Figura 7.13: Variação do fator Hall com o campo elétrico para o a GaAs a 300 K.

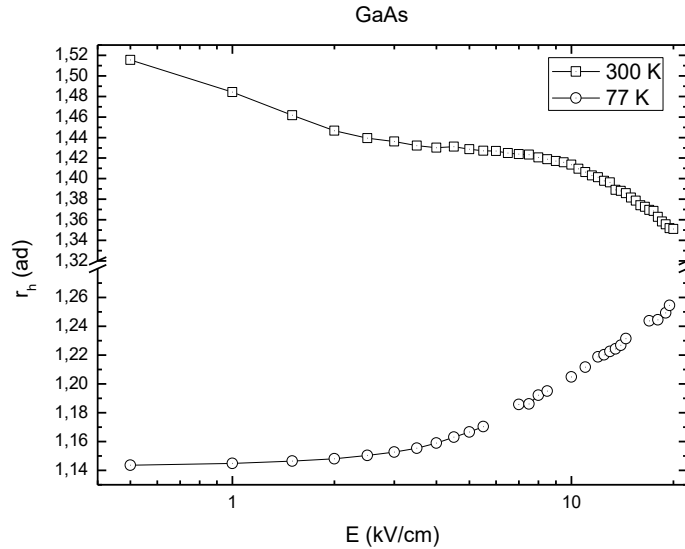


Figura 7.14: Variação do fator Hall com o campo elétrico para o a GaAs a 77 e 300 K.

O coeficiente Hall apresentou dois valores distintos (Figura 7.15), em baixo campo estaria em torno de $-164 \text{ cm}^3/\text{C}$ e em campos altos $-1417 \text{ cm}^3/\text{C}$ para as temperaturas de 77 e 300 K. O interessante é que surgiram dois picos distintos em função destas temperaturas onde, aparentemente, o sinal do coeficiente Hall mudou, ou seja, se o sinal negativo representa um material tipo n , nestes valores de campo elétrico o material tornou-se tipo p e retornando à condição inicial para campos acima de $7,2 \text{ kV/cm}$.

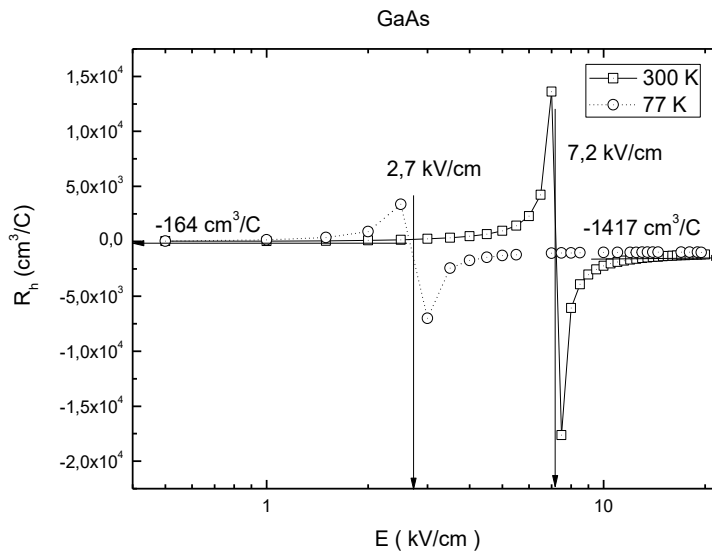


Figura 7.15: Coeficiente Hall em função do campo elétrico aplicado para o a GaAs a 77 K e 300 K.

A concentração impurezas ionizadas utilizadas no cálculo foi a mesma apresentada na tabela 4.1, $8,0 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, onde não incluímos sua dependência com a temperatura, e comparando com a concentração estimada pelo coeficiente Hall, ela permanece próxima deste valor em baixo campo mas sofre um redução de aproximadamente $2,0 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ após estes picos. Vale a pena ressaltar que esta

descontinuidade em função da temperatura não foi encontrada na literatura, o que pode ser explicado a partir do aumento da concentração dos portadores para o vale X devido ao espalhamento intervalas, deixando níveis vazios nas impurezas, que por sua vez irão participar da corrente elétrica.

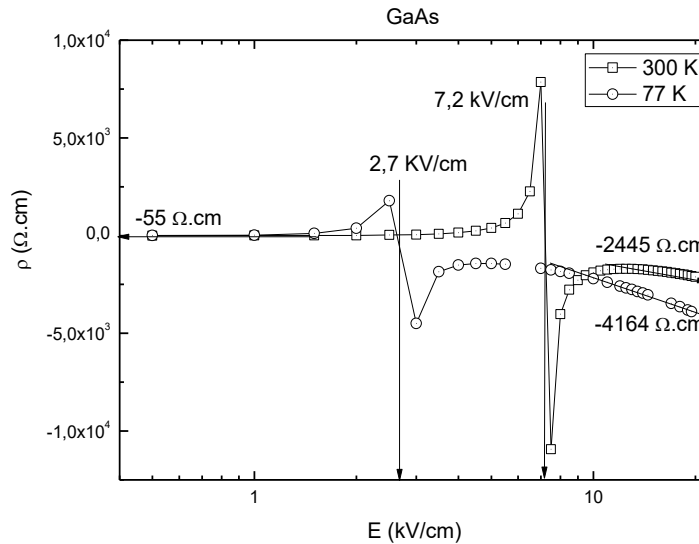


Figura 7.16: Variação da resistividade com o campo elétrico para a GaAs a 77 e 300 K.

A resistividade mais uma vez acompanhou o comportamento do coeficiente Hall com a diferença em apresentar dois valores distintos em campos elétricos altos (Figura 7.16) nas temperaturas de 77 K e 300 K e o mesmo valor em campo baixo.

7.1.4 Resultados da Simulação Monte Carlo para o CuO e Cu₂O

Como o comportamento não seria esperado, realizamos a simulação em outros tipos de amostras na tentativa de identificar alguma falha no programa. Os primeiros testes comparativos foram realizados com o CuO e o Cu₂O em temperatura ambiente.

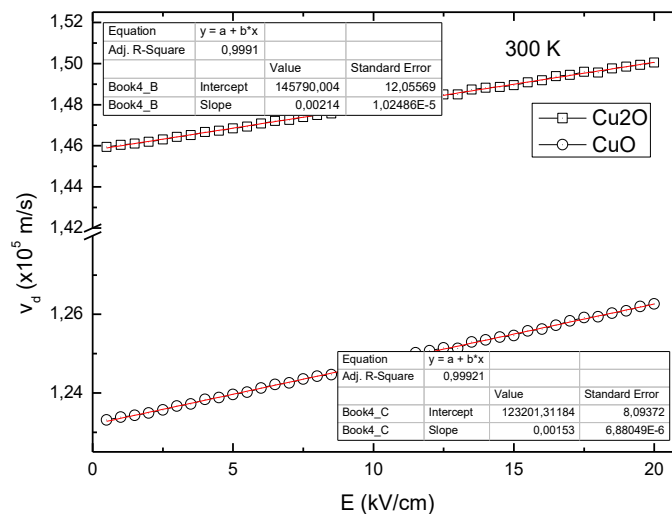


Figura 7.17: Velocidade de deriva em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o CuO e Cu₂O.

A curva de resposta da velocidade de deriva em função do campo elétrico aplicado apresentou-se bastante linear (Figura 7.17), com uma inclinação aproximadamente igual. Alguns parâmetros físicos necessários para a aplicação do método Monte Carlo para estes materiais não foram encontrados na literatura, então optamos por utilizar os referentes ao GaAs, mesmo nesta condição, o resultado obtido não apresentou o pico de transição intervalas.

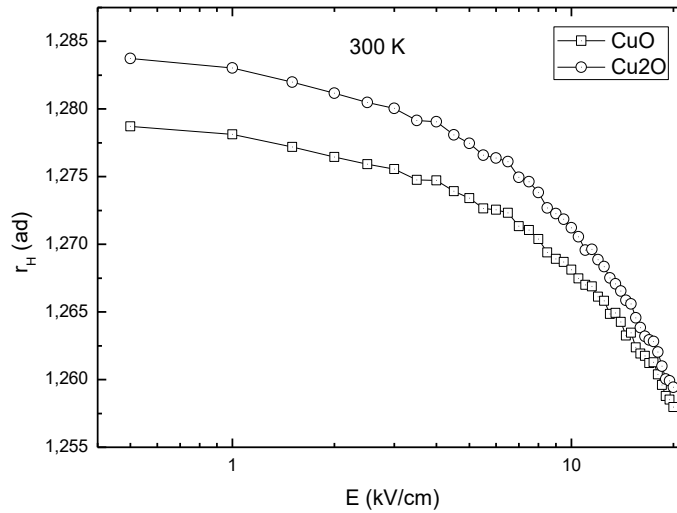


Figura 7.18: Fator Hall em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o CuO e Cu₂O.

O fator Hall apresentou o mesmo comportamento em função do campo elétrico para os dois materiais ficando em torno de 1,28 em baixo campo, mas comparando com o arseneto de gálio ele sofreu uma variação mais uniforme (Figura 7.18). Durante a simulação foram testados como se o material tivesse gap direto e indireto, ou seja, os mecanismos de espalhamento referentes a semicondutores com gap indireto foram levados em conta ou não.

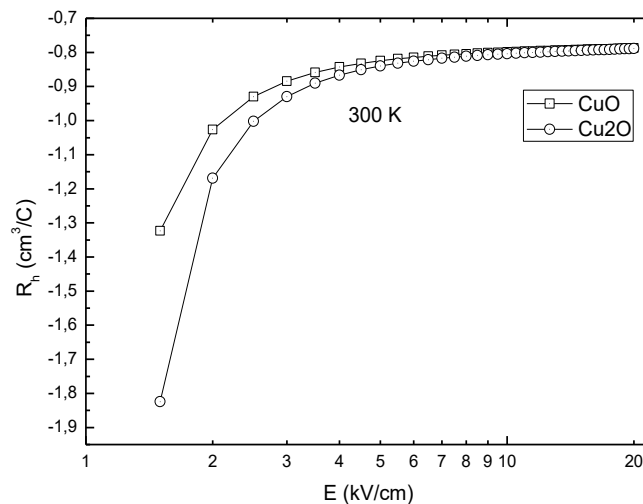


Figura 7.19: Variação do coeficiente Hall em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o CuO e Cu₂O.

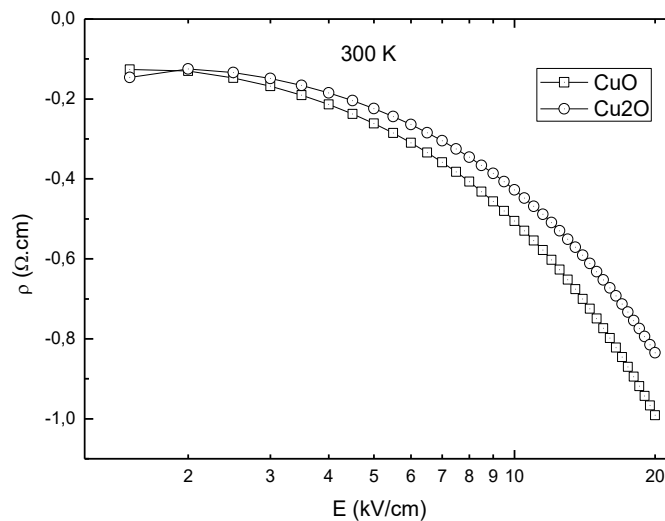


Figura 7.20: Variação da resistividade em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o CuO e Cu₂O.

Além disso, foi observado que para alguns valores do campo elétrico o programa não convergia, ou seja, a seleção do mecanismo de espalhamento sempre encontrava o espalhamento fictício, não sendo o espalhamento real, o que deixava de computar, deixando assim, sem valores para o fator Hall e para o coeficiente Hall. A resistividade destes materiais apresentou-se de forma bem-comportada com a aplicação do campo e praticamente indiferentes (Figura 7.20). A aproximação do valor da resistividade a baixo campo está diferente em relação aos dados teóricos apresentados na tabela 6.1 onde podemos analisar é que sem os seus parâmetros físicos corretos o resultado da simulação não irá representar o valor real.

7.1.5 Resultados da Simulação Monte Carlo para o InSb

Em vista do resultado anterior, optamos por simular o InSb, pois outros autores [84] [86] realizaram simulações neste material, logo com os parâmetros que ele utilizou poderemos ter uma comparação entre as simulações.

Ozbas e Akarsu [84] utilizaram um campo elétrico máximo de $1,0 \text{ kV/cm}$ a uma temperatura de 77 K , além de considerar apenas espalhamento por fônons óticos e acústicos e por impureza ionizada. Neste trabalho a mobilidade elétrica a baixo campo ficou acima de $1,17 \times 10^7 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ (Figura 7.21) enquanto o resultado experimental indica que estaria em torno de $2,0 \times 10^6 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ [87].

Na Figura 7.22 apresentamos o resultado da nossa simulação onde apresentou um valor inferior ao anterior quando tomamos a aproximação a baixo campo (em torno de $4,0 \times 10^6 \text{ cm}^2/\text{V.s}$). Esta diferença foi ocasionada pelos diferentes processos de obtenção da mesma grandeza, e além disso, o autor também não informou a carga da impureza, pois vimos que a variação na concentração e na carga da impureza afeta o mecanismo de espalhamento por impureza ionizada levando a uma diferença nos valores computados.

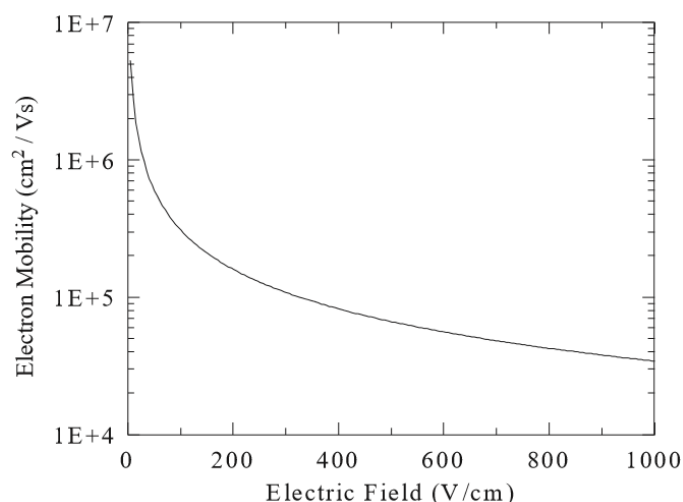


Figura 7.21: Mobilidade Elétrica em função do campo elétrico aplicado em 77 K para o InSb (Extraído da Referência [84]).

Mesmo assim os valores do fator Hall apresentaram-se distintos do arseneto de gálio onde na faixa entre 1 e 2 kV/cm ficou acima de dois, o que experimentalmente não tinha sido observado, ou seja, deveria estar na faixa entre um e dois como dito anteriormente. Esta variação, de acordo com a expressão 6.4, representa uma diferença significativa aos resultados, o que justifica a diferença na velocidade de deriva encontrada.

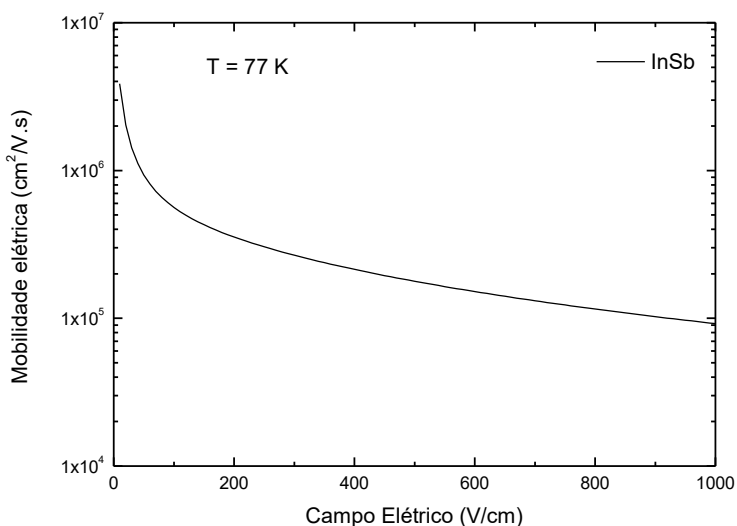


Figura 7.22: Mobilidade Elétrica em função do campo elétrico aplicado em 77 K para o InSb obtida.

O coeficiente Hall sofreu forte acréscimo com o aumento do campo elétrico partindo de $3,6 \cdot 10^3$ a $8 \cdot 10^8 \text{ cm}^3/C$. Esta variação não é a mesma das apresentadas anteriormente, que indica mais uma vez que os parâmetros utilizados para cada semiconductor são responsáveis pelo seu comportamento durante a simulação escrita.

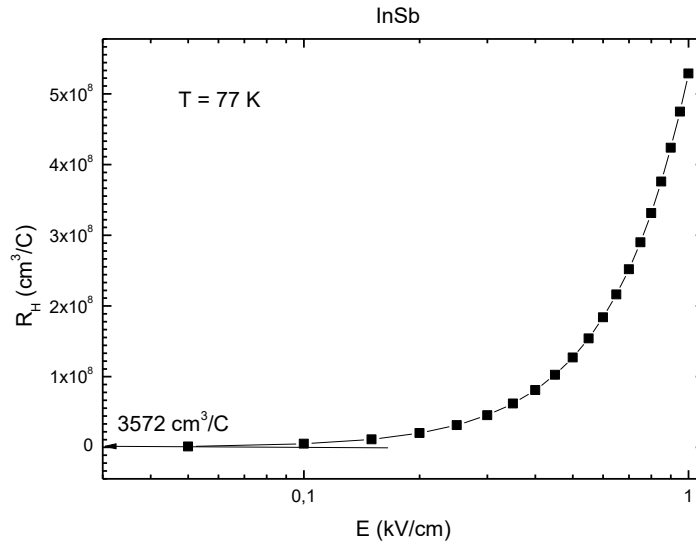


Figura 7.23: Coeficiente Hall em função do campo elétrico aplicado a uma temperatura de 77 K para o InSb.

A resistividade para o InSb ficou em torno de $1,7 \cdot 10^{-3} \Omega \text{cm}$ em baixo campo (Figura 7.24) o que não pôde ser comparado, pois tínhamos apenas o comportamento da mobilidade de deriva apresentada pelo autor, visto que o método Monte Carlo existente não determinava a resistividade dos materiais. Sendo assim, escolhemos outro material, agora contendo o gálio, o antimônio de gálio, pois seus parâmetros intrínsecos estavam disponíveis na literatura.

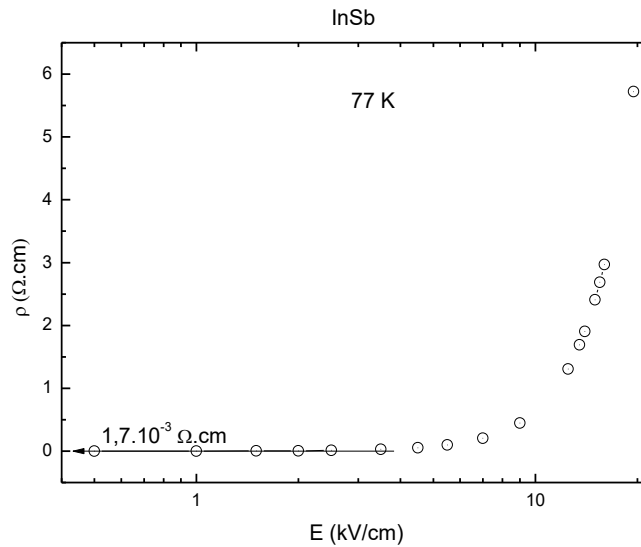


Figura 7.24: Resistividade em função do campo elétrico aplicado à 77 K para o InSb.

7.1.5 Resultados da Simulação Monte Carlo para o GaSb

Para o GaSb, o comportamento da velocidade de deriva dos elétrons não foi linear como para os materiais descritos anteriormente (Figura 7.25), e sim uma variação quase linear a partir de certo valor do campo elétrico aplicado, ou seja, aparentemente seria uma combinação entre a variação do GaAs e os outros materiais estudados até agora.

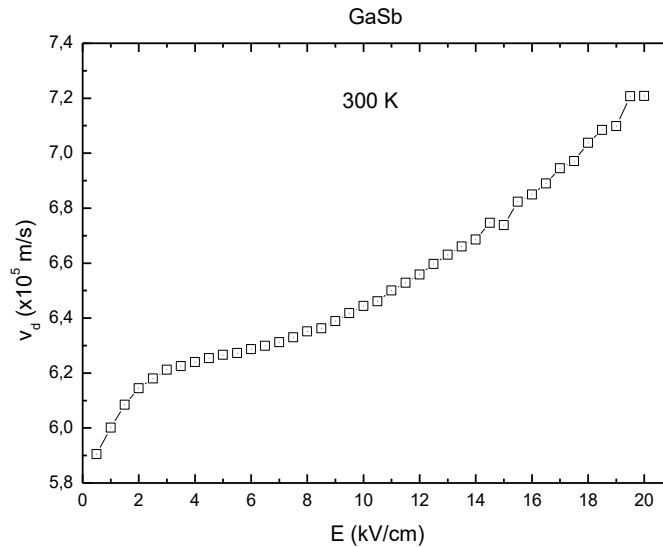


Figura 7.25: Velocidade de deriva em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o GaSb.

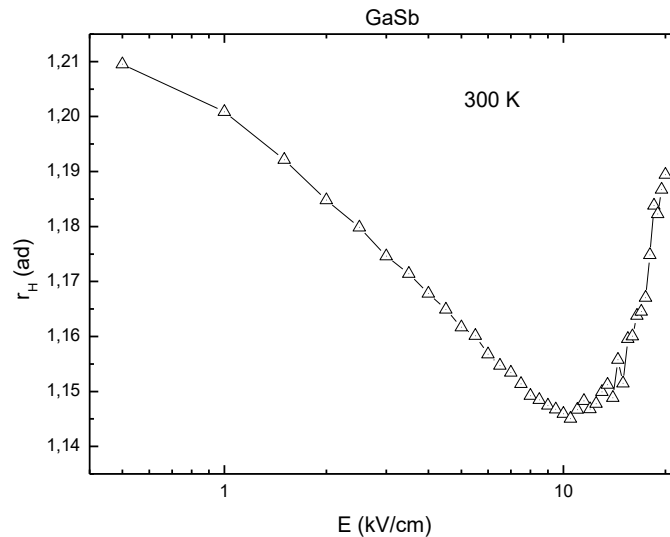


Figura 7.26: Fator Hall em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o GaSb.

O fator Hall ficou em torno de 1,14 e 1,21 nesta temperatura e nesta faixa de campo elétrico aplicado (Figura 7.26), ou seja, praticamente independente do campo elétrico se considerarmos a pequena variação sofrida.

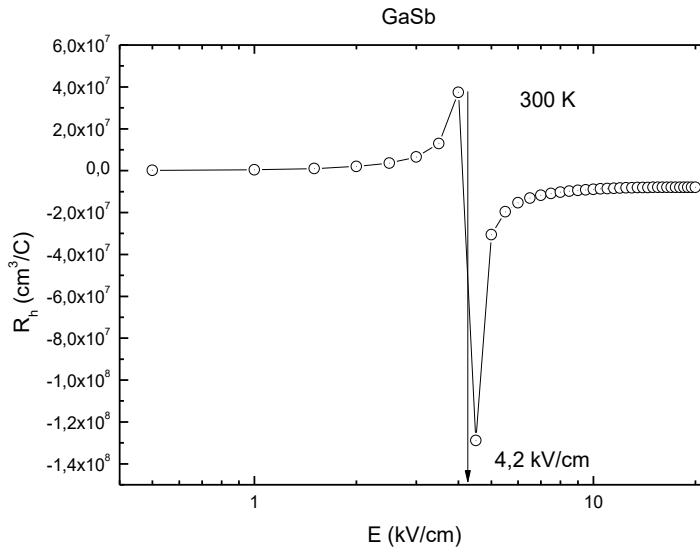


Figura 7.27: Coeficiente Hall em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o GaSb.

Na Figura 7.27 vemos que o coeficiente Hall voltou a apresentar a descontinuidade vista no GaAs mas em outro valor de campo aplicado, intermediário entre as duas temperaturas vistas anteriormente. Isto indica que os picos apresentados anteriormente estão relacionados com o material e do tipo de gap, direto ou indireto. Por fim, a resistividade mais uma vez acompanhou o comportamento do coeficiente Hall (Figura 7.28), mostrando a descontinuidade neste campo elétrico com dois valores claramente distintos, um a baixo campo outro a campos intensos.

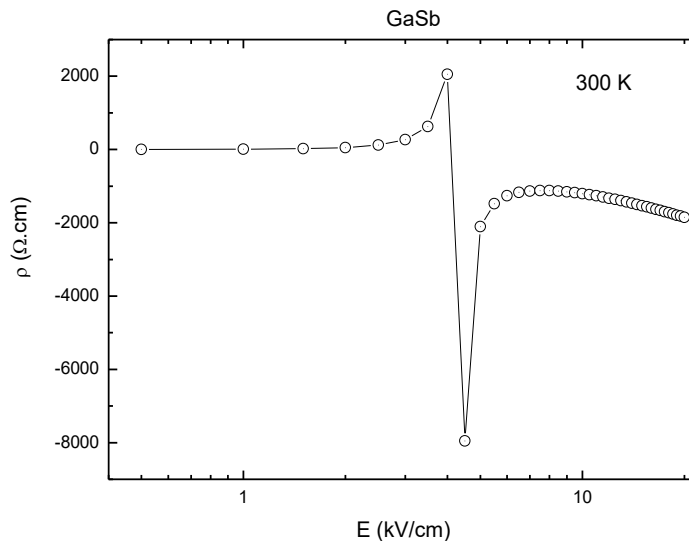


Figura 7.28: Variação da resistividade em função do campo elétrico aplicado em temperatura ambiente para o GaSb.

7.2 Resultados Experimentais do Coeficiente Hall

As primeiras medidas foram realizadas em amostra de $\text{SnO}_2:F$ fornecidas pela empresa Flexitec onde foram medidas a resistividade e a mobilidade Hall em função da temperatura. Como este tipo de amostra apresenta uma alta concentração de dopagem os valores de resistividade não apresentaram uma variação significativa com a temperatura (Figura 7.29).

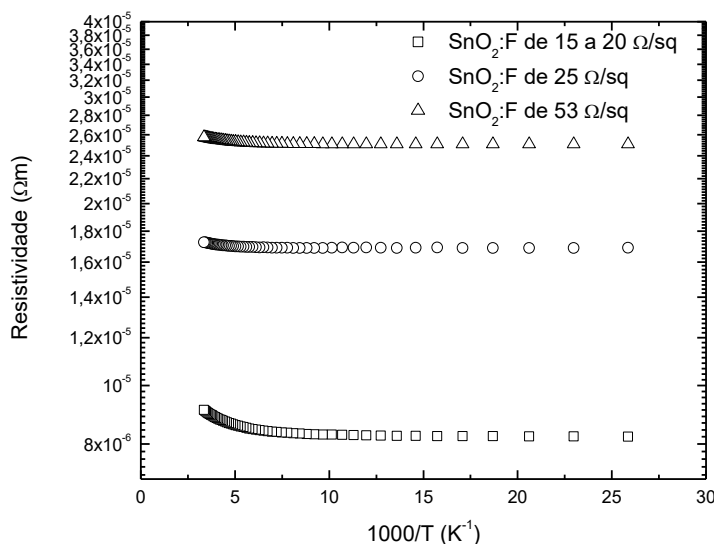


Figura 7.29: Variação da condutividade com a temperatura para amostras de $\text{SnO}_2:F$ em diferentes dopagens.

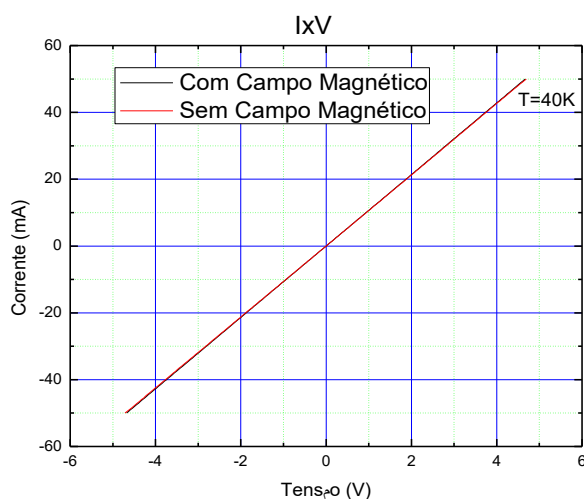


Figura 7.30: Curva $I \times V$ com e sem campo magnético aplicado para uma das amostras de $\text{SnO}_2:F$ a uma temperatura de 40K.

Antes da realização das medidas do coeficiente Hall, foi verificado se existiria alguma diferença na corrente aplicada quando o campo magnético fosse aplicado (Figura 7.30). Isto foi feito realizando medidas de $I \times V$ com e sem o campo magnético aplicado, onde constatamos que não apresentaram uma variação significativa.

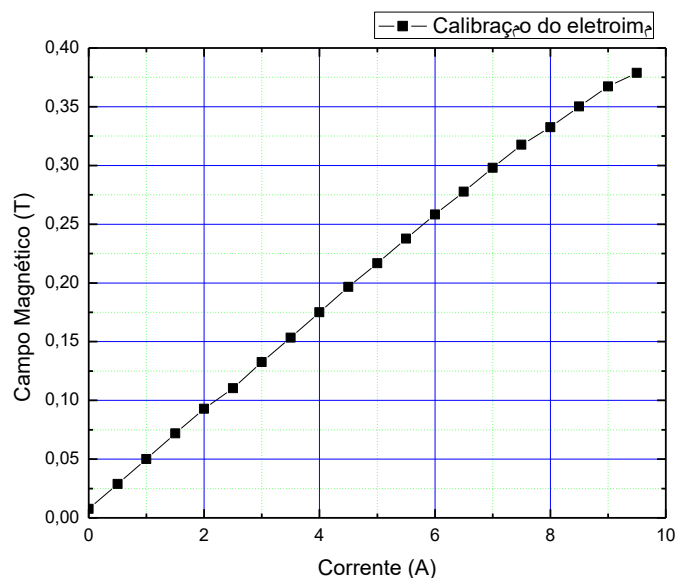


Figura 7.31: Curva de Calibração do Eletroímã.

A calibragem do eletroímã foi verificada variando a corrente da fonte e medindo a intensidade do campo magnético. Os resultados foram comparados com a curva de calibração fornecida pelo fabricante onde constatamos uma perfeita igualdade entre ambos para a mesma abertura do entreferro (Figura 7.31). A seguir foi realizada uma medida do coeficiente Hall com a temperatura onde podemos observar que o valor apresenta-se praticamente linear na faixa de temperatura medida.

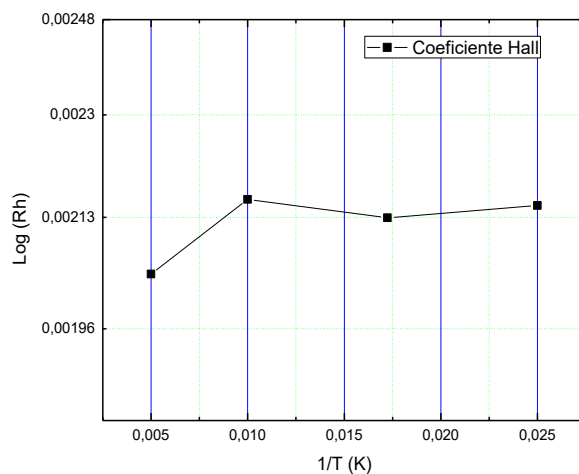


Figura 7.32: Variação do Coeficiente Hall com a temperatura para uma das amostras de SnO₂:F.

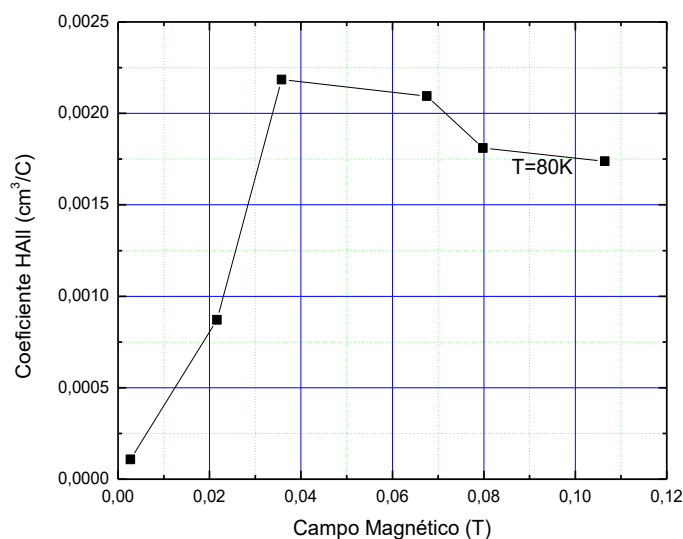


Figura 7.33: Variação do Coeficiente Hall com o campo magnético para uma das amostras de SnO₂:F.

Os resultados para as outras amostras apresentaram um comportamento semelhante. Quando variamos o campo magnético o coeficiente hall das amostras tiveram variação semelhante a descrita no capítulo dois onde podemos observar um pico em campos magnéticos fracos com uma tendência para um valor estável a medida que a intensidade do campo magnético aumenta. O mesmo comportamento repetiu-se em todas as amostras. Em um segundo caso onde a amostra apresenta uma concentração de dopante diferente, a variação do coeficiente Hall com a temperatura apresenta um comportamento estável em toda faixa medida e a condutividade começa a variar em temperaturas mais elevadas.

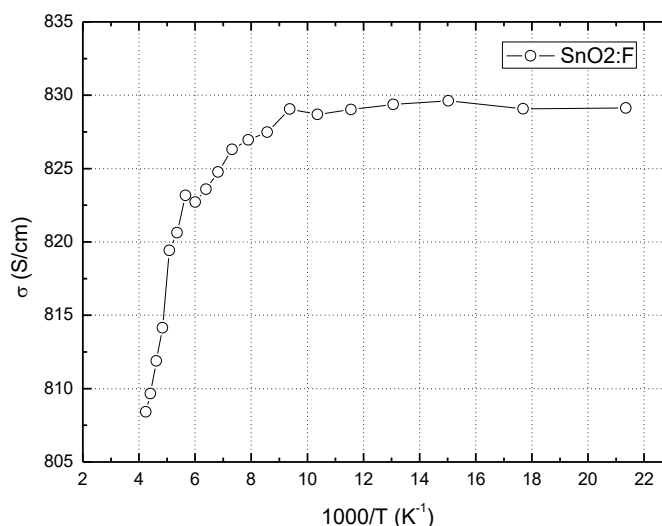


Figura 7.34: Variação da condutividade com o inverso da temperatura para uma amostra de SnO₂:F .

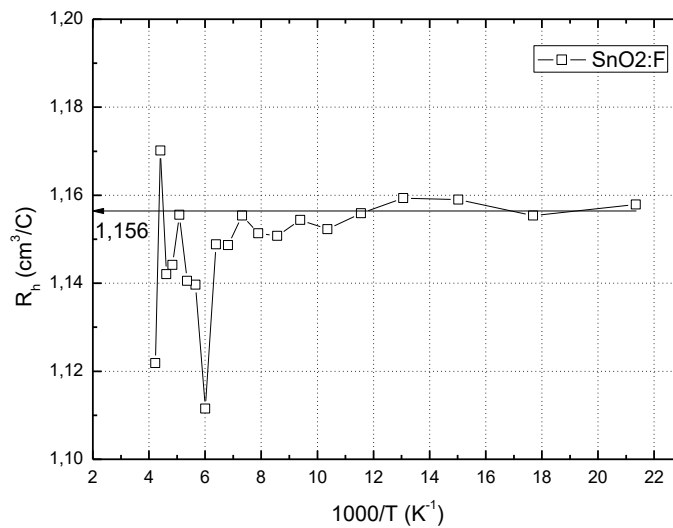


Figura 7.35: Coeficiente Hall com o inverso da temperatura para uma amostra de SnO₂:F.

Para outra série de amostra o comportamento do coeficiente Hall e da condutividade apresentaram características distintas.

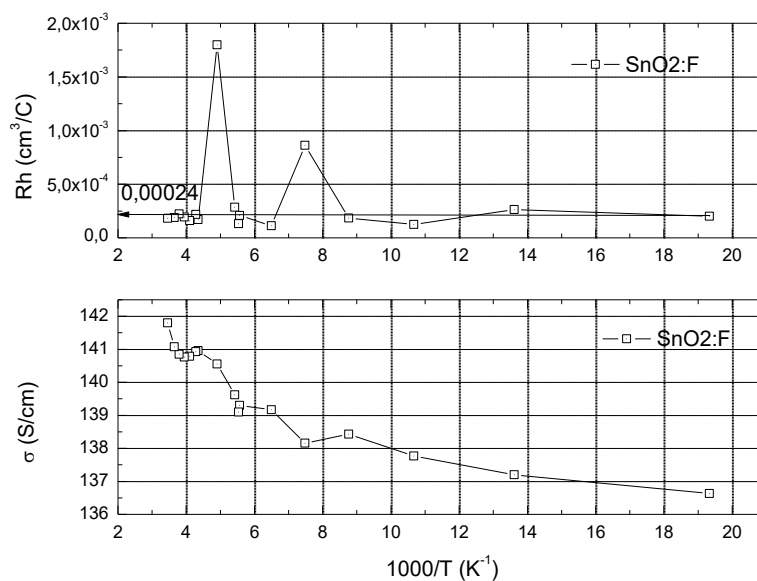


Figura 7.36: Variação do coeficiente Hall e da condutividade com o inverso da temperatura para uma amostra de SnO₂:F com diferente dopagem.

7.3 Resultados Experimentais das Correntes de Foucault

Como demonstrado no capítulo anterior, a presença da resistência induzida pela amostra desloca a frequência de ressonância e, conseqüentemente, seu valor pode ser determinado. Os resultados obtidos foram para o dióxido de estanho, uma amostra com dimensões de 15x15 cm. Mas com o intuito de realizamos testes em outros materiais, apresentamos a tabela abaixo com algumas de suas características.

Tabela 7.2: Condutividade dos materiais estudados no laboratório

Dados/Material	CIS	SnO ₂	Alumínio	Cobre	
ρ (Ω .m)	$2,1 \times 10^{-2}$	$8,3 \times 10^{-6} / 16,9 \times 10^{-6} / 25,1 \times 10^{-6}$	$2,65 \times 10^{-8}$	$1,72 \times 10^{-8}$	
σ (Ω .m) ⁻¹	47,6	121.000 / 59.200 / 39.900	$3,77 \times 10^7$	$5,81 \times 10^7$	
δ (mm) a 1 MHz	73	2,07	0,082	0,066	
a (μ m)	1,5	0,5	15 (folha de alumínio)	Maciço (δ)	1,0
$\Delta L/L$ a 1 MHz, R = 0,5 cm	$1,25 \times 10^{-7}$	(com a maior condutividade) $3,15 \times 10^{-4}$	5,59 A 50 kHz: 0,28	12	0,6

Com a montagem realizada, medimos uma variação de frequência de 145 Hz aplicando o substrato de vidro contra a bobina e de 212 Hz aplicando o filme de SnO₂ contra a bobina. Esta variação deve-se principalmente à mudança de interface do material como descrito no capítulo 5, ou seja, teoricamente deve-se levar em conta o meio incidente do potencial vetor gerado pela bobina. Os cálculos teóricos realizados a partir do programa Maple 18[®], mostram que a impedância da bobina sem amostra estaria em torno de 14 Ω . Utilizando a fórmula ligando a variação de frequência com a resistência induzida (equação 6.56), encontramos para esta amostra um resistência de 144 $k\Omega$.

Tabela 7.3: Variação de frequência do oscilador prevista pelo modelo e o valor medido

Valores Previstos		
ρ (Ω /m)	R ($k\Omega$)	δf (Hz)
$8,3 \cdot 10^{-6}$	83,44	360
$16,9 \cdot 10^{-6}$	169,9	180
$25,1 \cdot 10^{-6}$	252,3	120
Valor Medido		
$19,8 \cdot 10^{-6}$	144,0	212

Utilizando a expressão 6.56 que liga essa resistência com a resistividade do filme, encontramos: $\rho = 19,8 \cdot 10^{-6} \Omega$.m, ou seja, um valor próximo do valor intermediário de resistividade medido pelo método de 4 pontas ou Van der Pauw. O modelo completo (Maxwell + função de Green) explica a diminuição do deslocamento de 212 Hz para 145 Hz, afastando o filme condutor de SnO₂ de 1,2 mm da bobina (espessura do substrato de vidro), pois este modelo leva em conta a distância da bobina à amostra.

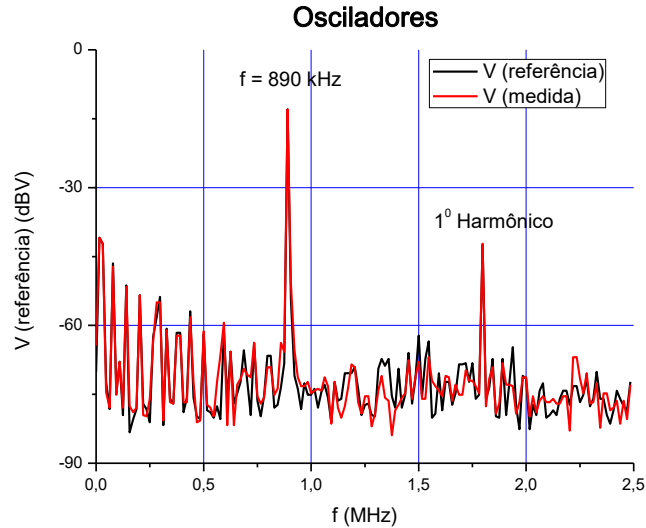


Figura 7.37: Espectros FFT dos dois osciladores (não dá para perceber diferença de frequência)

Analisando o espectro de frequência não encontramos diferença entre o pico de ressonância entre a frequência de referência e a frequência medida, o que indica que a presença do material semiconductor é a responsável pelo deslocamento encontrado. E que esta variação detectada (Figura 7.38) é decorrente do material e depende além do afastamento da bobina de detecção, ela varia também em qual interface está mais próxima da mesma.

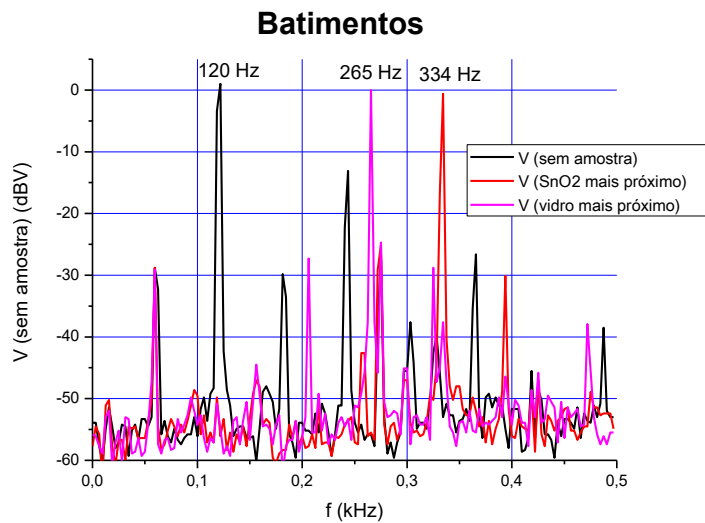


Figura 7.38: Espectros FFT dos batimentos, (1) sem amostra (120 Hz), (2) com filme de SnO_2 afastado de 1,2 mm da bobina (265 Hz) e (3) com filme de SnO_2 tocando a bobina (334 Hz).

Observação: Cada espectro apresenta a mesma linha em 60 Hz, devido à rede elétrica.

Não foi possível realizar os testes para os outros materiais apresentados na tabela 7.2 pois os mesmos não tinham dimensões suficientes e para que o método fosse aplicado, ou seja, mesmo utilizando as chapas de cobre ou alumínio, os resultados seriam os mesmos descritos pela teoria básica.

7.4 Resultados Experimentais de Fotocondução

As propriedades eletrônicas do Si:Bi e Si:P,Bi foram fortemente estudadas durante os últimos anos devido ao grande interesse na física dos materiais com desordem [88] [89] [83]. Estes sistemas de duplo-doadores provoca um aumento na desordem por causa das diferentes energias de ionização dos elementos dopantes, o que é observado com uma diminuição da foto-corrente gerada, ocasionando uma diminuição da mobilidade dos portadores, quando mantêm-se o campo elétrico aplicado e o fluxo luminoso incidente constantes. Sabe-se também que a transição metal-não-metal (MNM) ocorre com concentrações em torno de $2.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ para Si:Bi e para as amostras Si:P,Bi este valor reduz para $6.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, o que indica uma forte influência do segundo dopante no comportamento elétrico destes materiais.

Existe ainda um deslocamento do gap ótico devido ao aumento da concentração de impurezas tanto ao Si:Bi quanto ao Si:P,Bi o que é observado em medidas de fotocondução. Medidas de espectrometria por espalhamento Rutherford mostraram que com uma dopagem de $5.9 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ o silício cristalino torna-se amorfo até uma profundidade de 120nm, quando aumenta a dopagem, este valor aumenta.

Durante as medidas, analisamos o comportamento da foto-corrente em função da concentração de dopantes e com a variação da temperatura. Um estudo preliminar [90] mostra que existe uma dependência da foto-corrente máxima com o inverso da concentração de impurezas, enquanto que a corrente no escuro não dependeria desta concentração. Verificamos também, que quando adotamos uma mobilidade unicamente devido a impurezas ionizadas, surge uma dependência linear com a temperatura enquanto que a corrente no escuro depende de $T^{3/2}$. Foram realizadas medidas de espectrometria Raman para verificar a existência de ligações entre os átomos e EDS em algumas amostras. O comportamento da foto-corrente e do deslocamento do gap ótico foi comparado com outros trabalhos.

7.4.1 Detalhes Experimentais

Cinco wafers de silício tipo *p* com orientação (100) foram dopadas por implantação iônica com fósforo e bismuto, com exceção da amostra 32 que foi dopada apenas com Bi, onde foram usadas como dispositivos Van der Pauw. A profundidade de penetração dos átomos de Bi e P estendem-se da superfície até uma profundidade de $0.15 \mu\text{m}$ de acordo com a simulação TRIM, com um desvio estimado de 5% [88] [89] [90] [91].

Os valores de mobilidade e concentração na tabela a seguir foram realizados a partir do efeito Hall em temperatura ambiente [83] e os valores da resistência de folha foram obtidos a partir do método de quatro pontas. As amostras apresentam-se com uma máscara de SiO_2 e soldas de índio com fios de ouro para os contatos. Não foi indicada a porcentagem de cada elemento dopante, apenas a concentração estimada via medidas Hall que está em torno da transição metal isolante.

Tabela 7.4: Características elétricas das amostras estudadas (Extraído da Referência [83])

Amostra N°	Rs (Ω/sq)	μ_H ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	N_d (10^{18} cm^{-3})	% de dopante
32	402	103	12,7	100% Bi
A2D	184	125	9,68	-
92D	203	129	8,46	-
61	230	136	7,14	-
92	244	129	6,18	-
74	258	153	5,3	-

7.4.2 Fotocorrente em Temperatura Ambiente

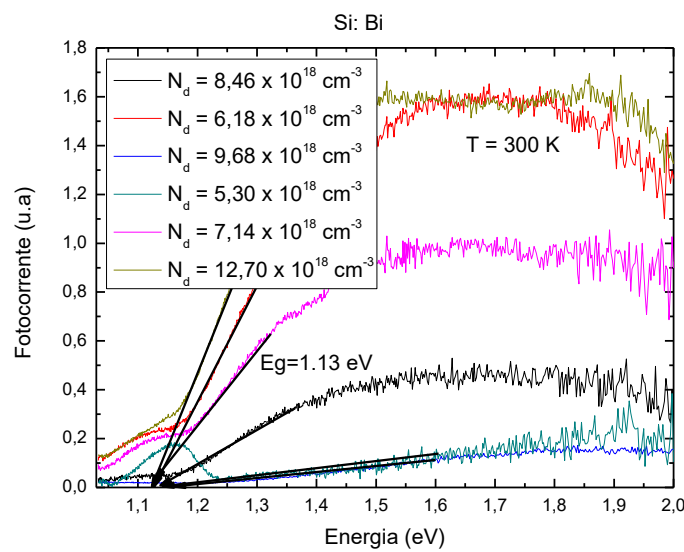


Figura 7.39: Indicação da energia do gap do silício nas amostras pelas medidas de fotocondução.

As medidas da fotocorrente gerada apresentaram comportamento distinto para as diferentes concentrações de dopante, mas em todas as amostras estudadas foi possível avaliar a energia de gap do silício.

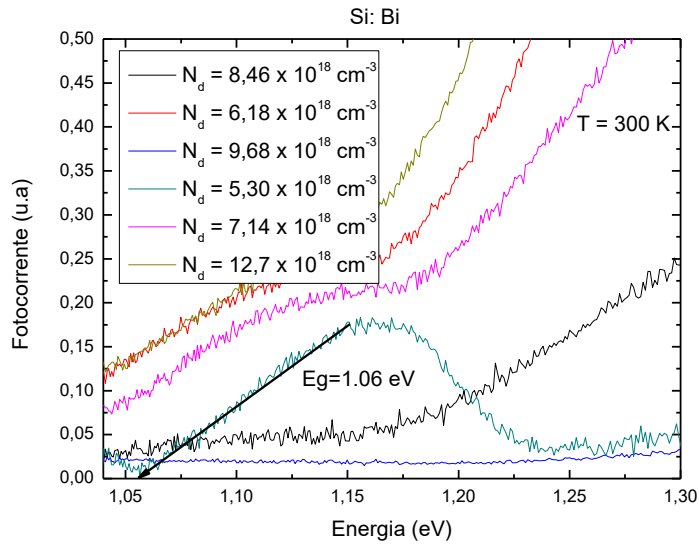


Figura 7.40: Ampliação da região do Gap para as amostras de Si:Bi em temperatura ambiente.

Na Figura 7.39, observa-se que ainda existe uma absorção na região do gap que vem se superpondo à absorção do silício cristalino puro ($E > E_G$), particularmente na amostra 74. Essa absorção deve resultar da existência de níveis de impureza na vizinhança da banda de valência, supondo que o material é do tipo n (dopagem pelo fósforo). Os espectros foram cortados a partir de 2 eV por causa do ruído de medida que se tornou bastante pronunciado acima desse valor. Se considerarmos uma transição indireta, o espectro da fotocorrente tem uma dependência da seguinte forma:

$$\alpha = A(h\nu - E_{G,1} - E_P)^2 \quad (7.3)$$

onde α é a intensidade da fotocorrente, A um coeficiente, $h\nu$ a energia do fóton, $E_{G,1}$ a distância entre o nível de Fermi e o topo da banda de valência e E_P a energia dos fônons da rede. Com isso, o valor de energia $E_{G,1}$ pode ser determinado pela extrapolação de uma linha entre $\alpha^{1/2}$ e $h\nu$ ao ponto que corta o eixo ordinário.

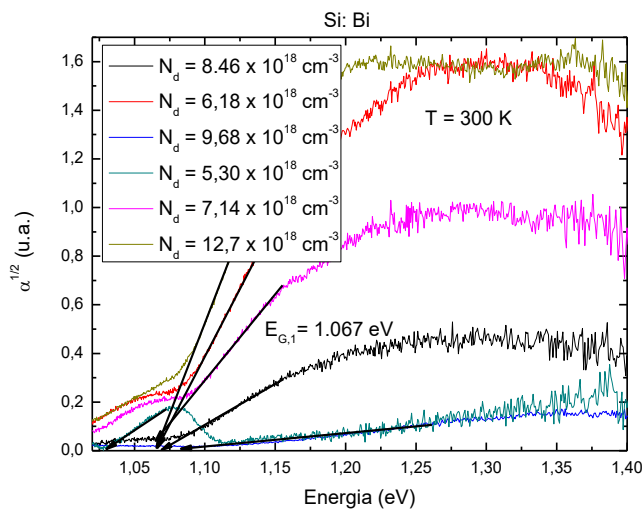


Figura 7.41: Determinação da energia limiar para transição indireta.

Como pode ser observado na Figura 7.41, este valor de energia ficou em torno de 1.07 eV para todas as amostras, com exceção da amostra 74 que apresentou um valor de 1.03 eV próximo do valor encontrado por outros autores [83].

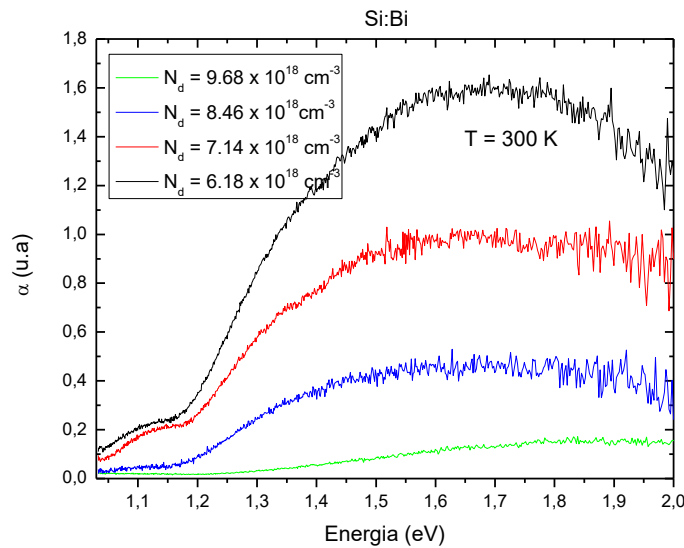


Figura 7.42: Comportamento da fotocondução com o aumento da concentração de dopante.

A seguir organizamos as amostras de acordo com a indicação da concentração dos portadores (Figura 7.42). O que chama a atenção é que de acordo com o aumento de dopagem ocorreu uma diminuição da fotocorrente para todas as amostras, com exceção das amostras 74 e 32 que apresentaram um comportamento diferente das demais.

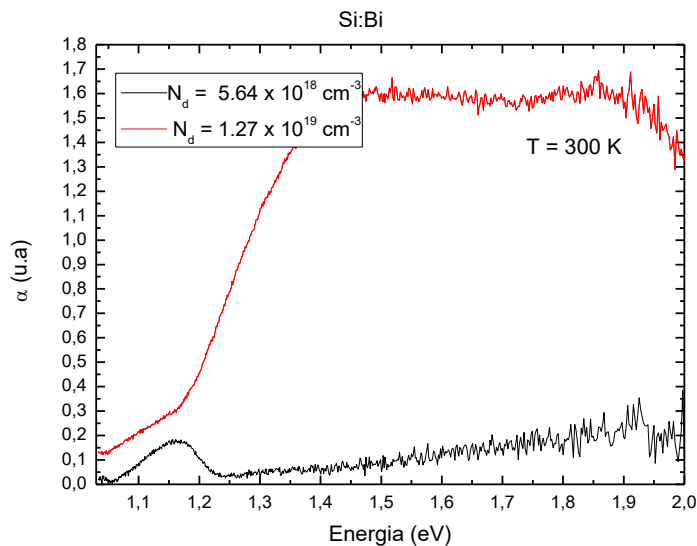


Figura 7.43: Comportamento anômalo das amostras 74 e 32.

É possível ordenar essas curvas através de uma normalização da amplitude. Observa-se que as três curvas com concentração de impurezas de $6,18 \cdot 10^{18}\text{ cm}^{-3}$, $7,14 \cdot 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ e $8,4 \cdot 10^{18}\text{ cm}^{-3}$, podem ser superpostas multiplicando sua amplitude pela concentração de impureza elevada à potência 4 (N_d^4). As curvas com concentrações de impureza de $5,64 \cdot 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ e $12,7 \cdot 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ não se encaixam nesse esquema, salvo

supondo que elas foram invertidas. Assim mantendo a amplitude da curva $12,7 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e multiplicando a curva $5,64 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ por 6, obtém-se a seguinte figura:

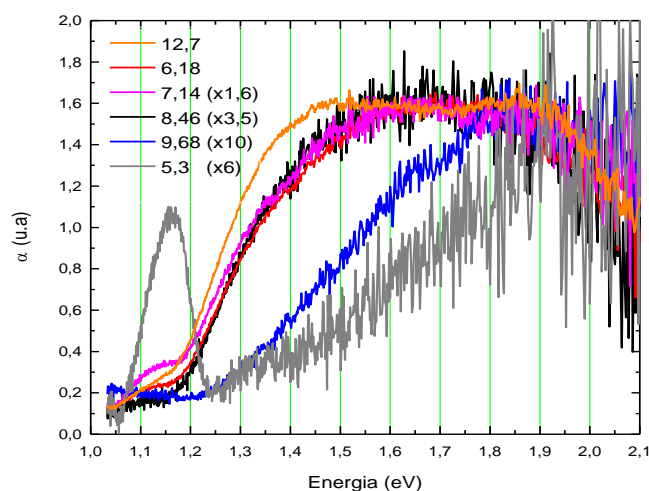


Figura 7.44: Outra maneira de apresentar o conjunto de espectros de fotocondutividade.

Com isto, a leitura dessas curvas fica mais clara onde podemos supor que com o aumento da concentração de impureza, o espectro da fotocorrente diminui progressivamente na região imediatamente acima do gap (de 1,1 a 1,9 eV). Enquanto isso surge uma banda de absorção de 1,05 a 1,25 eV e que globalmente, a amplitude da fotocorrente diminui com o aumento da concentração de impureza.

Essas observações podem ser explicadas considerando que a ocupação progressiva do fundo da banda de condução, à medida que a dopagem aumenta, eleva a energia de transição ótica ($E > E_G$). Paralelamente, a aparição de níveis aceitadores acima da banda de valência permite o surgimento de uma banda de absorção abaixo de E_G , fazendo com que a fotocorrente gerada seja diferente de zero para esta faixa de energia. E o aumento da taxa de recombinação com o aumento da concentração de impureza explica a diminuição global da fotocorrente.

Para procurar entender melhor, optamos por realizar medidas de EDS e Raman em algumas amostras que apresentaremos a seguir. Para a amostra 32 (maior concentração de Bi) não foi encontrado nenhum vestígio do dopante (Figura 7.45), tendo apenas um pico pronunciado de silício. Para a amostra 74 foi indicado ao programa do EDS que haveria bismuto e assim ele indicou a posição dos picos (Figura 7.46). Novamente não foi encontrado um valor significativo do mesmo.



Figura 7.45: Espectro EDS para a amostra 32.

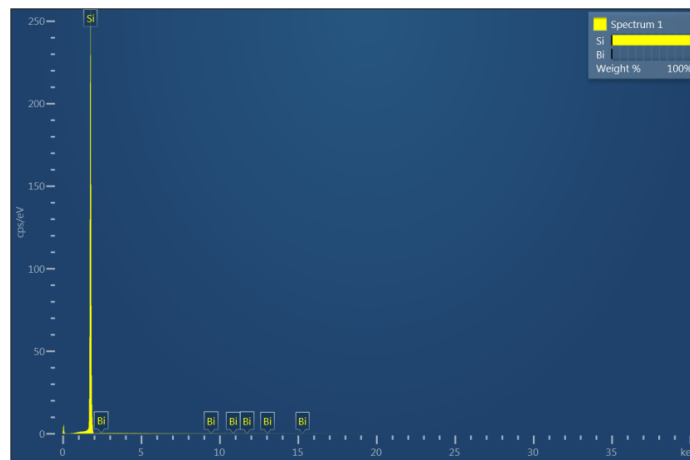


Figura 7.46: Espectro EDS para a amostra 74.

Devido a este impasse, resolvemos selecionar duas novas amostras com concentrações próximas das anteriores, neste caso as amostras 92 e A2D. Mas para nossa surpresa obtivemos no espectro de EDS o surgimento de picos referentes ao berílio (Figuras 7.47 e 7.48). Na tentativa de determinar a fonte do Be, realizamos o EDS sobre a solda de índio e sobre a máscara de SiO₂ nestas amostras, mas sem sucesso.

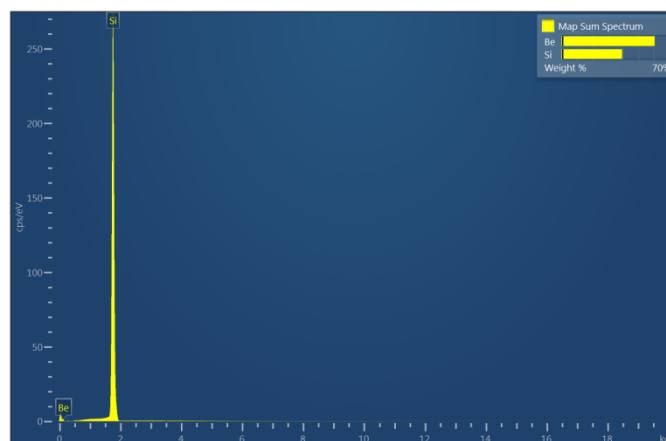


Figura 7.47: Espectro de EDS para a amostra A2D.

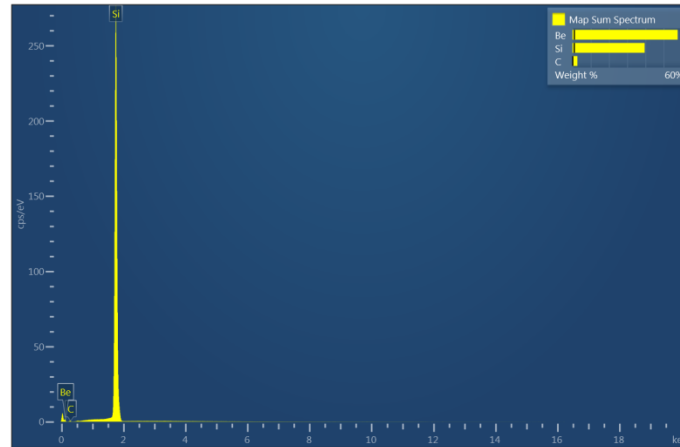


Figura 7.48: Espectro de EDS para a amostra 92.

Os resultados do Raman para as amostras 74 e 32 indicaram apenas os picos do silício. Foi feita uma varredura em todo o espectro do equipamento (100-8000) e não houve indicação de outro tipo de material presente (figura 7.49).

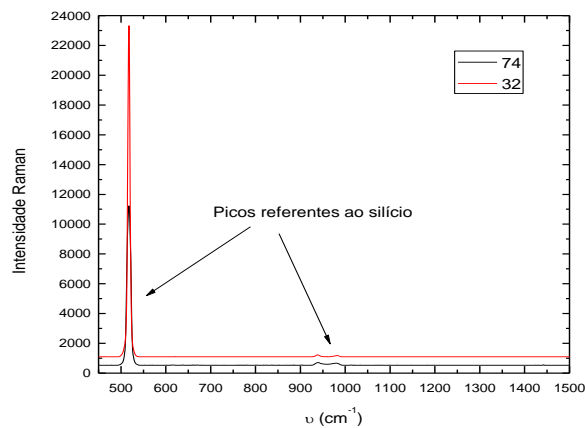


Figura 7.49: Espectro Raman para as amostras 74 e 32.

7.4.3 Fotocorrente em função da Temperatura

Para as medidas em função da temperatura foram selecionadas um novo conjunto de amostras com concentrações em torno da concentração crítica, N_c , com exceção das amostras dopadas com bismuto, pois não disponhamos de concentrações acima deste valor. A tabela a seguir reúne as informações sobre elas (Extraído da Referência [90]).

Tabela 7.5 : Características das amostras utilizadas para medida de fotocondutividade

Amostra	Si:Bi ⁺ ($N_c = 2,0 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$)		Si:P ⁺ ,Bi ⁺ ($N_c = 6,0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)			
Referência	03	52	14	34	61	A2D
$N_d \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	$1,05 \cdot 10^{19}$	$1,40 \cdot 10^{19}$	$2,88 \cdot 10^{17}$	$1,89 \cdot 10^{18}$	$7,14 \cdot 10^{18}$	$9,68 \cdot 10^{18}$
$R_s \text{ (}\Omega/\square\text{)}$	425	375	1174	399	230	184
$\mu_H \text{ (cm}^2/\text{V.s)}$	119	101	464	209	136	125
$\rho \text{ (}\Omega\text{.cm)}$	-	-	0.047	0.016	-	-

A espessura das amostras é de $0,75 \text{ mm}$ e suas dimensões são mostradas na figura abaixo. A área clara representa uma máscara isolante de SiO_2 e os círculos menores a

região dos contatos. A distância dos contatos na diagonal onde a tensão foi aplicada é de $6,0\text{ mm}$.

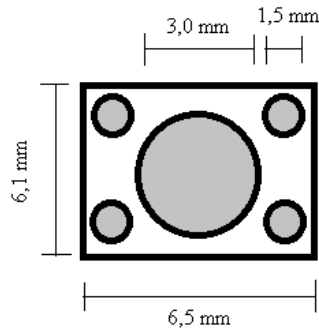


Figura 7.50 : Dimensões das amostras estudadas.

As amostras foram condicionadas no criostato de hélio líquido ao qual pode variar a temperatura entre 12 e 400 K com uma oscilação de $\pm 5\text{ K}$ permitida pelo controlador de temperatura, porém a temperatura mínima atingida no porta amostra foi 40 K . A variação na temperatura provocou uma oscilação na corrente de escuro entre 1,0 e 3,0 μA mantendo a tensão aplicada constante. Sendo assim, esta será a margem de erro nas leituras de temperatura e corrente. Para o monocromador, com as fendas de 1,56 mm , calculamos uma resolução de $0,01\mu m$ e o espectro foi varrido de 0,6 a 2,0 μm com uma rede de 600 tr/mm .

A tensão lida pelo lock-in, V_{psd} , está relacionada com o sinal de corrente enviado pelo picoamperímetro a partir do ganho gerado e este por sua vez depende da escala de leitura utilizada. Por exemplo, para a leitura de corrente na escala de 200 μA temos um ganho de 10.000, então a tensão lida pelo lock-in equivale a uma corrente de $V_{psd}/10.000$. Assim, todos os resultados serão apresentados como amplitude da fotocorrente medida, extraído o espectro da fonte e normalizada pela resposta do sensor. Durante a medida não verificamos efeitos bolométricos [92] na fotocorrente com a variação da frequência do chopper.

Durante as medidas em temperatura ambiente foi verificada a existência de uma fase no sinal lido pelo lock-in que variava com o comprimento de onda da radiação incidente. E com as medidas em função da temperatura ela também variava, assim o programa foi modificado para salvar os valores de amplitude e fase do sinal, além da dependência da corrente no escuro com a temperatura. A primeira amostra medida foi a A2D seguida pelas outras amostras dopadas com bismuto e fósforo, mas iremos apresentar primeiro os resultados das amostras dopadas apenas com bismuto. Todos os resultados apresentados neste capítulo para a fotocorrente estão normalizados pelo espectro da fonte.

7.4.3.1 Resultados para Si:Bi

O primeiro resultado é para amostra 03 onde verificamos uma variação significativa da fotocorrente com a energia do fóton em diversas temperaturas. Os valores medidos apresentaram bastantes ruidosos na faixa de energia entre 0,6 e 0,8 eV . Com o aumento da temperatura a intensidade do sinal foi aumentando até atingir um valor máximo em 220 K e a partir disso começou a reduzir. Como nas medidas em temperatura

ambiente, surgiu uma região de absorção dentro do gap do silício. Para realizar estas medidas mantivemos uma tensão constante de 0,1 V sobre a amostra.

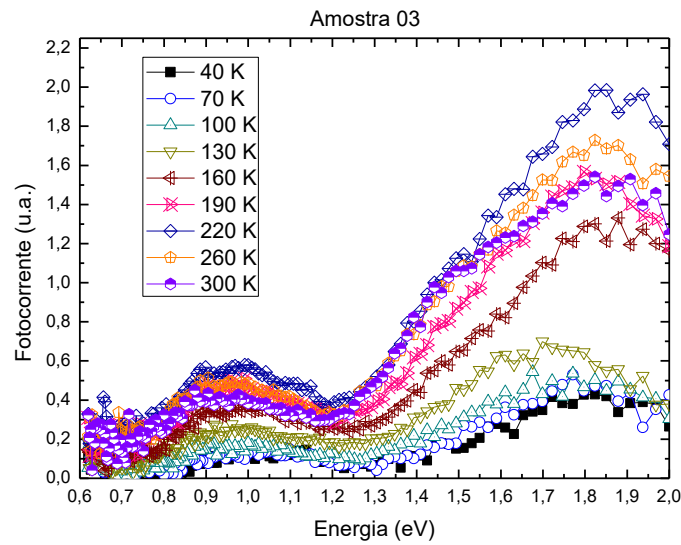


Figura 7.51: Amplitude da fotocorrente em função da energia do fóton incidente variando a temperatura para a amostra 03.

A fase do sinal apresentou-se praticamente constante com a energia do fóton incidente, mas teve variação significativa com a temperatura. E com um ruído bastante intenso na região entre 0,6 e 0,8 eV bem como em temperaturas mais baixas.

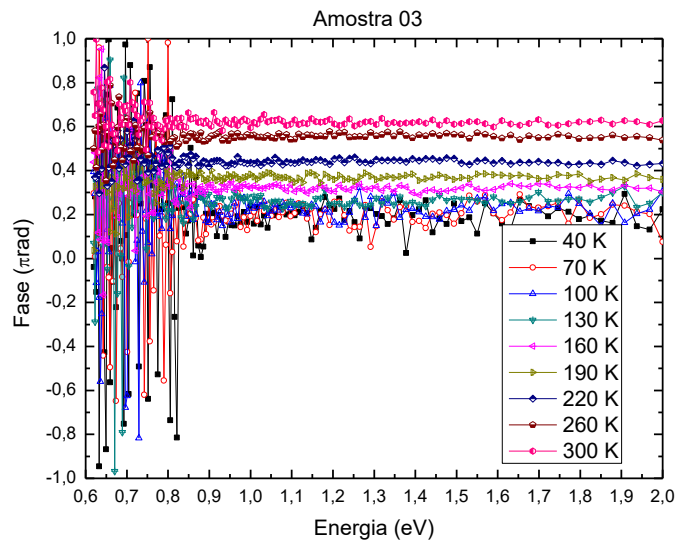


Figura 7.52: Variação da fase em função da energia do fóton incidente variando a temperatura para a amostra 03.

A Figura 7.53 mostra uma região ampliada da variação da fase com a temperatura. Aqui, observa-se claramente o aumento da fase com a temperatura e sua independência com a energia do fóton.

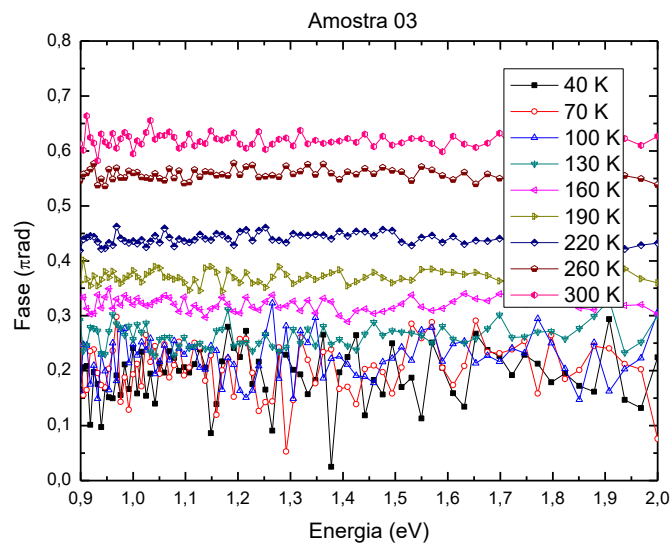


Figura 7.53: Região ampliada mostrando a variação da fase para a amostra 03.

Calculando a média dos valores podemos obter um gráfico do comportamento da fase em função da temperatura (Figura 7.54). Já a corrente no escuro variou de forma quase linear com a temperatura (Figura 7.55).

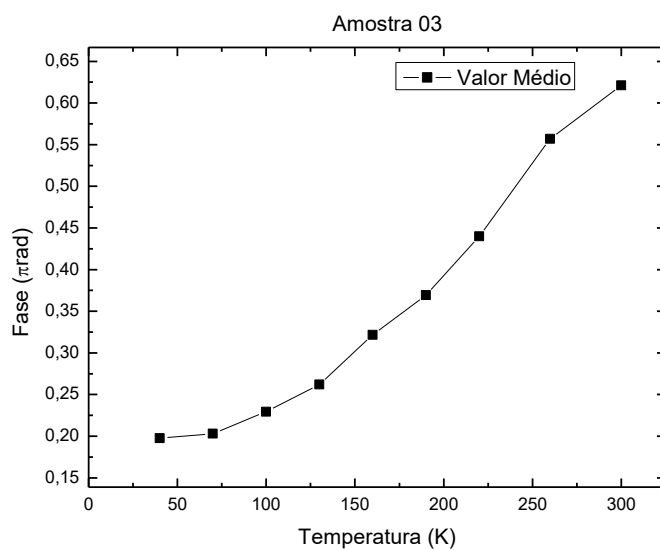


Figura 7.54: Variação da fase com a temperatura para a amostra 03.

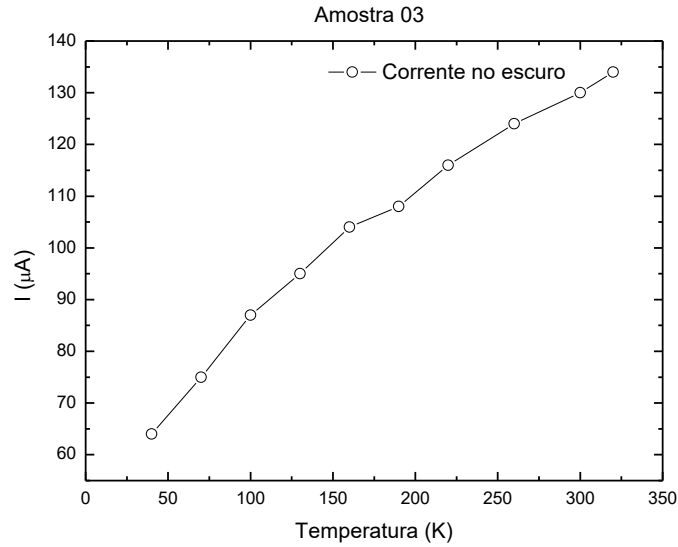


Figura 7.55: Variação da corrente no escuro com a temperatura para a amostra 03.

As Figuras 7.56 e 7.57 apresentam os resultados para a amostra 52. Aqui vemos que com o aumento da concentração de impurezas surge um pico de absorção em $0,65 \text{ eV}$ que cresce entre 190 e 260 K . Temos também regiões de descontinuidade do sinal em $0,7$ e $0,8 \text{ eV}$ e perdas de sinal a 320 K .

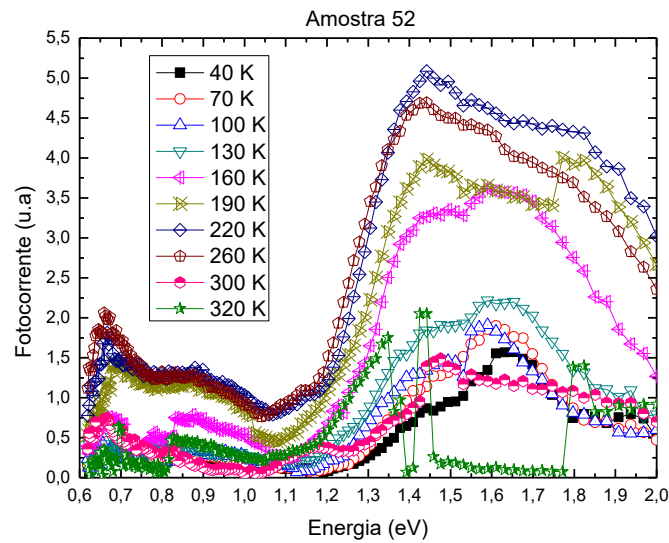


Figura 7.56: Amplitude da fotocorrente em função da energia do fóton incidente variando a temperatura para a amostra 52.

A fase perde o seu caráter independente da energia do fóton e apresenta um comportamento oscilante tendo picos de descontinuidade bastante visíveis a uma temperatura de 190 K , mas se mantêm praticamente constante em 260 K . Observe que a escala de variação continuou entre 20 e 120° .

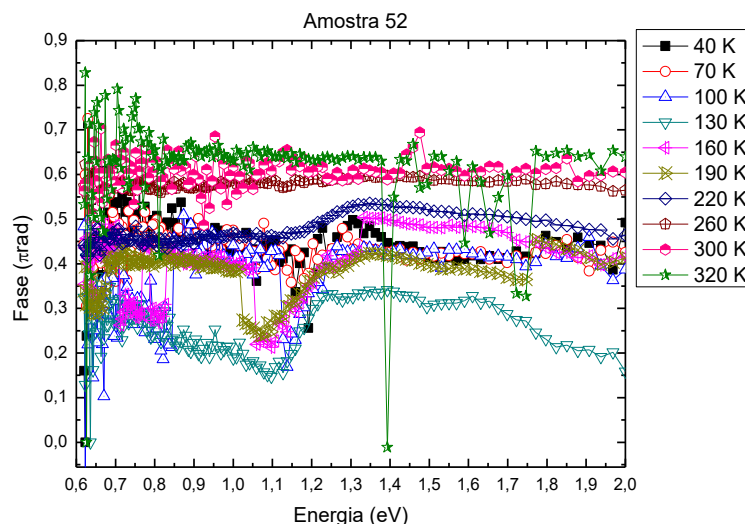


Figura 7.57: Variação da fase em função da energia do fóton incidente variando a temperatura para a amostra 52.

Com este resultado torna-se claro a dependência da fase com a concentração de impurezas no material e com o comprimento de onda da radiação incidente. A corrente no escuro manteve seu comportamento linear com a temperatura.

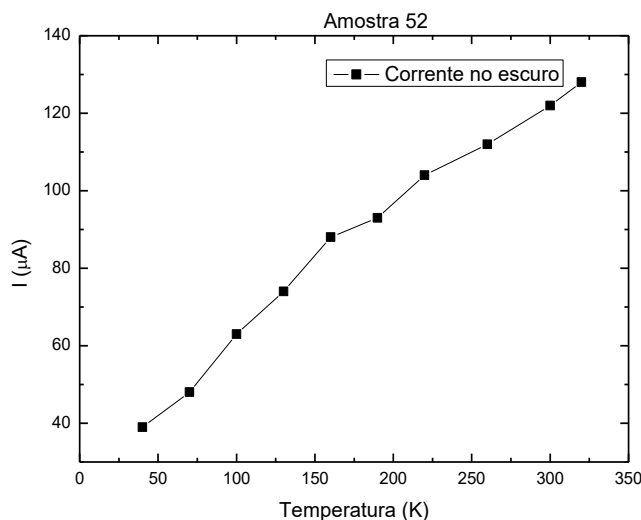


Figura 7.58: Variação da corrente no escuro com a temperatura para a amostra 52.

Estes resultados mostram que a absorção abaixo do gap do silício é devido a presença de níveis de energia das impurezas com consequente perda do sinal da fotocorrente em temperaturas elevadas. Isto pode ser explicado se considerarmos a existência de uma banda de absorção próximo a banda de condução de tal forma que quando excitados termicamente os elétrons desta banda passem para a banda de condução deixando níveis vazios que servem como armadilha para os elétrons que são fotoexcitados da banda de valência, fazendo com que o lock-in não detecte esta corrente. Se isto for levado em conta devo considerar também que o nível de Fermi deslocou-se para uma região nesta banda de impureza de tal forma que produza resultados pouco significativos

para a fotocorrente em temperaturas baixas, pois todos os estados estariam ocupados por elétrons.

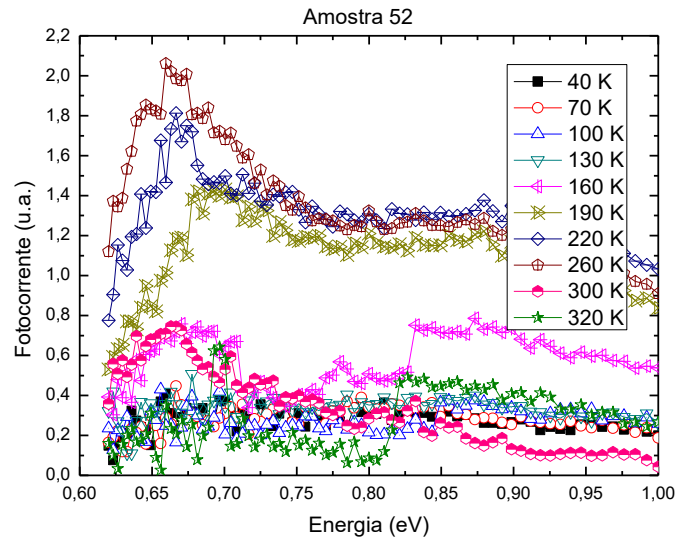


Figura 7.59: Variação da fotocorrente com a temperatura e energia para a amostra 52.

7.4.3.2 Resultados para Si:P,Bi

Os resultados a seguir são para a amostra com mais baixa concentração onde mantivemos a tensão aplicada em $0,1 V$ com o picoamperímetro na escala de $200 \mu A$ o que introduz um ganho no sinal de 10.000 . O comportamento da fotocorrente apresentou semelhanças com a amostra dopada apenas por bismuto com exceção de uma região entre $1,1$ e $1,3 eV$ com picos de descontinuidade nas temperaturas de 100 e $130 K$.

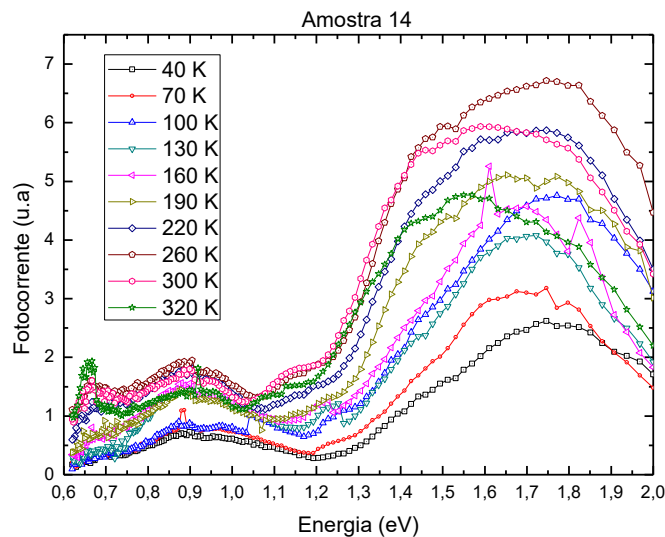


Figura 7.60: Variação da fotocorrente com a temperatura e energia do fóton para a amostra 14.

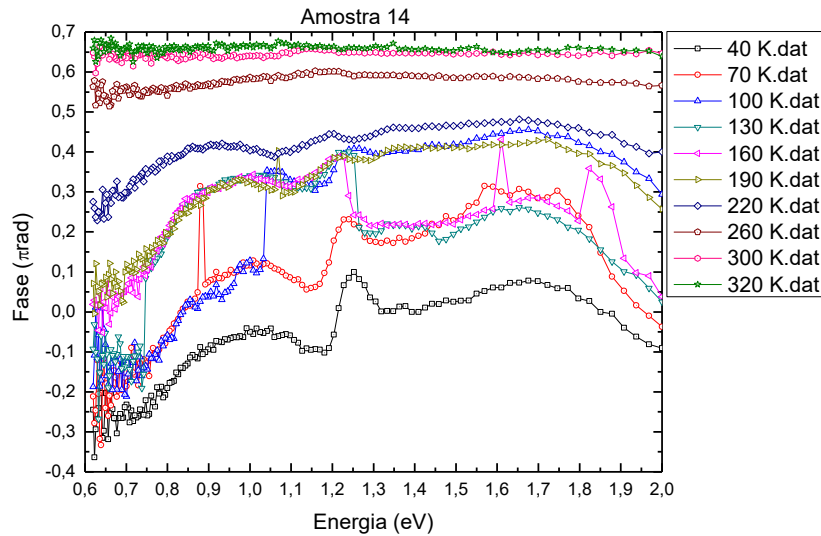


Figura 7.61: Variação da fase com a temperatura e energia do fóton para a amostra 14.

A amplitude máxima do sinal aparentemente aumentou com o aumento da temperatura até 260 K, onde a partir deste valor houve uma diminuição. O comportamento da fase desta vez apresentou um comportamento bastante distinto, onde vemos que se mantém independente da energia do fóton incidente em temperaturas elevadas, mas com a redução da temperatura começou a variar atingindo valores negativos nas temperaturas mais baixas, onde apresentando um termo oscilatório entre 1,0 e 1,3 eV, com pontos de descontinuidade em determinadas energias além de um espaçamento entre as curvas bem definido.

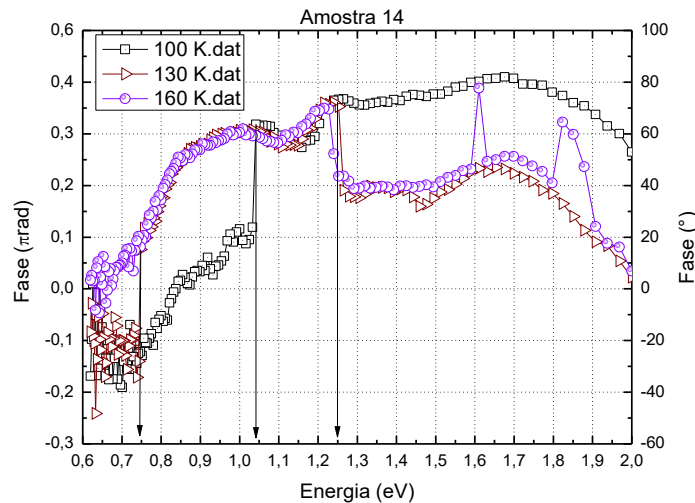


Figura 7.62: Variação da fase com a temperatura e energia do fóton para a amostra 14 nas temperaturas entre 100 e 160 K.

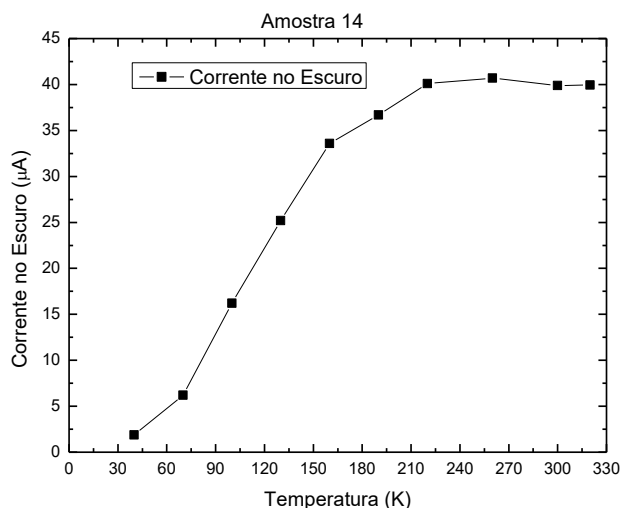


Figura 7.63: Variação da corrente no escuro com a temperatura para a amostra 14.

As Figuras 7.61 e 7.62 trazem uma evidência clara de que a fase detectada pelo Lock-in contém informações referente às características elétricas do material estudado, que não seria percebido nos resultados em temperatura ambiente. A corrente no escuro (Figura 7.63) por sua vez perde a linearidade, adquirindo um comportamento aproximadamente exponencial chegando próximo de zero na temperatura mais baixa.

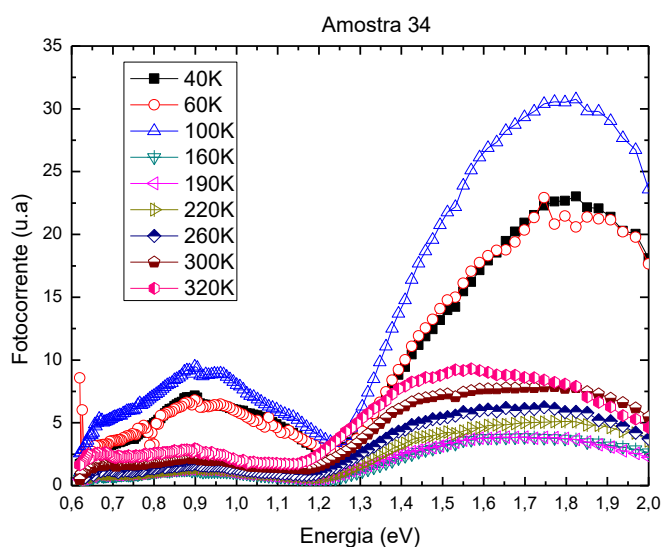


Figura 7.64: Comportamento da fotocorrente com a temperatura e energia do fóton para a amostra 34.

A seguir apresentamos o resultado para a amostra 34 com concentração próxima a concentração crítica, onde mantivemos os valores de tensão e escala do picoamperímetro, com exceção da medida da fotocorrente em 100 K que alteramos a tensão para 1,0 mV e a escala para 2,0 µA que fornece um ganho de 10 M devido ao sinal da fotocorrente extremamente baixo e uma redução significativa na corrente no escuro. Além disso, a medida a 70 K foi realizada a 60 K devido ao surgimento de um ruído elevado na fotocorrente nesta temperatura.

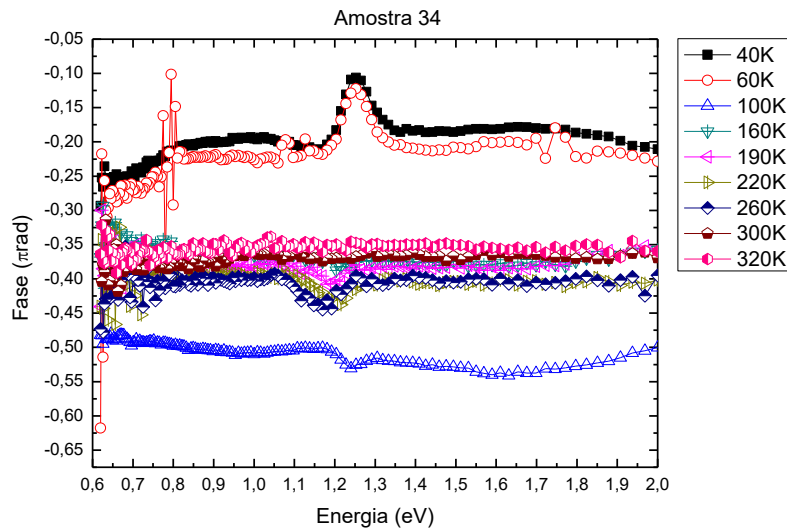


Figura 7.65: Comportamento da fase com a temperatura e energia do fóton para a amostra 34.

As duas últimas figuras evidenciam três regiões distintas de temperaturas: uma até 60 K, outra entre 70 e 130 K, e acima de 160 K onde os valores máximos da fotocorrente e de fase mudam drasticamente.

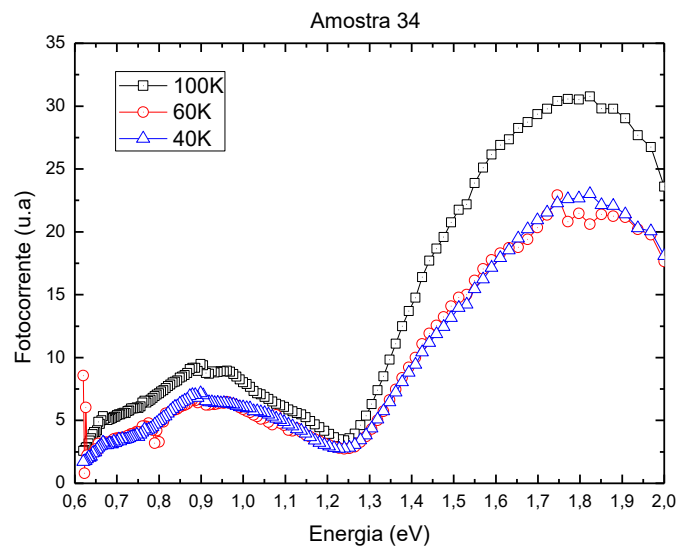


Figura 7.66: Comportamento da fotocorrente com a temperatura (entre 40 e 100 K) e energia do fóton para a amostra 34.

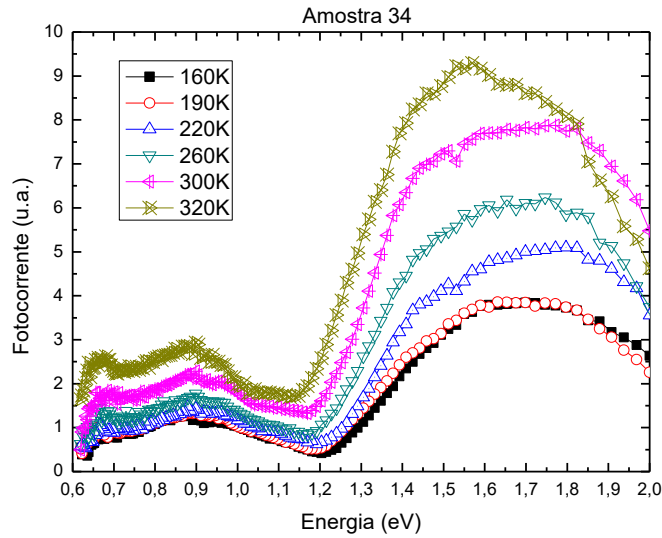


Figura 7.67: Comportamento da fotocorrente com a temperatura (entre 160 e 320 K) e energia do fóton para a amostra 34.

Além disso, o aumento da concentração provocou um comportamento mais suave nos sinais medidos e uma inversão completa na fase. Vale ressaltar que o pico apresentado em torno de $0,6\text{ eV}$ manteve-se a temperatura de 320 K como foi encontrado para as amostras dopadas apenas com bismuto.

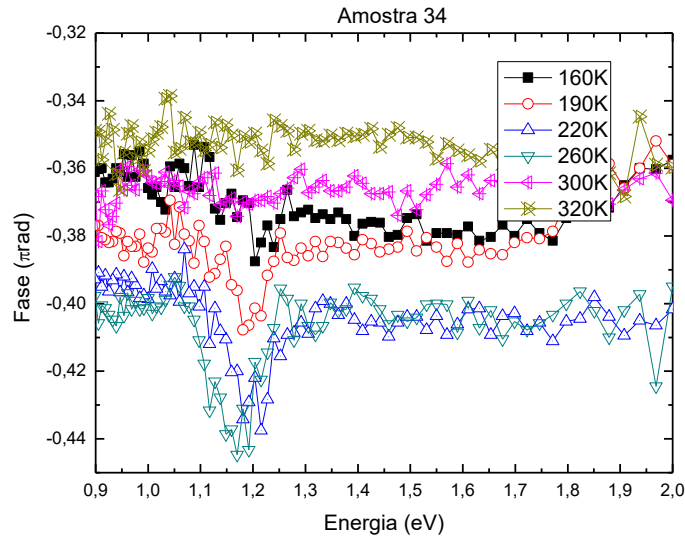


Figura 7.68: Comportamento da fase com a temperatura (entre 160 e 320 K) e energia do fóton para a amostra 34.

Outro aspecto é o surgimento de um valor mínimo de fotocorrente em torno de $1,1$ e $1,3\text{ eV}$ que se refletiu no comportamento da fase como na amostra 14, com a diferença que não apresenta mais uma oscilação e sim uma transição de um valor menor para o maior. A corrente no escuro por sua vez também refletiu um comportamento nesta três regiões de temperatura onde apresenta um comportamento linear acima de 160 K chegando próximo de zero na região entre 70 e 130 K . Isto possivelmente foi causa do

ruído excessivo das medidas explicado anteriormente. Foi observado também que se aumentarmos a tensão aplicada, o sinal da fotocorrente desaparecia, o que limitava os níveis de tensão em determinada região.

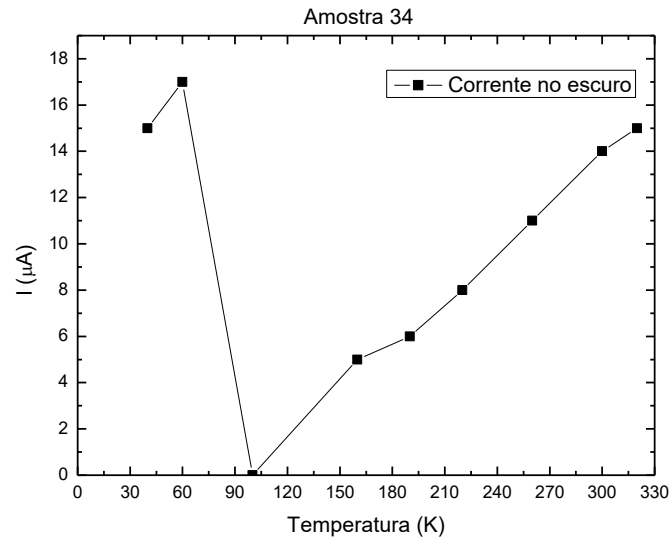


Figura 7.69: Variação da corrente no escuro com a temperatura para a amostra 14.

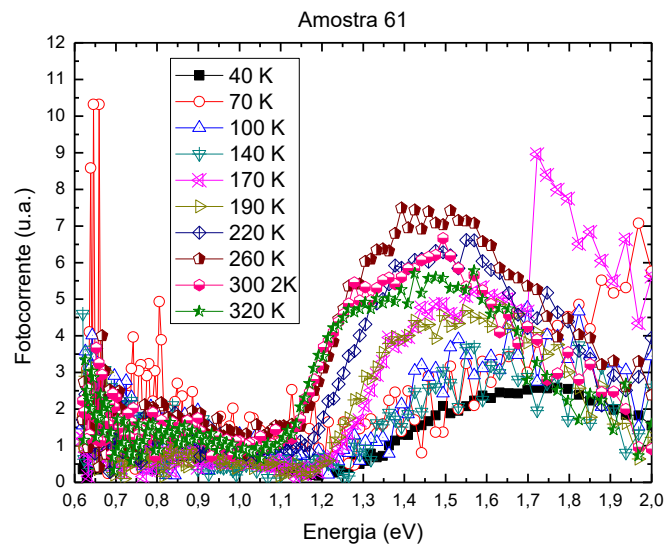


Figura 7.70: Comportamento da fotocorrente com a temperatura e energia do fóton para a amostra 61.

Os próximos resultados são para a amostra 61 com concentração de impurezas acima do valor crítico de transição MNM. Novamente o sinal entre 70 e 130 K também apresentou bastante ruído. A principal diferença encontrada é que a amplitude máxima da fotocorrente atingiu valores próximos aos dos resultados da amostra 14, com a menor concentração, e a fase apesar do ruído inerente praticamente oscilou em torno de 120° independente da temperatura e da energia do fóton incidente.

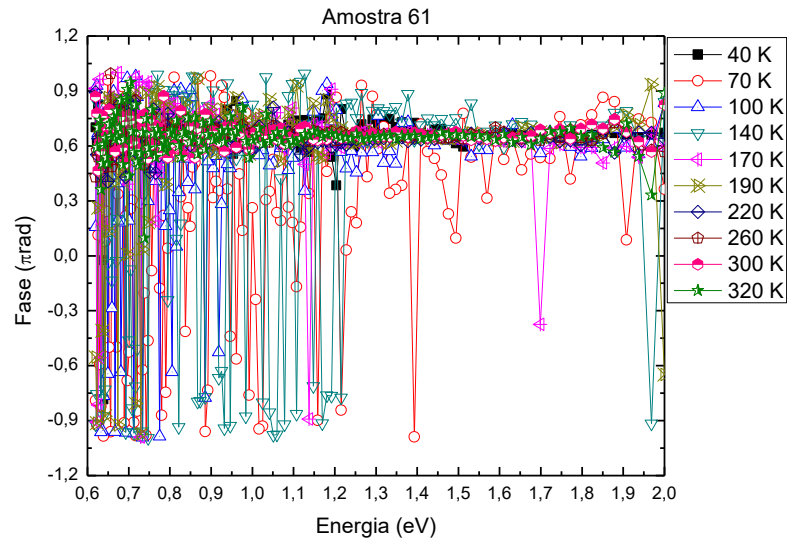


Figura 7.71: Comportamento da fase com a temperatura e energia do fóton para a amostra 34.

A corrente no escuro por sua vez apresentou um comportamento linear acima de 160 K, mas chegou próximo de zero abaixo desta faixa de temperatura (Figura 7.72 abaixo).

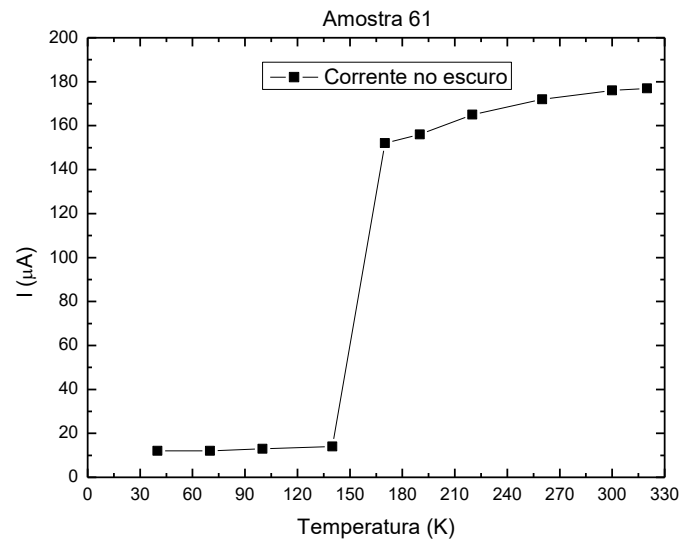


Figura 7.72: Variação da corrente no escuro com a temperatura para a amostra 14.

Os resultados para a amostra de maior concentração, A2D, só foram obtidos com uma tensão aplicada de 0,6 mV, pois o Lock-in só conseguiu detectar a fotocorrente neste valor. Como consequência, não foi possível verificar o comportamento da corrente no escuro com a temperatura, pois estava oscilando dentro da margem de erro estimado para a leitura da corrente (entre 1,0 e 3,0 μA). Novamente, a escala do picoamperímetro teve que ser ajustada para 2,0 μA dando um ganho na fotocorrente medida de 10 M.

Em compensação, observamos que a fotocorrente gerada atinge o máximo em temperatura ambiente voltando a cair acima deste valor, seguido de um valor mínimo em 260 K.

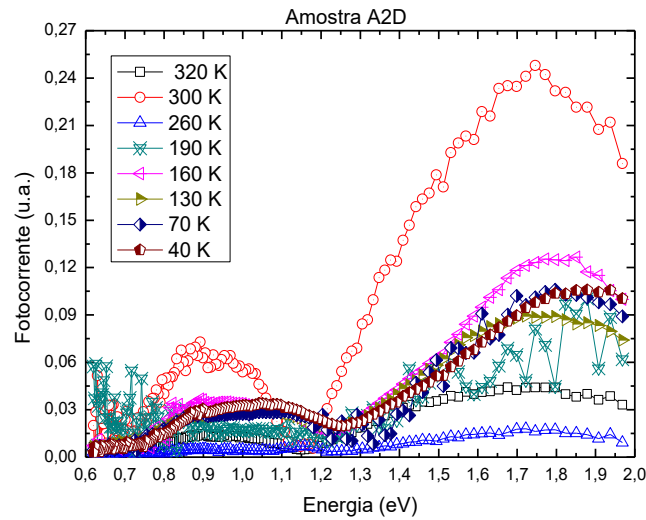


Figura 7.73: Comportamento da fotocorrente com a temperatura e energia do fóton para a amostra A2D.

Além disso, existe um pico bastante pronunciado em torno de 1,15 eV fazendo com que a fotocorrente chegue bastante próximo de zero e um comportamento suave.

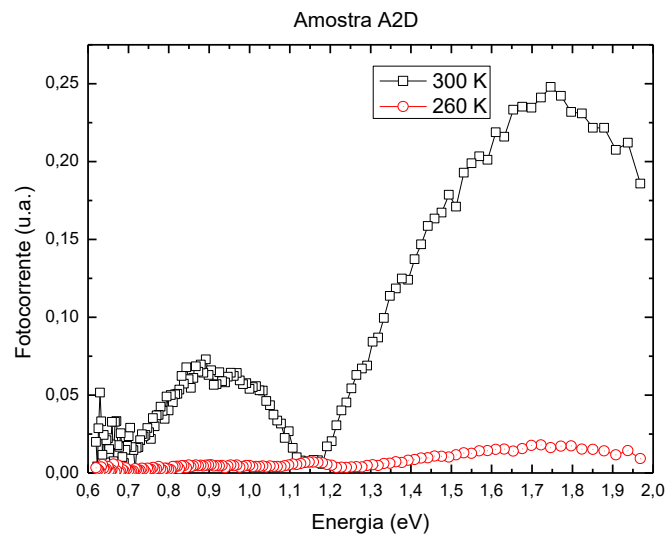


Figura 7.74: Comportamento da fotocorrente nas temperaturas de 300 e 260 K em função da energia do fóton para a amostra A2D.

A fase por sua vez parece apresentar duas regiões de temperaturas distintas, uma entre 40 e 70 K onde apresentação valores negativos e regiões independente da energia do fóton além de picos pronunciados em torno entre 1,15 e 1,35 eV (Figura 7.75).

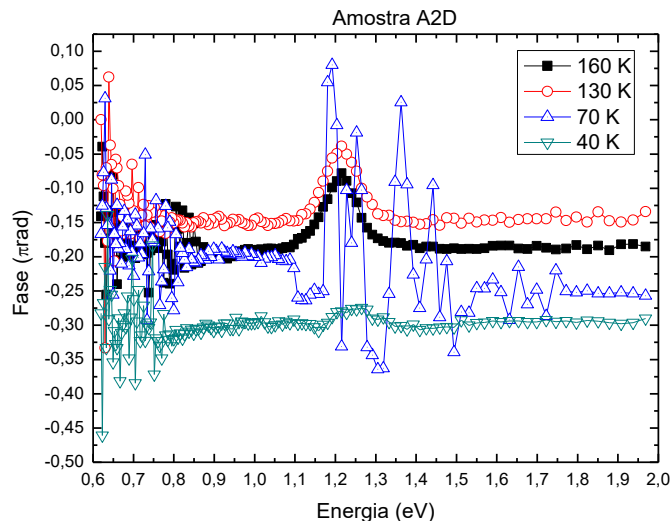


Figura 7.75: Comportamento da fase com a temperatura (entre 40 e 160 K) e energia do fóton para a amostra A2D.

A outra região entre 190 e 320 K onde ocorre uma inversão de negativo para positivo a 260 K tornando-se independente da energia do fóton fora da região entre 1,15 e 1,35 eV e a 320 K.

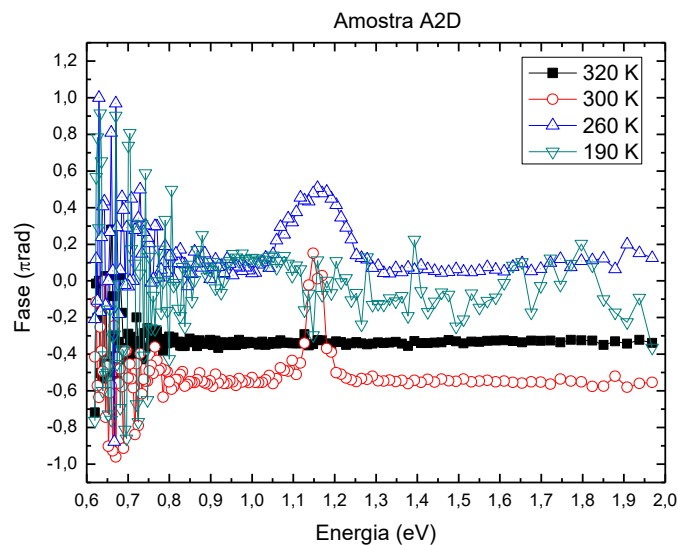


Figura 7.76: Comportamento da fase com a temperatura (entre 190 e 320 K) e energia do fóton para a amostra A2D.

Observe que esta inversão de fase ocorreu apenas na amostra com maior concentração, o que significa que o Lock-in detectou um sinal atrasado em relação ao sinal de referência e depois adiantado a uma temperatura de 260 K, quando o valor da fotocorrente atinge o mínimo, voltando a atrasar novamente acima deste valor de temperatura. A figura a seguir mostra a dependência da fotocorrente e da fase em função da concentração de impurezas em temperatura ambiente para energias do fóton incidente de 1,75, 1,0 e 0,7 eV.

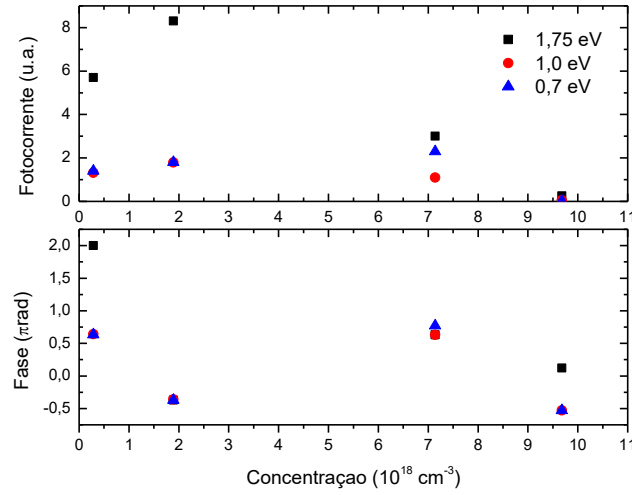


Figura 7.77: Comportamento da fotocorrente e da fase em temperatura ambiente para diferentes energias em função da concentração de impurezas.

7.4.4 Discussão dos Resultados da Medida de Fotocondução

Se a energia dos fótons forem maiores que a energia do gap de forma que podemos aproximar $G_n = G_p = G$, $R_n = R_p = R$ e $n_{hv} = p_{hv}$ com uma homogeneidade temporal e espacial nas concentrações em equilíbrio, obtemos a equação de transporte ambipolar [93]

$$\frac{\partial n_{hv}}{\partial t} = G - R + \mu' |\vec{E}| \nabla \cdot n_{hv} + D' \nabla^2 n_{hv} \quad (7.4)$$

com D' o coeficiente de difusão ambipolar e μ' a mobilidade ambipolar dados por:

$$D' = \frac{D_n D_p (n + p)}{D_n n + D_p p} \quad (7.5)$$

$$\mu' = \frac{\mu_n \mu_p (p - n)}{\mu_n n + \mu_p p} \quad (7.6)$$

Considerando o material tipo p e usando os mesmos argumentos anteriores podemos mostrar que $D' = D_n$ e $\mu' = \mu_n$. Se o material for tipo n teremos $D' = D_p$ e $\mu' = -\mu_p$. Observe que a mobilidade ambipolar é associada com o movimento de deriva dos portadores e sempre se reduz aos valores de mobilidade dos portadores minoritários, se estes forem os buracos um sinal negativo aparece.

7.4.4.1 Descrição Experimental

Para o equipamento montado, a luz na saída do monocromador que incidente na amostra é modulada pela frequência do chopper, assim posso escrever que a taxa de geração G seja dada por:

$$G \equiv G(\lambda, y, t) = \alpha(\lambda, y) \Phi_0(\lambda) e^{i\omega t} \quad (7.7)$$

com λ , o comprimento de onda da luz incidente, y a espessura da amostra, ω a frequência do chopper, $\phi_0(\lambda)$ o fluxo luminoso incidente sobre a amostra, $\alpha(\lambda, y)$ o coeficiente de absorção cuja dependência com a espessura da amostra é evidente em casos de filmes depositados sobre substratos semicondutores ou se existe uma profundidade de dopagem (como no nosso caso) e a dependência com o comprimento de onda do fluxo luminoso incidente é devido ao curva espectral da lâmpada utilizada.

Com o objetivo em determinar a corrente lida pelo lock-in, vamos utilizar os mesmos argumentos que levaram na determinação das equações 2.36 e 2.37 e escrever a densidade de corrente lida como sendo

$$\frac{\partial n_{hv}}{\partial t} = \alpha(\lambda, y)\Phi_0(\lambda)e^{i\omega t} - \frac{n_{hv}}{\tau_n} + \mu_n E \nabla \cdot n_{hv} + D_n \nabla^2 n_{hv} \quad (7.8)$$

Considerando que a luz incide uniformemente sobre a superfície do semiconductor teremos uma geração uniforme e as derivadas espaciais serão nulas levando a

$$\frac{\partial n_{hv}}{\partial t} = \alpha(\lambda, 0)\Phi_0(\lambda)e^{i\omega t} - \frac{n_{hv}}{\tau_n} \quad (7.9)$$

e impondo que $n_{hv} = n_{hv}(0)e^{i\omega t}$, ou seja, que oscile a mesma frequência do chopper, encontramos a solução

$$n_{hv} = \frac{\alpha(\lambda, 0)\tau_n\Phi_0(\lambda)}{1 + i\omega\tau_n} e^{i\omega t} \quad (7.10)$$

Logo, podemos escrever a concentração de portadores em excesso contendo uma parte real, n_{hv}^r e outra imaginária, n_{hv}^i , dados por

$$n_{hv}^r = \frac{\alpha(\lambda, 0)\Phi_0(\lambda)}{\omega_0^2 + \omega^2} \omega_0 \quad (7.11)$$

$$n_{hv}^i = -\frac{\alpha(\lambda, 0)\Phi_0(\lambda)}{\omega_0^2 + \omega^2} \omega \quad (7.12)$$

onde definimos $\omega_0 = 1/\tau_n$. Assim, a componente oscilante da densidade de corrente lida pelo lock-in, eq. (2.31), pode ser escrita como $\vec{J}_{hv} = |\vec{J}_{hv}|e^{-i\phi}$ e deverá oscilar com a mesma frequência da luz incidente, onde

$$tg\phi = \frac{n_{hv}^i}{n_{hv}^r} = -\frac{\omega}{\omega_0} = -\tau_n\omega \quad (7.13)$$

e conseqüentemente:

$$|\vec{J}_{hv}| = e\mu_n \sqrt{(n_{hv}^r)^2 + (n_{hv}^i)^2} |\vec{E}| = e\mu_n \frac{\alpha(\lambda, 0)\Phi_0(\lambda)}{\omega_0^2 + \omega^2} \sqrt{(\omega_0)^2 + (\omega)^2} |\vec{E}| \quad (7.14)$$

Considerando que $\omega_0 \gg \omega$ podemos aproximar,

$$\vec{J}_{hv} \cong e\mu_n\tau_n\alpha(\lambda, 0)\Phi_0(\lambda)e^{i(\omega t - \phi)}\vec{E} \quad (7.15)$$

continuando válida a expressão 2.30. Observe que por demonstração a fase é independente do comprimento de onda da luz incidente e tem uma dependência com a temperatura, como o que foi observado na amostra 03 (Figuras 7.51 e 7.52), obtendo tempos de recombinação entre 0,5 e 1,5 ms na faixa de temperatura medida, o que para o silício [47], o tempo de recombinação com emissão de fótons (recombinação radiativa) é na faixa de 1ms a 1μs, o que não estaria de acordo com a teoria proposta. Além disto, para as outras amostras a dependência com λ começa a ser significativa em temperaturas menores que a temperatura ambiente. No experimento de fotocorrente modulada [94], a amostra é iluminada com luz de excitação que varia periodicamente com o tempo e existe uma diferença de fase entre a luz modulada e a fotocorrente. Com esta diferença de fase é possível obter informações sobre a densidade de estados ao longo da banda proibida

7.4.4.2 Geração não-uniforme dos portadores

Visto que a teoria descrita não está de acordo com o observado experimentalmente vamos propor uma nova descrição que leva em consideração uma iluminação não uniforme, com base na ideia de que uma fonte de luz ao passar por uma fenda, como na saída do monocromador, sofre difração de Fraunhofer [27] e que sua intensidade de saída obedeça a uma função do tipo $\frac{\sin^2 \theta}{\theta^2}$. No intuito de simplificar o problema, vamos considerar que a luz incidente sobre a amostra contenha apenas regiões próximas ao pico principal de tal forma que podemos aproximar sua intensidade como uma função gaussiana do tipo:

$$G \equiv G(\lambda, x, y, t) = \alpha(\lambda, y)\Phi_0(\lambda)e^{-x^2}e^{i\omega t} \quad (7.16)$$

com x variando no intervalo entre $-d \leq x \leq d$, com d a distância entre os contatos. Iremos adotar também, que neste intervalo, a variação da intensidade luminosa seja pequena e por isto podemos desprezar termos de difusão dos portadores, ou seja, vamos considerar que neste intervalo a concentração de portadores varie de forma linear. A Figura 7.78 a seguir esquematiza estas considerações.

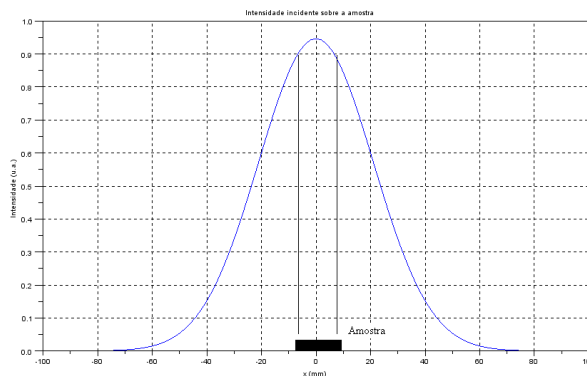


Figura 7.78: Fluxo luminoso incidente sobre a amostra expresso como uma função gaussiana.

Assim podemos escrever a equação 7.8, em uma dimensão, como sendo:

$$\frac{\partial n_{hv}}{\partial t} \equiv \frac{\partial n_{hv}(x, t)}{\partial t} = \alpha(\lambda, y)\Phi_0(\lambda)e^{-x^2}e^{i\omega t} - \frac{n_{hv}(x, t)}{\tau_n} + \mu_n E \frac{\partial n_{hv}(x, t)}{\partial x} \quad (7.17)$$

com o campo elétrico aplicado somente na direção x e desprezando o termo de difusão.

Adotando uma solução do tipo $n_{hv}(x, t) = n_{hv}(x)e^{i\omega t}$, encontramos uma equação diferencial linear de primeira ordem

$$\frac{\partial n_{hv}(x)}{\partial x} - \left[\frac{\omega_0 + i\omega}{\mu_n E} \right] n_{hv}(x) + \frac{\alpha(\lambda, y)\Phi_0(\lambda)}{\mu_n E} e^{-x^2} = 0 \quad (7.18)$$

cuja solução obtida por transformada de Laplace [95] será:

$$n_{hv}(x) = \left[n_{hv}(0) - \frac{\alpha(\lambda, y)\Phi_0(\lambda)}{\omega_0 + i\omega} e^{-x^2} \right] e^{\frac{\omega_0}{\mu_n E} x} \cdot e^{i\frac{\omega}{\mu_n E} x} + \frac{\alpha(\lambda, y)\Phi_0(\lambda)}{\omega_0 + i\omega} e^{-x^2} \quad (7.19)$$

logo,

$$n_{hv}(x, t) = \left[n_{hv}(0) - \frac{\alpha(\lambda, y)\Phi_0(\lambda)}{\omega_0 + i\omega} e^{-x^2} \right] e^{\frac{\omega_0}{\mu_n E} x} \cdot e^{i(\omega t + \phi)} + \frac{\alpha(\lambda, y)\Phi_0(\lambda)}{\omega_0 + i\omega} e^{-x^2} e^{i\omega t} \quad (7.20)$$

onde a fase, ϕ , será dada por:

$$\phi = \frac{\omega}{\mu_n E} x \quad (7.21)$$

e considerando que o termo entre colchetes é muito maior que o outro, e considerando também que $\omega_0 \gg \omega$, podemos aproximar a corrente lida pelo lock-in como sendo

$$J_{hv} \cong e\mu_n \tau_n \alpha(\lambda, y)\Phi_0(\lambda)e^{-x^2} e^{\frac{x}{\tau_n \mu_n E}} e^{i(\omega t + \phi)} E \quad (7.22)$$

onde obtemos $n_{hv}(0)$ pelo mesmo procedimento da equação 7.10. Aqui vemos também a dependência direta com a energia do fóton absorvido a partir do coeficiente de absorção, onde o gap óptico também pode ser obtido a partir da expressão 7.11, e a dependência com a temperatura a partir do tempo de recombinação.

A principal diferença na proposta é que a fase do sinal agora depende da mobilidade dos portadores minoritários que tem uma dependência com a temperatura e a variação com a energia do fóton incidente em baixa temperatura pode ser justificada considerando a seguinte situação:

- (i) A mobilidade predominante é do tipo impureza ionizada e em temperatura ambiente todas as impurezas estão ionizadas, fazendo com que ele seja independente da energia do fóton.
- (ii) A medida que se reduz a temperatura, a concentração de impurezas ionizadas reduz, alterando o valor da mobilidade. Quando um fóton com energia $h\nu$ incide sobre a amostra, ele provoca uma ionização dos átomos que estavam inicialmente neutros (o que explicaria a variação da fase na região onde surge a fotocorrente) alterando o valor da mobilidade.
- (iii) Acontecerá uma mudança no valor da fase se os fotoelétrons excitados forem capturados nos centros de recombinação, onde não irão participar da corrente elétrica, deixando buracos na banda de valência, fazendo com que a corrente de buracos passa a predominar, o que significa substituir μ_n por $-\mu_p$ nas equações 6.29 e 6.30 visto que uma expressão semelhante pode ser encontrada para os buracos.

Sendo assim podemos determinar a mobilidade e o tipo de portador reorganizando a expressão 7.21 para:

$$\mu_n = \frac{2\pi f x d}{\phi V} \quad (7.23)$$

onde consideramos $\omega = 2\pi f$ com f a frequência do chopper, $x = 1,5 \text{ mm}$ a distância entre o pico central da luz incidente e a borda da amostra e $E = V/d$, V a tensão aplicada e $d = 6,0 \text{ mm}$ a distância entre os contatos. Explorando a expressão 7.15, dividindo amplitude por $e\mu_n E$, determinamos a concentração dos elétrons fotoexcitados:

$$\frac{|J_{h\nu}|}{e\mu_n E} = n_{h\nu}(x) \cong \alpha(\lambda, y)\Phi_0(\lambda)\Gamma_n(T) \quad (7.24)$$

com

$$\Gamma_n(T) = \tau_n e^{\frac{x}{\tau_n \mu_n E}} \quad (7.25)$$

um tempo de recombinação efetivo que depende da temperatura. Como $\tau_n = \frac{1}{N_t v_{ter} \sigma_n}$ este tempo efetivo também depende da seção de choque eficaz, da velocidade térmica e da densidade de estado das armadilhas. Como $\Gamma_n(T)$ não depende da energia do fóton incidente, podemos dividir a expressão 7.24 pelo espectro da fonte, $\Phi_0(\lambda)$, e determinar o coeficiente de absorção das amostras e o valor de $\Gamma_n(T)$ pode ser estimado se considerarmos $N_t \equiv N_a \equiv p_0$ e $\sigma_n \cong \pi a_0^2$ com a_0 o raio de Bohr.

O fluxo incidente sobre a amostra pode ser determinado supondo que a rede seja inteiramente iluminada pela luz oriunda do filamento, assim o fluxo na saída do monocromador será:

$$\Phi_0(\lambda) = \Phi_0 \frac{a^2}{f_0^2} \eta_{rede} T_r^2 \frac{\delta\lambda}{\Delta\lambda} \quad (7.26)$$

onde Φ_0 é o fluxo luminoso da lâmpada de incandescência, a o lado da rede (quadrada), f_0 a focal dos espelhos, η_{rede} a eficiência da rede, T_r o coeficiente de reflexão de cada espelho, $\delta\lambda$ a resolução desejada, $\Delta\lambda$ a faixa espectral de emissão da lâmpada (suposta quadrada).

A largura do espectro da lâmpada (lâmpada H4), $\Delta\lambda$, é da ordem de $1 \mu m$. O coeficiente de reflexão T_r de cada espelho, quase na incidência normal, é da ordem de 0,85. A eficiência da rede η_{rede} é estimada a 0,2. O fluxo luminoso da lâmpada Φ_0 , supondo que toda a potência elétrica foi convertida em luz, é de $60/4\pi W/sr$. Enfim, o $\delta\lambda$ vale $10 nm$. Assim o fluxo de luz entre λ e $\lambda + \delta\lambda$ é então avaliada em $6,7mW/m^2$.

7.4.4.3 Aplicação do Modelo Teórico

Si:Bi

A primeira amostra onde o modelo teórico foi aplicado foi a amostra número 03, dopada com bismuto em menor concentração, pois a fase medida não apresentou uma dependência direta com a energia do fóton. Sendo assim, aplicando a expressão 7.23 e calculando o valor médio, obtemos uma variação da mobilidade em função da temperatura apresentada na figura a seguir,

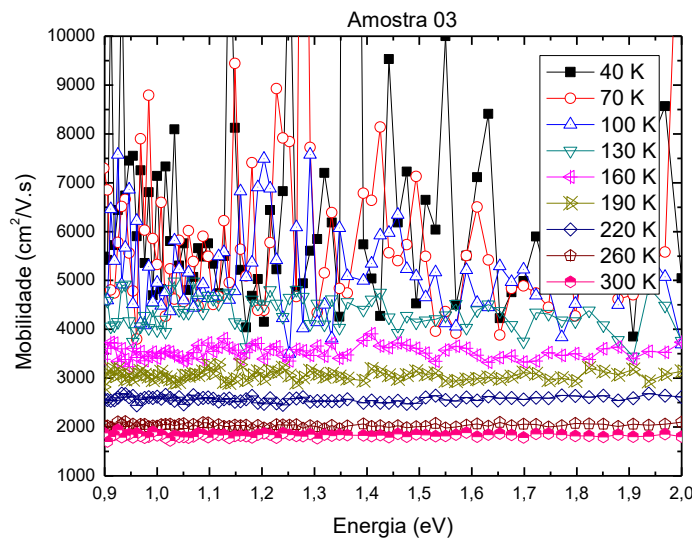


Figura 7.79: Variação da mobilidade obtida a partir da equação 7.23.

Realizando a conversão a partir da equação 7.23 vemos que a mobilidade em temperatura ambiente está em torno de $1800 cm^2/Vs$. Pela teoria proposta, esta seria a mobilidade de deriva dos portadores, diferente das mobilidades Hall e a mobilidade devido às impurezas presentes na amostra. A partir do valor médio em cada temperatura, encontramos um comportamento anômalo (Figura 7.80), pois a mobilidade apresentou uma queda com o aumento da temperatura, o que não estaria de acordo com o comportamento da mobilidade devido a impurezas ionizadas que deveria crescer com $T^{3/2}$. O que indica que o efeito das impurezas ionizadas foi contrabalanceado pelo espalhamento pela rede, que por sua vez decai a mobilidade por um fator $T^{-3/2}$. O espalhamento pela rede inclui absorção ou emissão de fônons, desde que a densidade de

fônons aumenta com a temperatura o tempo de espalhamento devido a este mecanismo irá cair e consequentemente a mobilidade. Então a mobilidade apresentada é devido à contribuição por fônons e impurezas ionizadas (Figura 7.81).

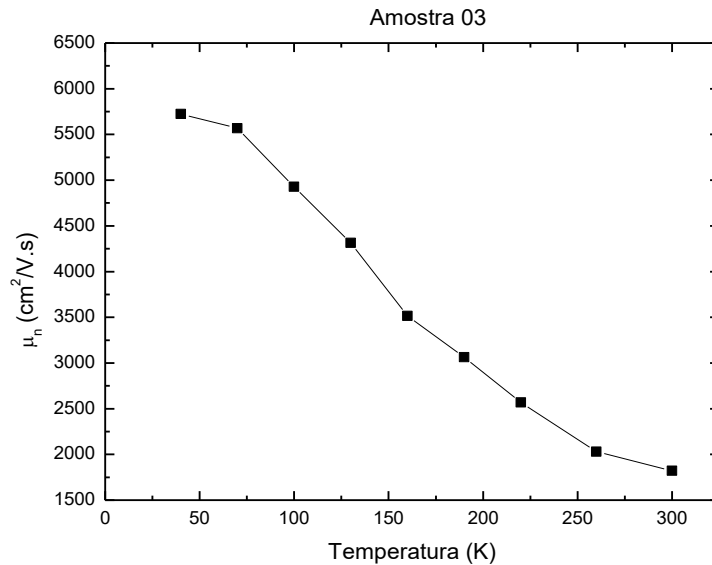


Figura 7.80: Cálculo da mobilidade média dos elétrons em função da temperatura obtida a partir da Equação 7.23.

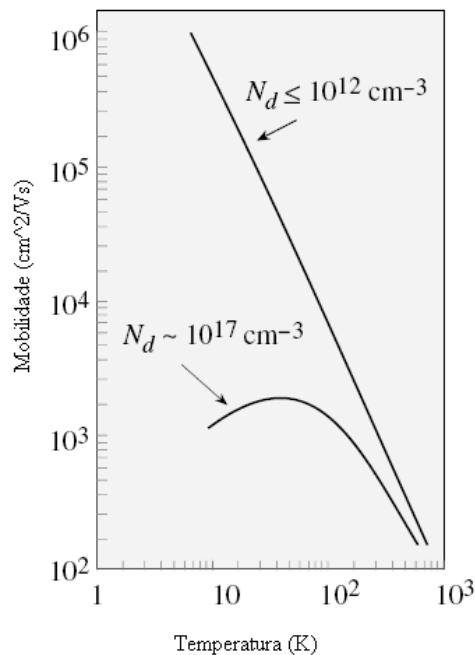


Figura 7.81: Mobilidade em baixo campo dos elétrons no silício em função da temperatura (Extraído da Referência [47]).

A figura a seguir mostra a variação da concentração de elétrons em função da energia do fóton incidente em temperatura ambiente obtida a partir da equação 7.24 (sem normalizar pelo espectro da fonte). Nesta figura vemos uma diminuição da concentração de elétrons com a diminuição da temperatura, isto é devido ao aumento da mobilidade dos portadores por intermédio do tempo efetivo, $\Gamma_n(T)$, visto que ele depende desta.

Podemos entender por dois motivos, a diminuição da temperatura, como vimos na Figura 7.80, provoca um aumento na mobilidade e com conseqüente diminuição do tempo efetivo, visto que o termo exponencial deste decresce mais rapidamente que o tempo de recombinação.

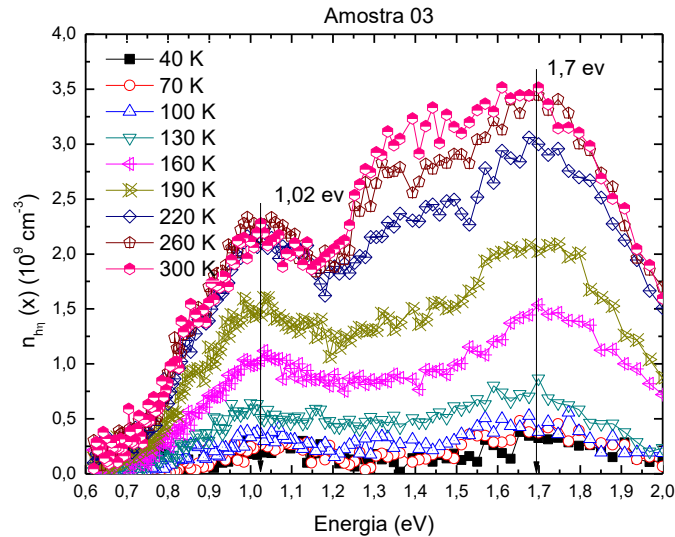


Figura 7.82: Variação dos portadores fotoexcitados obtidos a partir da equação 7.24.

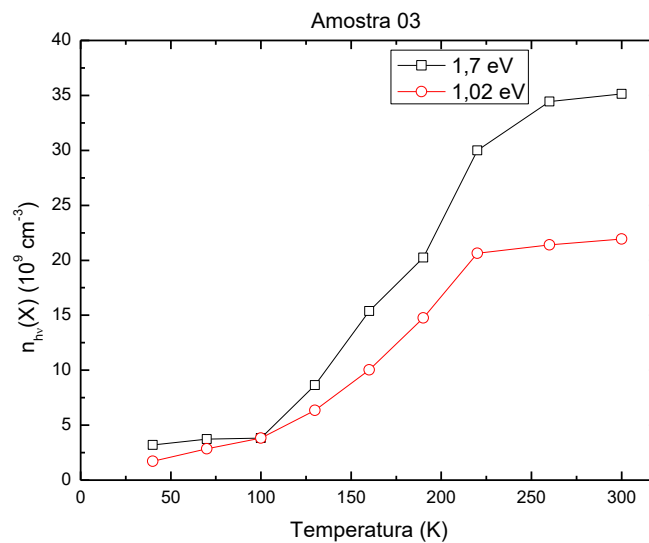


Figura 7.83: Variação da oncentração dos portadores fotoexcitados em função da temperatura nos picos de 1,7 eV e 1,02 eV.

Por outro lado, sabemos que a concentração efetiva na banda de condução, N_c , tem uma dependência em $T^{3/2}$ com a temperatura, sendo assim, a diminuição da temperatura provoca a redução do número de elétrons que podem ser fotoexcitados, logo este teria uma dependência proporcional a esta concentração e poderíamos escrever então como $n_{hv}(x) = N_v \sigma_a \Phi_0(\lambda) \tau_n$, com σ_a a secção eficaz de absorção, se houvesse uma geração uniforme na fonte de luz. Vemos também dois picos de absorção, o primeiro em 1,02 eV e o segundo em 1,7 eV que atenua mais rapidamente com a diminuição da

temperatura. Isto pode ser explicado se consideramos dois valores de concentrações efetivas, uma para o bulk de silício e outro para a impureza, o que leva a tempos de recombinação diferentes para eles. Em função disto, a figura a seguir mostra o coeficiente de absorção normalizado pelo espectro da fonte derivado da equação 7.25 em temperatura ambiente.

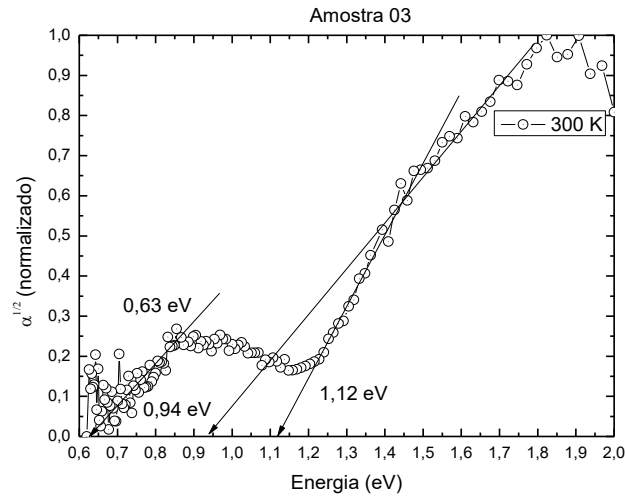


Figura 7.84: Coeficiente de absorção para a amostra 03, obtido a partir da equação 7.25.

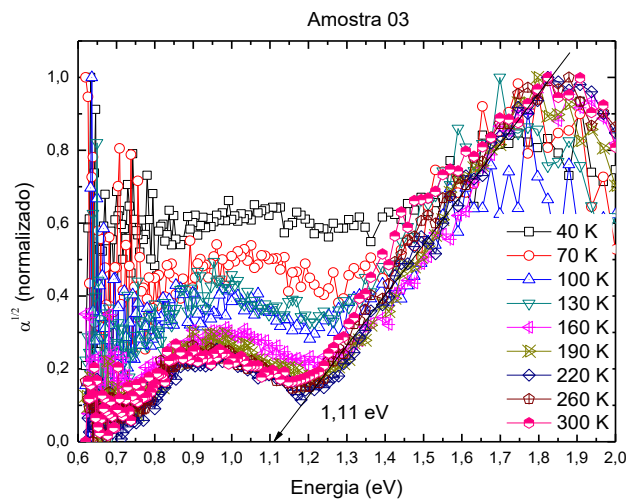


Figura 7.85: Variação do coeficiente de absorção com a temperatura para a amostra 03, obtido a partir da equação 7.25.

A Figura 7.84 identifica três inícios de absorção, uma devido ao silício em 1,12 eV e outras duas relacionadas a banda de impureza, o procedimento na determinação deste valores foi considerado a partir da equação 7.4. A variação do coeficiente de absorção com a temperatura mostra que ocorre uma redução principalmente na banda de impureza onde passa a predominar a absorção devido ao silício. Apresenta também um offset ocasionado pelo tempo efetivo $\Gamma_n(T)$ com a diminuição da temperatura. A margem de erro na medida é da ordem de 0,05 eV devido à resolução do monocromador.

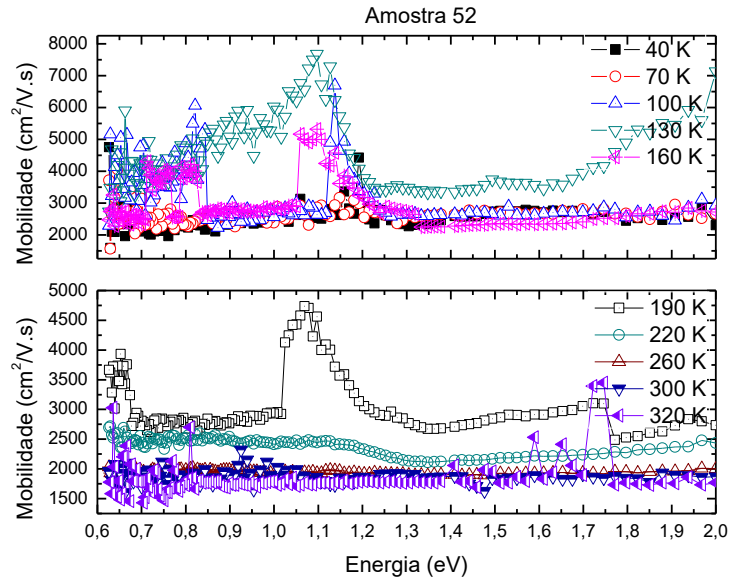


Figura 7.86: Variação da mobilidade obtida em função da energia do fóton incidente para a amostra 52.

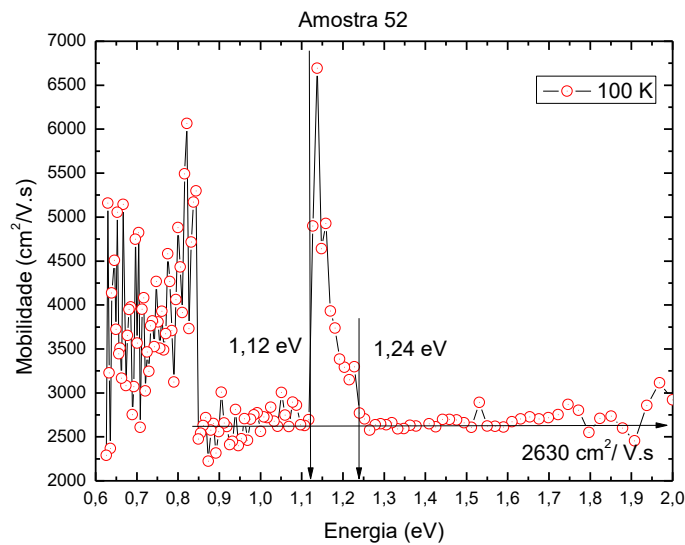


Figura 7.87: Variação da mobilidade a 100 K obtida em função da energia do fóton incidente para a amostra 52.

Realizando mesmo procedimento para a amostra 52, vimos que entre 260 K e 300 K a mobilidade é independente da energia do fóton incidente (Figura 7.86) e aumenta com a diminuição com a temperatura, mas fora deste intervalo surgem efeitos significativos em determinados comprimentos de onda, quando esta atinge o valor de 190 K e 100 K aparecendo um pico pronunciado fazendo com que ela reduza de valor à medida que a temperatura cai.

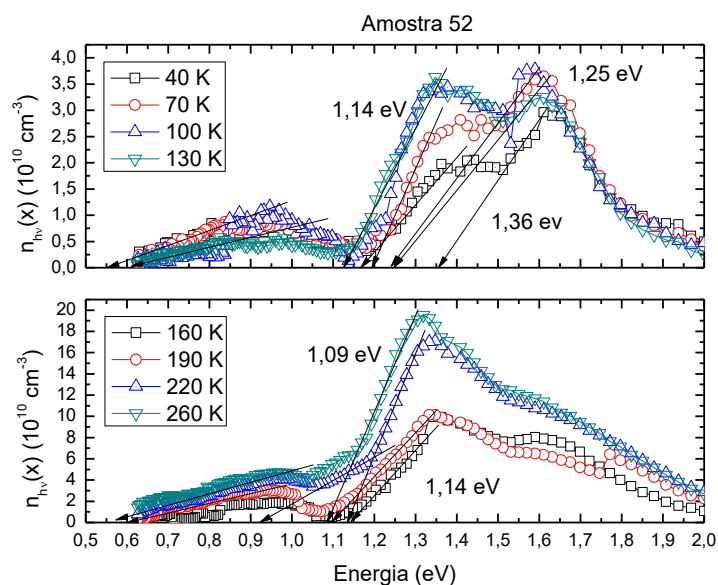


Figura 7.88: Variação de $n_{h\nu}$ em função da energia do fóton incidente para a amostra 52.

O interessante é que na temperatura de 100 K a mobilidade apresenta um valor constante e o pico apresenta-se num intervalo estreito entre $1,12\text{ eV}$ e $1,24\text{ eV}$ (uma largura em torno de $0,12\text{ eV}$) como pode ser visto na figura 7.87. Na temperatura de 320 K também aparece um pico estreito em $1,7\text{ eV}$, mas não foi considerado devido a margem de erro adotada.

Analisando a curva da concentração $n_{h\nu}(x)$ vemos que ela se comporta de maneira regular durante todo o espectro na faixa de temperatura entre 40 K e 260 K , aumentando com a temperatura. O interessante é que na até 130 K aparecem outros picos de absorção, além do pico inicial em $1,14\text{ eV}$, o que não foi percebido na amostra 03, em compensação o aumento da dopagem provocou um aumento na contração de elétrons fotoexcitados o que confirma a proporcionalidade com a densidade efetiva de estados. Assim, iremos procurar entender este comportamento analisando o comportamento da concentração e o coeficiente de absorção.

Para temperaturas maiores a concentração se comportou de maneira irregular, tendo valores constantes entre $0,6$ e $0,9\text{ eV}$, com picos de crescimento acima disto, três a 300 K e um forte a 320 K seguido de uma redução drástica a partir de $1,5\text{ eV}$ (Figura 7.88). O comportamento da concentração nesta temperatura foi refletido na fotocorrente, como mostrado na Figura 7.74. Como esta variação não foi apresentada na mobilidade a essa temperatura, acredita-se que o aumento da temperatura provocou uma diminuição considerável no tempo de recombinação, ou os elétrons com esta energia foram capturados por centros de recombinação impedindo-os de participar da corrente elétrica. De qualquer maneira nenhum destes comportamentos explica o surgimento do pico na mobilidade a 100 k .

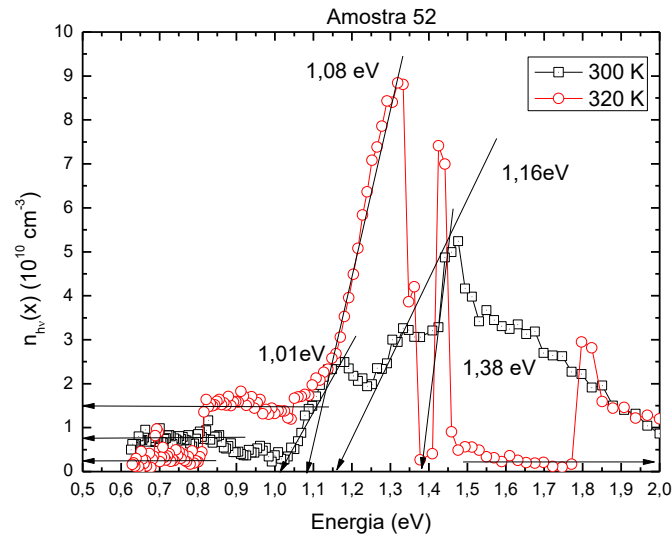


Figura 7.89: Variação de n_{hv} em função da energia do fóton incidente para a amostra 52 nas temperaturas de 300 e 320 K.

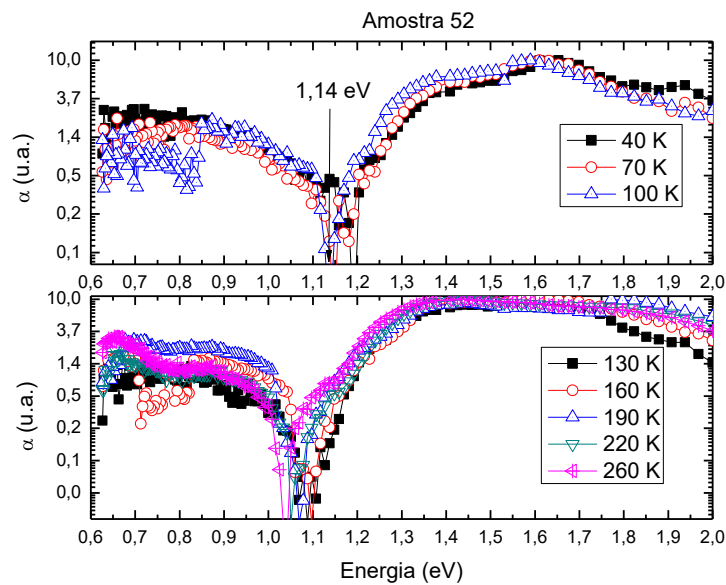


Figura 7.90: Variação do coeficiente de absorção em função da energia do fóton incidente para a amostra 52 em diferentes temperaturas.

Para uma melhor visualização da absorção da amostra iremos plotar as figuras destes na escala *semi-log* a fim de eliminar a dependência exponencial do tempo efetivo $\Gamma_n(T)$. Os outros procedimentos efetuados na amostra 03 foram mantidos. Os resultados apresentados na figura 7.92 mostram que existem duas regiões de absorção, uma acima de 1,1 eV provavelmente referente ao silício e outra abaixo deste valor que pode estar relacionada com a absorção devido às impurezas. O interessante é que a 100 K o valor do coeficiente de absorção tende a um mínimo extremo, onde poderíamos separar as duas regiões, ou seja, um valor de temperatura onde existe um espaçamento na faixa de energia medida e não ocorre absorção pelo material.

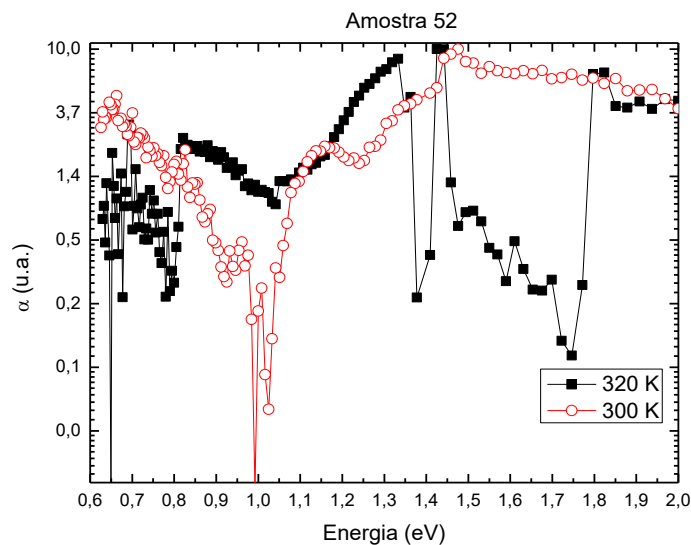


Figura 7.91: Variação do coeficiente de absorção em função da energia do fóton incidente para a amostra 52 para as temperaturas de 300 e 320 K.

Para outras temperaturas estes mínimos entre as duas faixas se cruzam mantendo a absorção do material. Este efeito explicaria os picos apresentados no valor da mobilidade, o que significa a existência entre uma relação entre estas duas propriedades, visto que as concentrações de elétrons fotoexcitados a 130 e 100 K permaneceram aproximadamente iguais.

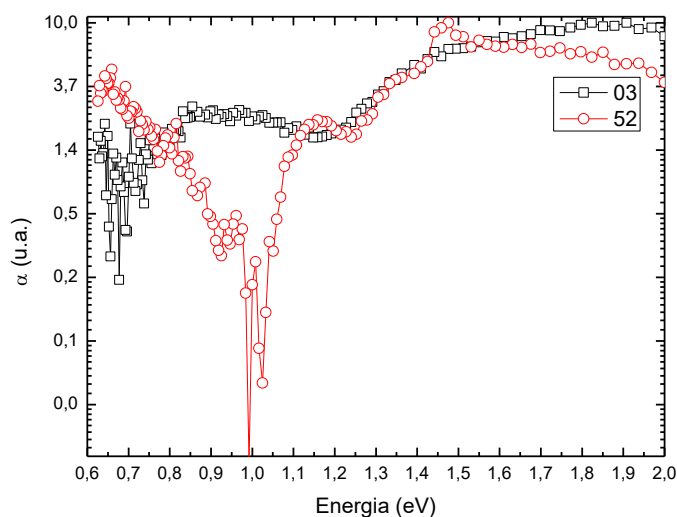


Figura 7.92: Comparação dos coeficientes de absorção para as amostra 03 e 52 a temperatura ambiente.

Observe também que a variação da temperatura provoca uma variação de aproximadamente 0,1 eV na posição da absorção. O coeficiente de absorção em temperatura ambiente ainda apresenta uma forte atenuação próximo a 1,0 eV, mas não acompanha a curva de absorção para o silício. Comparando com a amostra 03 percebemos que esta alteração é devido ao aumento na concentração de dopantes. A 320 K

praticamente não apresenta a atenuação, mas mostra os efeitos vistos na fotocorrente medida e na concentração calculada. A linha de offset apresentada nas figuras 7.87 e 7.88 são devido à linearização do tempo efetivo quando plotamos o gráfico em *semi-log*.

Si:P,Bi

A mobilidade encontrada a partir do sinal da fase medida para a amostra 14 dopada com bismuto e fósforo em menor concentração apresentou um aumento em torno de dez vezes maior do que as amostras dopadas apenas com bismuto e teve pouca variação com a energia do fóton incidente em boa parte do espectro medido, apresentando também uma dependência inversa com a temperatura, ou seja, a medida em que a temperatura aumenta, ocorre uma diminuição da mobilidade.

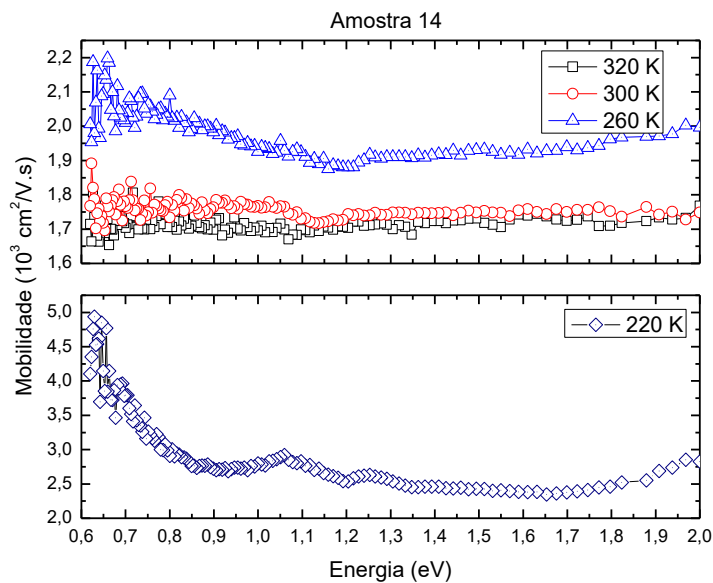


Figura 7.93: Variação da mobilidade com a energia do fóton incidente nas temperaturas de 220 a 320 K.

Na figura acima é possível observar duas pequenas oscilações entre 1,1 e 1,3 eV numa faixa de 2.500 a 3.000 cm^2/Vs na temperatura de 220 K, além de um aumento considerável na mobilidade a partir de 0,8 eV chegando a 5.000 cm^2/Vs em 0,65 eV. Com a diminuição da temperatura este valor tende a aumentar continuamente atingindo 30.000 cm^2/Vs em 190 K. O que ocorre a seguir é uma descontinuidade do valor da mobilidade a uma temperatura de 130 K, esta descontinuidade é apresentada como uma inversão do sinal da mobilidade, passando de +10.000 cm^2/Vs para -10.000 cm^2/Vs na energia de 0,7 eV (Figura 7.94).

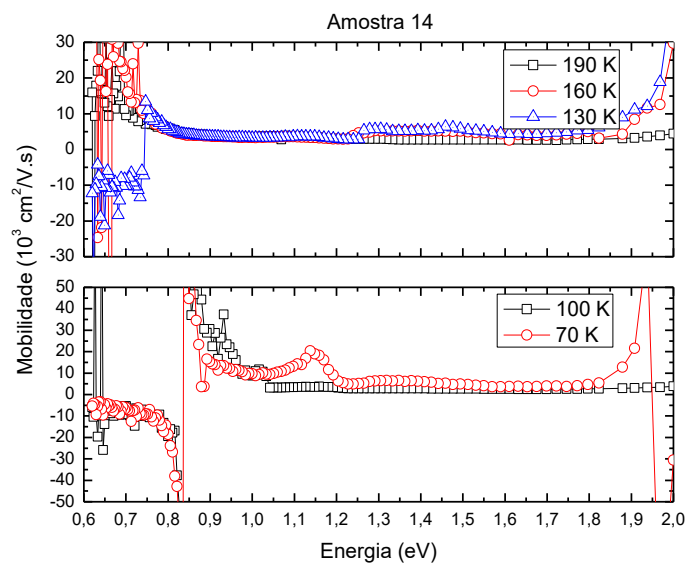


Figura 7.94: Variação da mobilidade com a energia do fóton incidente na temperatura entre 70 e 190 K.

Esta descontinuidade parece se deslocar à medida que se reduz a temperatura, aparecendo agora em $0,85 \text{ eV}$ e retornando ao valor de $-10.000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, independente da energia do fóton incidente. Esta descontinuidade também se apresentou na faixa entre $1,9$ e $2,0 \text{ eV}$. Vale ressaltar que na faixa de temperatura entre 70 e 190 K ela se apresentou em torno de $5.000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ e independente da energia do fóton incidente em boa parte do espectro (figura 7.94).

Pela teoria proposta, a inversão do sinal na mobilidade (Figura 7.94) seria decorrente do tipo de portador majoritário na equação da mobilidade ambipolar (equação 7.6), o que indica que boa parte dos elétrons foto-excitados estariam sendo excitados para os níveis de armadilha dentro do gap.

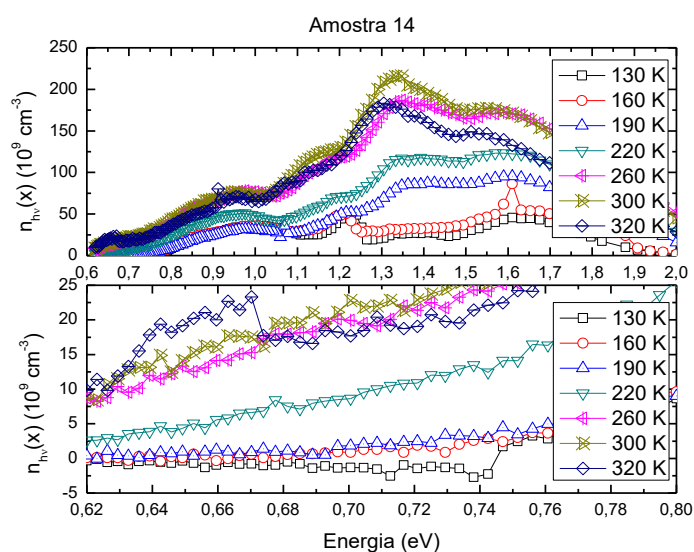


Figura 7.95: Variação da concentração com a energia do fóton incidente na temperatura entre 130 e 320 K.

Mas antes de tentarmos compreender o ocorrido iremos analisar o comportamento da concentração e do coeficiente de absorção.

Para a concentração variando entre 130 e 320 K, teve um comportamento suave aparecendo alguns picos em 160 e 190 K que devido à largura não levaremos em consideração devido ao nosso erro de medida (Figura 7.95 em cima). Quando ampliamos a região na faixa entre 0,6 e 0,8 eV (Figura 7.96 em baixo) vemos que ela tende a praticamente zero nas temperaturas de 160 e 190 K, mas que atinge valores negativos em 130 K acompanhando a variação negativa da mobilidade, que é razoável, pois seus valores foram derivados da mobilidade.

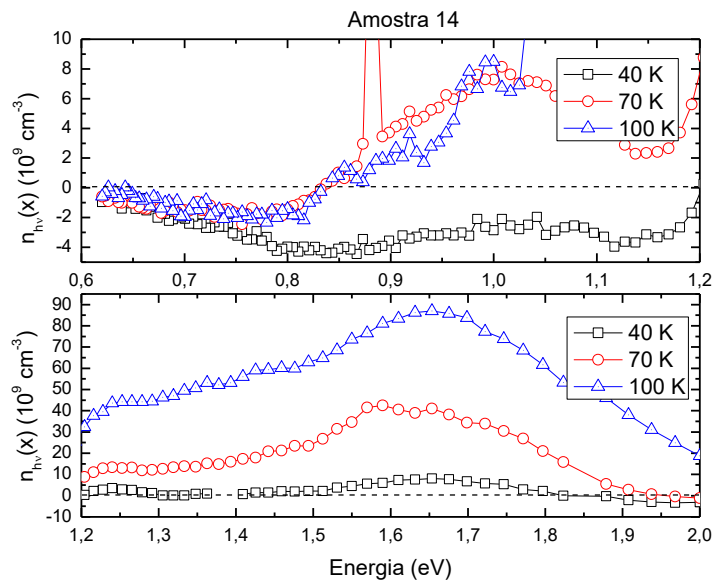


Figura 7.96: Variação da concentração com a energia do fóton incidente na temperatura entre 40 e 100 K.

Nas temperaturas entre 70 e 100 K a concentração torna-se negativa em torno de 0,85 eV, já a 40 K, ela torna-se positiva a partir de 1,2 eV e oscila entre positivo e negativo nas outras faixas de energia do fóton o que não pode ser visto na Figura 7.94, onde a mobilidade oscila entre valores próximos ao encontrados a temperatura ambiente. O que ocorre então é que a mobilidade aumenta com a diminuição da temperatura e em determinado valor de temperatura ela se mantém constante caindo rapidamente para valores menores de temperatura.

Se a equação 7.6 for válida, então estamos num regime em que as concentrações de portadores de carga estão próximas entre si, fazendo com que a aproximação utilizada para determinar o sinal da fase não seja mais válida, pois a diferença entre buracos e elétrons se torna significativa, onde devemos considerar a expressão completa para o taxa de recombinação, dada pela equação 7.16, nos nossos cálculos.

Esta necessidade foi contornada quando definimos o tempo de recombinação efetivo $\Gamma_n(T)$ de forma que poderemos escrever a taxa de recombinação em função dele, $R = \frac{nh\nu}{\Gamma_n(T)}$, com

$$\frac{1}{\Gamma_n(T)} = \frac{p_0 + n_0 \frac{p_{hv}}{n_{hv}} + p_{hv}}{\tau_p \left[n + n_i \exp\left(\frac{E_T - E_i}{K_B T}\right) \right] + \tau_n \left[p + n_i \exp\left(\frac{E_i - E_T}{K_B T}\right) \right]} \quad (7.27)$$

uma função mais complicada e dependente da temperatura, assim obteríamos os mesmos resultados, quando levamos em consideração tanto a corrente de elétrons quanto a de buracos. Com isso, a mobilidade medida nestas temperaturas e o tempo de recombinação efetivo seria uma combinação entre a mobilidade dos buracos e dos elétrons no material e de suas concentrações em equilíbrio e das concentrações foto geradas, sendo então caracterizada por um valor máximo e um valor mínimo.

Como a corrente lida pelo Lock-in é a soma destas duas, durante a determinação da concentração pela teoria proposta ela já foi levada em conta, o que explicaria seus valores negativos apresentados nas Figuras 7.95 e 7.96, onde foram provocados pela mudança do sinal da mobilidade ambipolar, logo os pontos em que ela passa pelo zero, indicaria uma igualdade nas concentrações de elétrons e buracos nas bandas de condução, de valência e das impurezas.

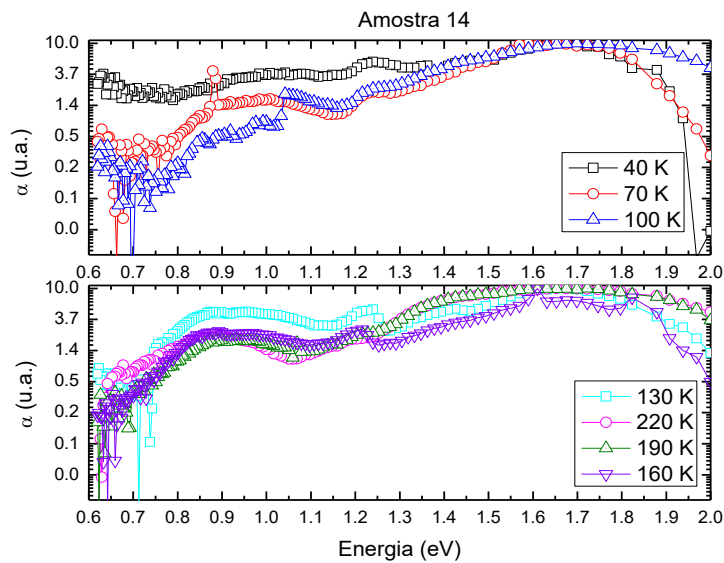


Figura 7.97: Variação do coeficiente de absorção com a energia do fóton incidente na temperatura entre 40 e 160 K.

Observando a variação do coeficiente de absorção verificamos que ele é praticamente estável na faixa entre 0,6 e 1,9 eV a uma temperatura de 40 K, caindo bruscamente a zero acima disso. Isto significa então que temos uma taxa de geração de pares constante no semiconductor, e as oscilações encontradas são provocadas pelas variações de temperatura na amostra.

Se considerarmos que não houvesse estas variações, poderíamos obter um determinado valor de temperatura onde a fotocorrente atingiria o menor valor, implicando num equilíbrio entre portadores foto gerados, armadilhados e a concentração efetiva na banda de valência, onde a condutividade dos portadores caia para um valor mínimo, caracterizando assim o comportamento dos materiais desordenados [19].

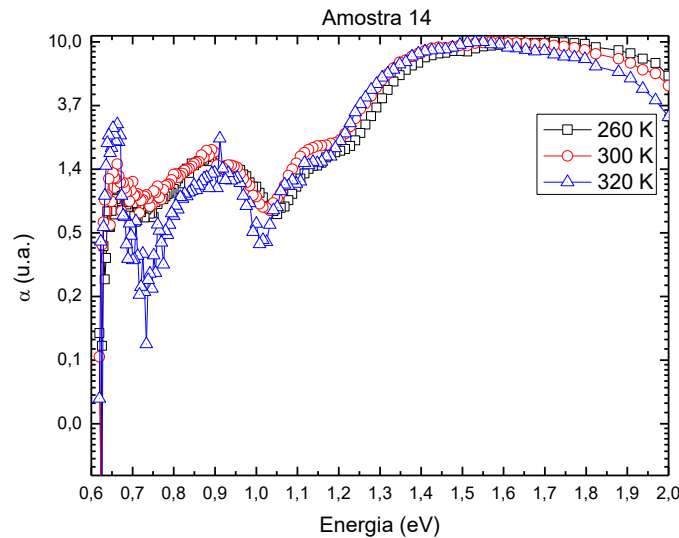


Figura 7.98: Variação do coeficiente de absorção com a energia do fóton incidente na temperatura entre 260 e 320 K para a amostra 14.

Mas, com o aumento da concentração, a mobilidade adquire somente valores negativos, como pode ser visto para os resultados da amostra 34 a seguir, o que indica uma inversão do tipo de portador majoritário, passando de p para n , assim, deve haver um ponto de transição entre $2,88 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ e $1,89 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, um ponto um pouco abaixo do valor de concentração crítica obtida a partir de valores teóricos. Logo podemos afirmar que a dopagem por fósforo funciona como um doador de elétrons.

Além disto, o valor da mobilidade aumentou bastante, o que seria de se esperar, pois normalmente a mobilidade dos elétrons geralmente é maior que a dos buracos para a maioria dos semicondutores, e que a mobilidade ambipolar depende destas duas concentrações. A partir da Figura 7.99 vemos que a mobilidade é praticamente independente da energia do fóton incidente, surgindo apenas uma curva gaussiana para temperaturas menores que 160 K, com uma largura de aproximadamente 0,2 eV entre 160 e 260 K com um pico em 1,18 eV e outra com largura de 0,1 eV em 40 e 60 K com o pico em 1,25 eV. Estas gaussianas começam a surgir entre 300 e 260 K e decaem com a temperatura ocorrendo uma inversão entre 160 e 60 K, isto explicaria o excesso de ruído durante a medida nas temperaturas nesta faixa.

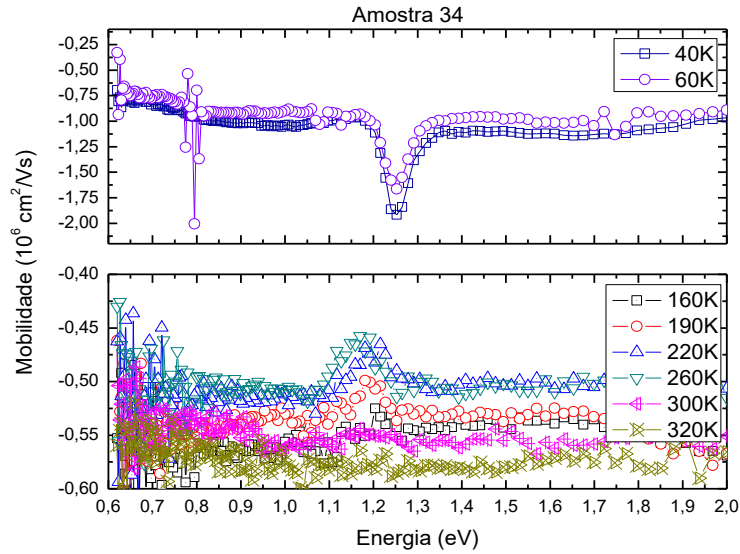


Figura 7.99: Variação mobilidade com a energia do fóton incidente na temperatura entre 40 e 320 K para a amostra 34.

O melhor resultado obtido desta transição entre os dois tipos de portadores foi em 100 K, mas tivemos que alterar consideravelmente o ganho, passando de 10k para 10M, o que produziu uma queda brusca na corrente no escuro, ficando em torno de 0,004 μA , a uma tensão aplicada de 1mV, e que está abaixo do nosso valor de erro adotado devido as variações de temperatura permitida. E como consequência a mobilidade calculada ficou 20 vezes maior que em outras temperaturas (Figura 7.100).

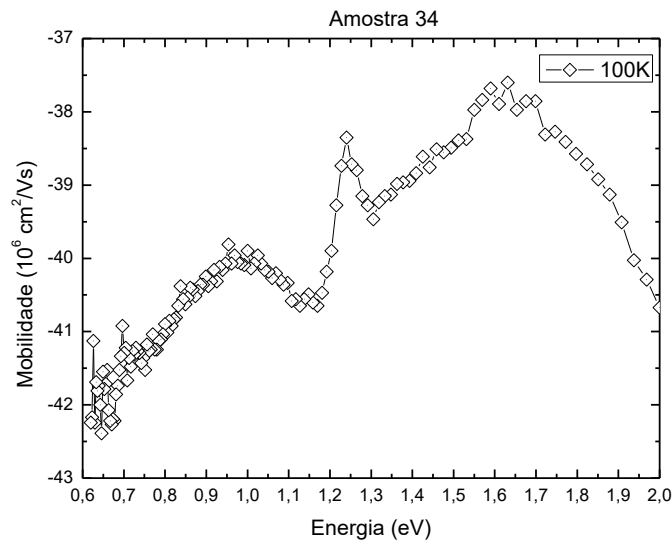


Figura 7.100: Variação mobilidade com a energia do fóton incidente em 100 K para a amostra 34.

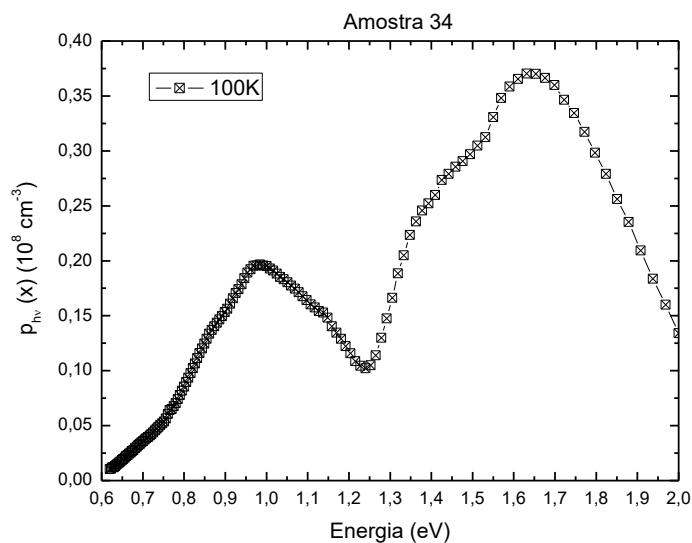


Figura 7.101: Variação concentração de buracos fotogerados com a energia do fóton incidente em 100 K para a amostra 34.

Isto pode ser explicado pelos mesmos argumentos dados para a amostra 14, com uma diferença que neste caso isso ocorre apenas nesta faixa de temperatura, o que faz sentido quando considerarmos a dependência das concentrações efetivas com a temperatura.

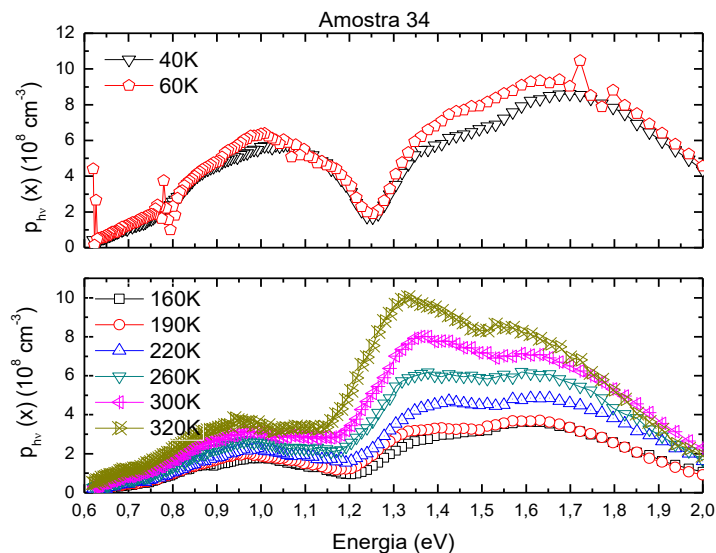


Figura 7.102: Variação concentração de buracos fotogerados com a energia do fóton incidente em diferentes temperaturas para a amostra 34.

A figura acima mostra que fora desta faixa as concentrações adquirem um comportamento suave com a energia, mas não atinge valores negativos, chegando a próximo de zero em 0,6 eV.

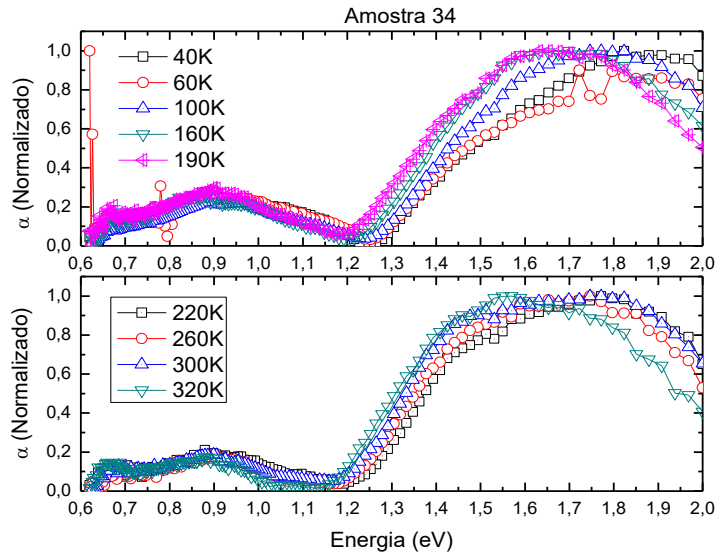


Figura 7.103: Variação do coeficiente de absorção com a energia do fóton incidente em diferentes temperaturas para a amostra 34.

Finalmente, a Figura 7.103 mostra a variação do coeficiente de absorção para a amostra 34 onde vemos o início de absorção do silício, como o que foi discutido para a amostra 03 dopada apenas com bismuto, e apenas uma região de absorção devido as impurezas. Nela, percebe-se claramente a variação do gap ótico em função da temperatura com uma diferença, não existe mais a linha de offset apresentado nos outros resultados, pois estão em uma escala linear e não em forma $Ln \times Lin$ como anteriormente. Isto é explicado devido ao termo exponencial apresentado no tempo de recombinação efetivo, pois como ele depende da mobilidade e este por sua vez adquire valores negativos, a tendência é que se aproxime de um, levando a uma dependência apenas com o tempo de recombinação, e este por sua vez é muito inferior a um.

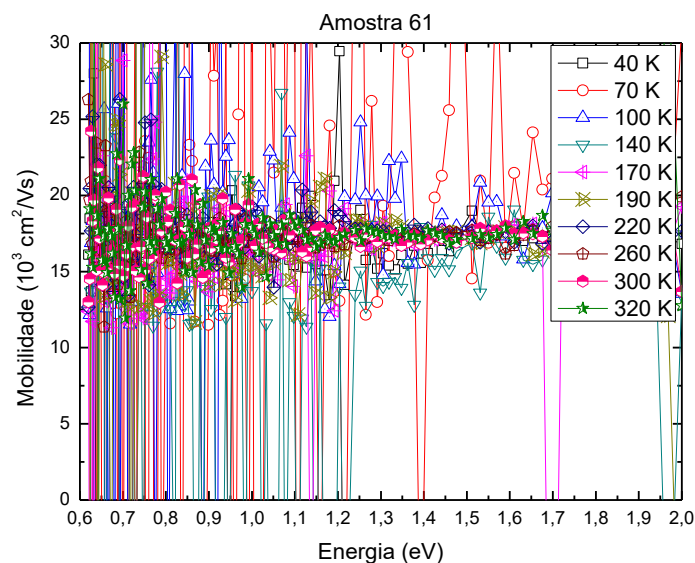


Figura 7.104: Variação da mobilidade em função da energia do fóton incidente em diferentes temperaturas para a amostra 61.

Observe que a faixa de energia em que o coeficiente de absorção tende a zero, coincide com o surgimento das gaussianas apresentados nos resultados para a mobilidade e concentração, o que leva a crer que existe uma intersecção entre a banda de condução e de impureza, como o apresentado em materiais amorfos, determinados por estados de cauda produzindo assim um cruzamento dos dois coeficientes de absorção nesta região.

Se aumentarmos a dopagem até próximo do valor crítico (amostra 61), temos uma independência da mobilidade em função da temperatura o que estaria de acordo com a Referência [88], atingido um valor médio de $17.000 \text{ cm}^2/Vs$ (Figura 7.104), onde não foi identificado que o coeficiente de absorção tende a um máximo na faixa de temperatura medida (Figura 7.107). Com exceção na temperatura ambiente, em outras temperaturas o coeficiente de absorção apresentou variações levando a grandes flutuações na concentração de portadores foto gerados (Figuras 7.107 e 7.108) além do material torna-se tipo *p* novamente. O excesso de ruído na figura 7.105 pode ter sido ocasionado pelas variações de temperatura permitida pelo controlador do criostato.

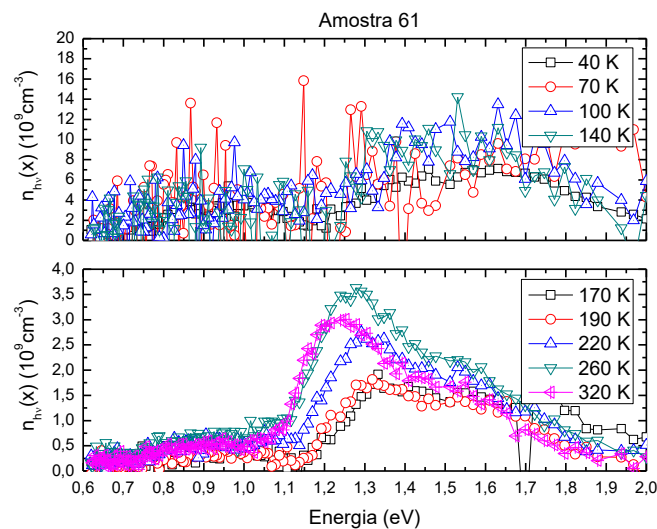


Figura 7.105: Variação da concentração em função da energia do fóton incidente em diferentes temperaturas para a amostra 61.

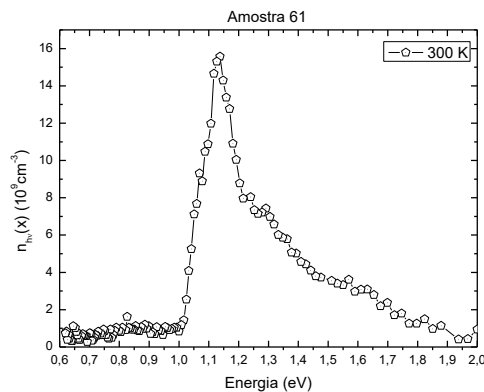


Figura 7.106: Variação da concentração em função da energia do fóton incidente em temperatura ambiente para a amostra 61.

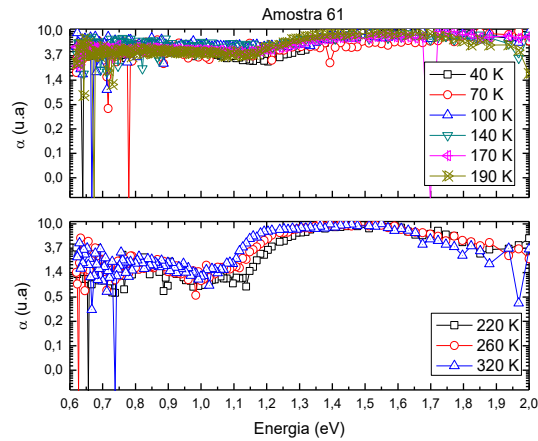


Figura 7.107: Variação do coeficiente de absorção em função da energia do fóton incidente em diferentes temperaturas para a amostra 61.

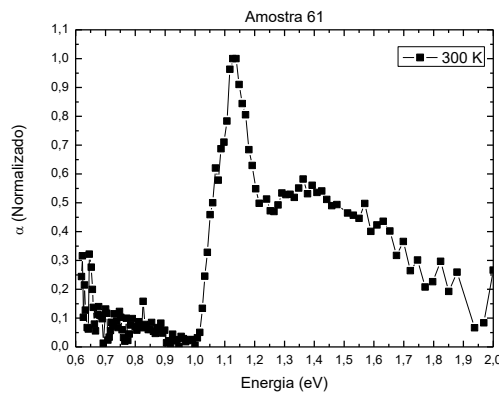


Figura 7.108: Variação do coeficiente de absorção em função da energia do fóton incidente temperatura ambiente para a amostra 61.

A medida que aumentamos a concentração de impurezas (amostra A2D), aparentemente ocorre uma “competição” entre os portadores majoritários em função da temperatura e dos portadores gerados fazendo com que a mobilidade ambipolar oscile entre valores positivos e negativos, apresentando um pico bastante pronunciado a 130 K.

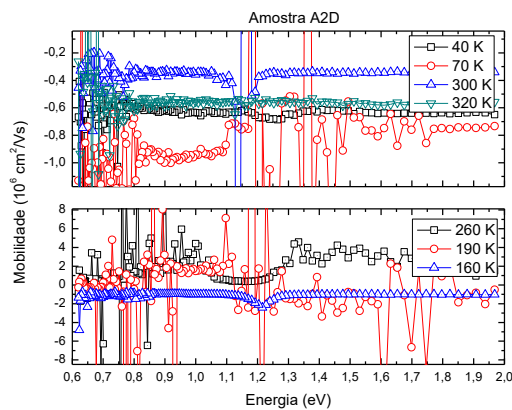


Figura 7.109: Variação da mobilidade em função da energia do fóton incidente e da temperatura para a amostra A2D.

Como consequência, ocorre uma alteração no tipo de portador medido e variações do coeficiente de absorção, não podendo normalizá-lo (Figuras 7.110 a 7.114 a seguir). Logo, a análise realizada pela teoria proposta deve ser tomada individualmente em função da temperatura para materiais com forte dopagem, como a amostra A2D, onde não é possível uma distinção clara dos efeitos térmicos e da concentração de portadores em equilíbrio e foto gerados.

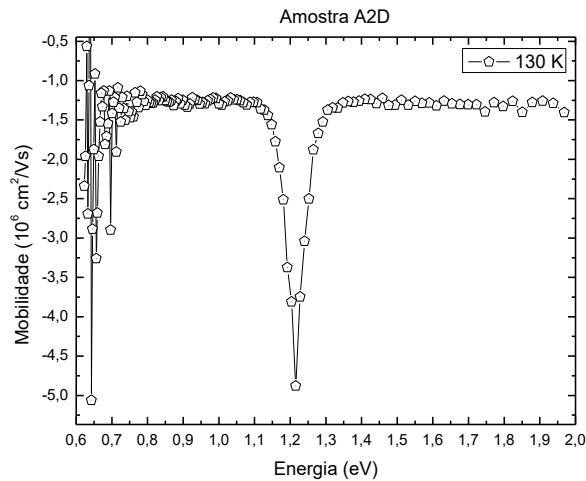


Figura 7.110: Variação da mobilidade em função da energia do fóton incidente a 130 K para a amostra A2D.

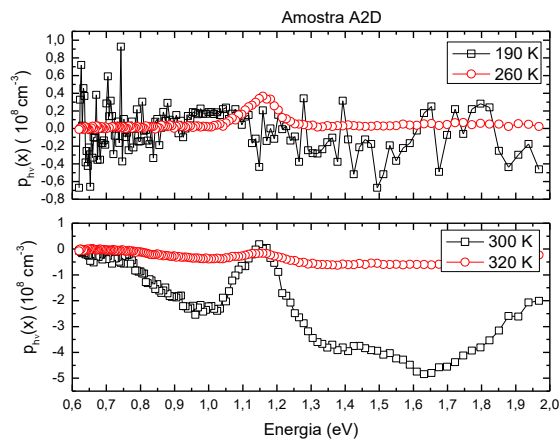


Figura 7.111: Variação da concentração em função da energia do fóton incidente na temperatura entre 190 e 320 K para a amostra A2D.

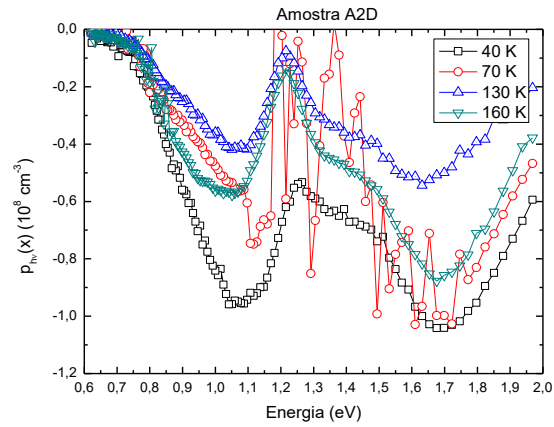


Figura 7.112: Variação da concentração em função da energia do fóton incidente na temperatura entre 40 e 160 K para a amostra A2D.

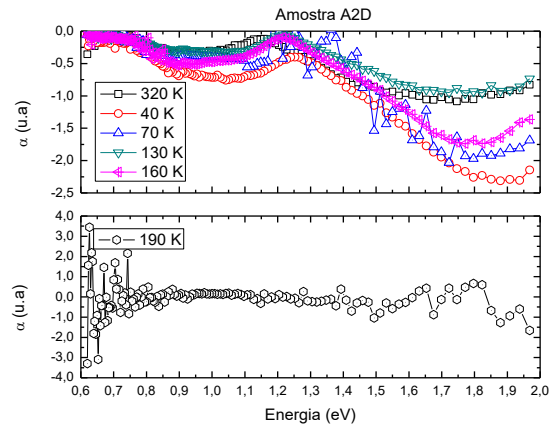


Figura 7.113: Variação do coeficiente de absorção em função da energia do fóton incidente em diferentes temperaturas para a amostra A2D.

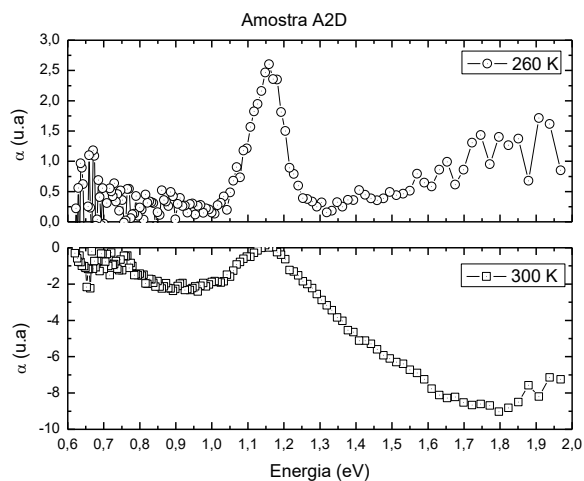


Figura 7.114: Variação do coeficiente de absorção em função da energia do fóton incidente nas temperaturas de 260 e 300 K para a amostra A2D.

8. *Conclusões e Perspectivas*

O objetivo principal deste trabalho é determinar as propriedades de transporte em semicondutores de filmes finos fabricados/adquiridos pelo Instituto de Física da UFBA e que não se limitasse apenas a medidas experimentais, pois as amostras eram crescidas sobre outros semicondutores de filme fino. Assim precisávamos de procedimentos, tanto teóricos quanto experimentais, que pudessem determinar estas propriedades. Neste caso o crescimento de um semicondutor sobre o outro, a descrição experimental da condutividade via teorema de Van der Pauw, da concentração de portadores via efeito Hall ou da energia de gap via fotocondução, não poderiam ser aplicadas diretamente, pois, estas teorias, tomavam como base condições ideais que não representavam a situação atual das amostras. Com base nisso, começou-se uma busca e uma adaptação nas propostas teóricas existentes que pudessem se adequar as amostras obtidas.

Inicialmente, percebemos que o primeiro obstáculo, na medida da condutividade via teorema de Van der Pauw, estava justamente na solda dos contatos, pois a descrição teórica exige contatos pontuais além da dificuldade em realizá-los. Isso nos levou à busca por um método de medida sem contatos onde optamos pelo método das correntes de Foucault. Mas este método precisava de uma reformulação pois a descrição clássica também não levava em conta a situação de multicamadas. A modificação foi feita incluindo a descrição via funções de Green. Além disso, medidas anteriores realizadas sobre o $\text{SnO}_2:\text{F}$, apresentou resultados que descreveram este material como praticamente metálico, onde sua condutividade praticamente não se alterava quando se reduzia a temperatura. Neste caso também não obtivemos uma base teórica que descrevesse este comportamento, assim iniciamos uma busca sobre as teorias e métodos existentes, até nos deparamos com o método Monte Carlo.

Este método computacional mostrou-se uma poderosa ferramenta para a análise de transporte, onde pudemos obter uma estimativa dos valores reais em baixo campo elétrico. O artigo original também fazia uma estimativa da mobilidade Hall, mas este, por sua vez, considerava apenas um campo elétrico resultante composto pelo campo incidente e pelo Campo Hall. Com a inclusão da Equação de Boltzmann neste método obtemos uma descrição mais geral das propriedades de transporte em semicondutores, além da inclusão da dependência com a temperatura, da concentração de portadores e do campo magnético aplicado.

Com os resultados obtidos pudemos perceber que as propriedades intrínsecas de cada material (como gap, potenciais de deformação, separação de energia entre vales, etc.) interferem no comportamento tanto nas medidas de efeito Hall quanto nas medidas de condutividade realizadas por quaisquer métodos utilizados, pois a depender do campo elétrico aplicado, teríamos flutuações entre estes valores. Além disso, o comportamento da resistividade em função do campo elétrico apresentou uma variação que não foi verificada experimentalmente para as amostras simuladas, isto sugere que alguns materiais podem apresentar uma magnetoresistência mesmo em um campo magnético relativamente fraco.

O resultado para o dióxido de estanho indica que a mobilidade deste material depende principalmente da emissão e absorção de fônons da rede, um fator Hall e um coeficiente Hall independente da temperatura, do campo magnético e do campo elétrico aplicado. As medidas de condutividade e efeito Hall em função da temperatura realizadas neste trabalho puderam confirmar estes resultados, o que aprofundou os conhecimentos sobre os mecanismos de transporte nestes materiais. As medidas em função do campo elétrico aplicado não puderam ser obtidas, pois o cartão Hall utilizado só pode operar com tensões máximas de 8 V, impossibilitando assim a confirmação do resultado da resistividade crescente deste material em função do campo elétrico. Assim torna-se necessário a aquisição e montagem de novos equipamentos capazes de suportar elevadas tensões para verificar este comportamento, pois todas as amostras simuladas apresentaram variações distintas de resistividade.

Não foi possível realizar as medidas experimentais no CIS pois o material fabricado na época não tinha homogeneidade espacial, ou seja, apresentava diversas falhas na sua estrutura, onde algumas eram visíveis à olho nu, assim as medidas realizadas eram praticamente as do dióxido de estanho que serve de substrato de crescimento do CIS. Mas a simulação realizada mostrou um comportamento distintos entre o CIS tipo n e o tipo p , fator Hall e coeficiente Hall dependente da temperatura e independente do campo magnético aplicado em ambos, e que a dependência com o campo elétrico aprece a partir de determinado valor. Não tínhamos no presente momento os outros materiais para serem estudados e além do mais se tratava de uma nova proposta de implementação do método Monte Carlo, assim não foram encontrados resultados experimentais na literatura.

Outra vantagem percebida no método Monte Carlo é que podemos adaptar para materiais multicamadas como o CIS, pois se conhecermos a espessura do material e com a velocidade de deriva simulada, podemos indicar um tempo de percurso onde o portador de carga irá encontrar uma interface com outro material, obtendo assim uma mobilidade combinada entre eles. Esta situação foi prevista pelo método das correntes de Foucault, pois os cálculos teóricos realizados mostraram que, devido as espessuras do CIS e do $\text{SnO}_2\text{:F}$, não haveria uma alteração significativa na densidade de corrente em função da profundidade e nem da fase, o que na medida experimental, iríamos detectar dois campos magnéticos gerados por materiais diferentes, levando à uma combinação da resistividade destes.

Durante os testes realizados por correntes de Foucault foi possível perceber claramente a dependência do sinal com a distância da amostra, isto sugere que a abordagem via potencial vetor em coordenadas cilíndricas é necessária para obter resultados mais precisos. Este sistema de coordenadas é conveniente pois as bobinas são fabricadas de forma cilíndrica. Apesar da montagem experimental com um circuito baseado na medida dos batimentos entre dois sinais obter resultados satisfatórios para os valores de resistividade do $\text{SnO}_2\text{:F}$, ainda precisamos de amostras com dimensões superiores à da bobina o que leva a uma dificuldade experimental, pois a maioria das

amostras adquiridas apresentam dimensões inferiores, necessitando assim a fabricação de uma bobina de tamanho reduzido.

Além disso, para incluir materiais multicamadas devemos levar em conta as espessuras e condutividades dos materiais estudados o que leva a uma reformulação da teoria descrita na montagem experimental em função do potencial vetor em coordenadas cilíndricas e que o circuito possa diferenciar os materiais em função da profundidade, ou seja, o circuito deve ser capaz de identificar a função de Green refletida na interface de separação entre os meios. A ideia inicial foi utilizar um analisador de espectros que, via transformada de Fourier, mostrasse uma diferença no sinal emitido pelo circuito de detecção devido a presença da amostra com duas interfaces, ou seja, para o $\text{SnO}_2:\text{F}$ o batimento no sinal apresentaria um espectro distinto do CIS, onde, mesmo com os valores de espessuras destes materiais, o equipamento poderia distinguir os resultados, assim teríamos como estimar os valores de resistividades destes semicondutores. Isto não pôde ser implementado a partir de um programa de FFT devido as dimensões e qualidade das amostras de CIS fornecidas.

A qualidade das amostras de CIS tornou-se um problema recorrente, pois durante os testes da montagem de fotocondução que foram realizadas no $\text{SnO}_2:\text{F}$, que não apresentou fotocondutividade em nenhuma temperatura, o material em questão não apresentou influencia devido a sua não homogeneidade espacial devido ao processo de fabricação. O equipamento montado para fotocondutividade só pôde ser testado após a aquisição das amostras de silício dopadas com fósforo e bismuto.

Inicialmente os resultados obtidos para estas amostras estavam de acordo com a descrição da teoria, mas foi percebido, durante os testes, que ocorria uma variação da fase do sinal lido pelo lock-in e que dependia da energia do fóton incidente. Isto levou a uma modificação no programa de aquisição para salvar os valores da fase em função da temperatura e da energia do fóton incidente. Esta variação de fase não era prevista pelo modelo teórico existente, pois, se levássemos em conta a determinação do tempo de voo, o sinal da fase lida pelo lock-in não deveria mudar com a energia da radiação incidente, e sim, apenas com a temperatura, o que foi observado principalmente na amostra 03. Para as outras amostras estas variações apresentaram-se de forma significativas, o que nos levaram a crer que, para estes semicondutores, a teoria existente de fotocondução não poderia ser aplicada. Assim, propomos uma explicação teórica onde pudéssemos descrever estes materiais, tomando como base a interpretação dos resultados obtidos, ou seja, a mudança da fase em função da temperatura e da energia do fóton incidente, pois uma variação da fase do sinal obtido a partir da montagem realizada não era prevista teoricamente e nem experimentalmente para a faixa de frequências utilizadas.

A abordagem teórica, baseada nas amostras recebidas, mostraram que, para amostras com concentração de impurezas abaixo da concentração crítica, elas apresentam uma mobilidade que depende da temperatura e que não dependente da energia do fóton incidente. Mas a concentração de portadores foto-excitados, com concentrações de dopantes acima ou próxima da concentração crítica, dependem da temperatura e da energia do fóton incidente. Entretanto, para o último caso, estes materiais apresentam uma

mobilidade que depende da taxa de geração e recombinação dos portadores, da concentração de portadores, e que podem variar entre os tipos n e tipos p , a depender do dopante utilizado, da temperatura e da energia do fóton incidente.

Mas, o coeficiente de absorção do material continua a depender diretamente do gap da matriz utilizada, da concentração dos portadores e do tipo do dopante utilizado. Esta análise só foi possível com a aplicação do modelo teórico, onde foi possível identificar os níveis de energia das impurezas presentes e diferencia-los da energia de gap da matriz, além do tipo de mobilidade, do tipo de concentração dos portadores gerados, do coeficiente de absorção e do comportamento destes em função da temperatura e da energia do fóton incidente.

As medidas experimentais de fotocondução, junto com a teoria proposta, foram de grande importância na descrição das propriedades elétricas deste tipo de semicondutores, pois a teoria existente não descrevia teoricamente e nem experimentalmente o comportamento destes materiais com uma alta concentração de dopantes. Com esta nova descrição, mostramos que seria possível ocorrer uma inversão do tipo do portador majoritário devido ao processo de captura de pares, além de demonstrar experimentalmente que seria possível ocorrer a mudança de resistividade a depender da temperatura e da energia do fóton incidente. Além disso pudemos determinar a mobilidade dos portadores minoritários, a concentração de portadores gerados, a energia das impurezas e o coeficiente de absorção do material. Esta teoria apresentou-se de forma completa se pensarmos na proposta do trabalho, mas devemos realizar as medidas de acordo com as condições das amostras estudadas e do equipamento utilizado.

Como perspectivas de trabalhos futuros pretendemos adaptar o método Monte Carlo para realizar cálculos com campo magnéticos intensos incluindo a dependência do spin, além de realizar um programa que possa simular efeitos fotocondutivos nos materiais. Para o método das correntes de Foucault a fabricação de bobinas cada vez menores que estejam de acordo com as dimensões das amostras desenvolvidas e que operem em frequências maiores se torna essencial para reduzir os erros e dinamizar o sistema de medida. Outra perspectiva é aplicar o modelo teórico da fotocondutividade ambipolar para materiais de dupla camada e na região do infravermelho, assim poderemos investigar os níveis de energia de impureza dentro do gap de alguns materiais. E por fim realizar a montagem do experimento de Haynes-Shockley variando a temperatura com o intuito de analisar diretamente a mobilidade dos materiais e compará-lo com os resultados do método Monte Carlo e de fotocondução.

9. Anexo

9.1 Simulação Monte Carlo Para a Amostra de GaAs

```
C *****
C *****
C SIMULAÇÃO DOS PARAMETROS DE TRANPORTE USANDO O MÉTODO
CMONTE CARLO.
C ELABORADO EM 23/05/17 POR ERICK SANTANA (VERSÃO 7.2)
C *****
C *****
PROGRAM TRANSPORTE
IMPLICIT NONE
C *****
C -----DEFINIÇÕES DAS CONSTANTE-----
REAL*8 m,el, Kb,T,Pi,Eg,F
DOUBLE PRECISION k,k0,kzi,kyi,kz,kx,ky,theta,fi,vzi,t2,rH,Rh2,By
REAL*8 Ei,Ef,E,t1,dt,t0,dEij,Ef1
REAL Ni, Zn, b,alfai,alfaj,Zj
DOUBLE PRECISION CGamma1,Gamma2,Gamma3,Gamma4,GammaSs,Gamma5,Gamma6,
CGamma8, Gamma9 PRECISION Gamma7,
REAL*8 ram,r
DOUBLE PRECISION tau,A,B1,C,F0,N0,F1,ran2,g,u1,mu,tau1
REAL*8 imp,neu,poa,pac,poe,ina,ine,iee,iea
REAL*8 D,e0,ks,kin,h,Dij,mj
REAL*8 Nn,ro,u,w,wij
REAL*8 momento,p, Energia,desvio,erro, velocidade,v,temporelax2
INTEGER N,M1,idum,i,j,l,ii,ll,jj
EXTERNAL Ran2
PARAMETER (M1=1e3) !CÁLCULO DO VALOR MÉDIO DA ENERGIA DE
CCADA PARTÍCULA
PARAMETER (N=1e4) !NÚMERO DE PARTÍCULAS COM A MESMA
CENERGIA INICIAL
```

REAL, DIMENSION (N)::PHI

idum= 93420121

C *****

C -----CONSTANTES UNIVERSAIS-----

el=1.602e-19 ! carga do elétron (C)

e0= 8.85e-12 !permissividade no vácuo (F/m)

Kb=1.38062E-23/el ! constante de Boltzman (J/K)

T=300. ! temperatura (K)

h=1.055e-34! constante de Planck (J.s)

Pi=4.*ATAN(1.) !Pi

C *****

C -----VALORES DA AMOSTRA GaAs-----

m=9.1e-31*0.067 !razão massa efetiva/massa do elétron (Kg)

Eg=1.424 !Gap (eV)

Zn=1. !CARGA DA IMPUREZA

ks= 12.9 ! CONSTANTE DIELÉTRICA ESTÁTICA

kin= 10.92 !CONSTANTE DIELÉTRICA INFINITO

w= 4.5e13 !FREQUÊNCIA DO FÔNON (rad/s)

Ni=8e17 ! CONCENTRAÇÃO DE IMPUREZAS IONIZADAS (1/m³)

Nn =1.e18 !CONCENTRAÇÃO DE IMPUREZA NEUTRA (1/m³)

ro=5.37 !DENSIDADE DE MASSA (g/cm³)

D= 7. !POTENCIAL DE DEFORMAÇÃO ACÚSTICO (eV)

u= 5.22e5 !VELOCIDADE ACUSTICA LONGITUDINAL (cm/s)

Zj=4

mj=0.58*9.1e-31

Dij=1e9

wij=4.56e13

alfai = 1 / Eg * (1 - m / 9.1E-31)**2 !COEFICIENTE DE

C NÃO-PARABOLICIDADE

alfaj =1 / Eg * (1 - mj / 9.1E-31)**2

$$dE_{ij}=0.48!13.9*Kb*T$$

```

C -----ALTERAR NA SUBROTINA ABAIXO-----
C *****
C     CRIAR O ARQUIVO DE SALVAMENTO E DEFINIR O NÚMERO DE
C     PARTICULAS A PARTIR TOTAL DO CALCULO PARA O VALOR MÉDIO
C     E O VALOR TOTAL DO CAMPO
C -----ELÉTRICO-----
OPEN(1, FILE='FICGaAs300K.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(2, FILE='FICtaxaGaAs300K.dat',STATUS='UNKNOWN')
WRITE(1,*) 'Campo,' ', 'velocidade,' ', 'Energia,' ',
s'FatorHall,' ', 'CoeficienteHall,' ', 'Mobilidade,' ',
s'Ionizada,' ', 'Neutra,' ', 'Acusticos,' ', 'AbsPho,' ',
s'EmisPho,' ', ' ', 'AbsIntNe,' ', 'EmisIntrNe,' ', 'AbsIntE',
s' ', 'EmisIntrE'
write(1,*) 'V/m,' ', 'm/s,' ', 'eV,' ', 'a.d.,' ', 'm3/C,' ',
s'm2/V.s,' ', ',%', ',%', ',%', ',%', ',%', ',%', ',%',
s' ',%', ',%', ',%'
write(2,*) 'Campo,' ', 'Ionizada,' ', 'Neutra,' ', 'Acusticos',
s' ', 'AbsPho,' ', 'EmisPho,' ', ' ', 'AbsIntNe,' ', 'EmisIntrNe',
s' ', 'AbsIntE,' ', 'EmisIntrE,' ', 'Total'
write(2,*) 'V/m,' ', '1/s,' ', '1/s,' ', '1/s,' ', '1/s,' ', '1/s',
s' ', '1/s,' ', '1/s,' ', '1/s" ', '1/s" ', '1/s'
C *****
C INICIO DOS VALORES DO CAMPO ELÉTRICO
PRINT*, ' CAMPO ELÉTRICO ', ' ENERGIA',
s' FATOR HALL'
C *****
C *****
C -----C[ALCULO DA TAXA DE ESPALHAMENTO DA ENERGIA INICIAL-----
dt=5e-19
Ei=3/2*Kb*T

```

$k_0 = \sqrt{2 \cdot m \cdot E_i \cdot e_1} / (2 \cdot \pi \cdot h)$!PARA UMA BANDA PARABOLICA

C -----

C -----SELECIONAR UM TAU INICIAL PARA TODAS AS PARTÍCULAS-----

--

CALL

TAXA(Ei,tau,Gamma1,Gamma2,Gamma3,Gamma4,Gamma5,Gamma6,Gamma7,
sGamma8,Gamma9)

tau1=tau

C -----

C *****AUMENTO DO CAMPO ELÉTRICO
CAPLICADO*****

DO 40 j=1,30

F=100e3*j

C -----CONDIÇÕES INICIAIS-----

imp=0.

neu=0.

poa=0.

poe=0.

pac=0.

iee=0.

iea=0.

ii=0.

momento=0.

velocidade=0.

energia=0.

temporelax2=0.

C *****

C -----

DO 30 l=1,N !-----SELEÇÃO DAS PARTÍCULAS-----

C ----CONDIÇÕES INICIAIS DO TEMPO LIVRE MÉDIO DE CADA
CPARTÍCULA-----

Ef1=0.


```

p=0.
v=0.
t2=0.
jj=0
C *****
C GERAR NUMEROS RANDÔMICOS PARA DETERMINAR O TEMPO LIVRE
ram=ran2(idum)
t1=-LOG(1-ram)/tau1
C *****
DO 50 ll=1,M1 !aumentar a energia cinética por partícula
C *****
C -----Aumento no tempo de percurso sem colisão-----
t1=t1+dt !O elétron percorre um tempo maior sem ser espalhado
C -----CÁLCULO DA TAXA DE ESPALHAMENTO DA ENERGIA INICIAL-----
C-----
k=k0+F*el*t1/(2.*Pi*h)
Ei=(2.*Pi*h*k)**2/(2.*m)/el ! EM ELETRONVOLT
CALL
TAXA(Ei,tau,Gamma1,Gamma2,Gamma3,Gamma4,Gamma5,Gamma6,Gamma7,
sGamma8,Gamma9)
C *****
C *****
C ---SELEÇÃO DO MECANISMO DE ESPALHAMENTO, SE É REAL OU
FICTÍCIO,---
C ----A DIREÇÃO DO VETOR DE ONDA É APENAS NA DIREÇÃO DO CAMPO-
C-----
C -AQUI UTILIZAMOS O LIVRO "ELECTRONIC E OPTOELECTRONIC
PROPERTIES--
C ----- OF SEMICONDUCTOR STRUCTURES"-----
ram=ran2(idum)
C -----
IF (((Gamma1+Gamma2+ Gamma3 + Gamma4+ Gamma5 + Gamma6 + Gamma7
+

```

```

sGamma8+Gamma9)/tau).LT.ram).and.(ram.LE.1)) then
C  ESPALHAMENTO FICTÍCIO
    goto 50
END IF

IF (((((Gamma1+Gamma2+Gamma3+Gamma4+Gamma5+Gamma6 + Gamma7
+Gamma8)
s/tau).LT.ram).and.(ram.LE.((Gamma1+Gamma2+Gamma3+Gamma4 + Gamma5 +
sGamma6+Gamma7+Gamma8+Gamma9)/tau))) then
    iee=iee+1
    Ef=abs(Ei-(h/el)*wij)
    k=sqrt(2*m*Ef*(1+alfai*Ef)*el)/(2*Pi*h)
    theta=(1.-2.*ran2(idum))
    fi=2.*Pi*ran2(idum)
    theta=acos(theta)
C  ESPALHAMENTO POR EMISSÃO DE INTERVALE EQUIVALENTE
    goto 60
END IF

C  -----
IF (((((Gamma1 + Gamma2 +Gamma3+Gamma4+Gamma5+Gamma6+Gamma7) /
tau)
s.LT.ram).and.(ram.LE.((Gamma1+Gamma2+Gamma3+Gamma4+Gamma5+Gamma6
+
sGamma7+Gamma8)/tau))) then
    ica=ica+1
    Ef=abs(Ei+(h/el)*wij)
    k=sqrt(2*m*Ef*(1+alfai*Ef)*el)/(2*Pi*h)
    theta=(1.-2.*ran2(idum))
    fi=2.*Pi*ran2(idum)
    theta=acos(theta)
C  ESPALHAMENTO POR ABSORÇÃO DE INTERVALE EQUIVALENTE
    goto 60

```

```

END IF
C -----
IF (((Gamma1 + Gamma2 + Gamma3 + Gamma4 + Gamma5 + Gamma6) / tau)
s.LT.ram).and.(ram.LE.((Gamma1+Gamma2+Gamma3+Gamma4+Gamma5+Gamma6
+
sGamma7)/tau))) then
    ine=ine+1
    Ef=abs(Ei-dEij-(h/el)*wij)
    k=sqrt(2*m*Ef*(1+alfai*Ef)*el)/(2.*Pi*h)
    theta=(1.-2.*ran2(idum))
    fi=2.*Pi*ran2(idum)
    theta=acos(theta)
C   ESPALHAMENTO POR EMISSÃO DE INTERVALE NÃO EQUIVALENTE
    goto 60
END IF
C -----
600 IF (((Gamma1 + Gamma2 + Gamma3 + Gamma4 + Gamma5) / tau).LT.ram)
    s.and.(ram.LE.((Gamma1+Gamma2+Gamma3+Gamma4+Gamma5+
Gamma6)/tau)))
    s then
        ina=ina+1
        Ef=abs(Ei-dEij+(h/el)*wij)
        k=sqrt(2*m*Ef*(1+alfai*Ef)*el)/(2.*Pi*h)
        theta=(1.-2.*ran2(idum))
        fi=2.*Pi*ran2(idum)
        theta=acos(theta)
C   ESPALHAMENTO POR ABSORÇÃO DE INTERVALE NÃO EQUIVALENTE
    goto 60
END IF
C -----
500 IF (((Gamma1 + Gamma2 +Gamma3+Gamma4)/tau).LT.ram).and.(ram.LE.((

```

```
sGamma1+Gamma2+Gamma3+Gamma4+Gamma5)/tau))) then
```

```
poe=poe+1
```

```
Ef=abs(Ei-(h/el)*w)
```

```
k=sqrt(2*m*Ef*(1+alfai*Ef)*el)/(2.*Pi*h)
```

```
r=ran2(idum)
```

```
F0=2*sqrt(Ef*Ei)/(sqrt(Ei)-sqrt(Ef))**(-2.)
```

```
theta=(1.+F0-(1.+2*F0)**r)/F0
```

```
fi=2.*Pi*ran2(idum)
```

```
theta=acos(theta)
```

```
C  ESPALHAMENTO POR EMISSÃO DE FÔNOS ACÚSTICOS
```

```
goto 60
```

```
END IF
```

```
C  -----
```

```
400 IF (((Gamma1 + Gamma2 +Gamma3)/tau).LT.ram).and.(ram.LE.((Gamma1+  
sGamma2+Gamma3+Gamma4)/tau))) then
```

```
poa=poa+1
```

```
Ef=abs(Ei+(h/el)*w)
```

```
k=sqrt(2*m*Ef*(1+alfai*Ef)*el)/(2.*Pi*h)
```

```
r=ran2(idum)
```

```
F0=2*sqrt(Ef*Ei)/(sqrt(Ei)-sqrt(Ef))**(-2.)
```

```
theta=(1.+F0-(1.+2*F0)**r)/F0
```

```
fi=2.*Pi*ran2(idum)
```

```
theta=acos(theta)
```

```
C  ESPALHAMENTO POR ABSORÇÃO DE FÔNOS ÓTICOS
```

```
goto 60
```

```
END IF
```

```
C  -----
```

```
100 IF (((Gamma1+Gamma2)/tau).LT.ram).and.(ram.LE.((Gamma1+ Gamma2 +  
sGamma3)/tau))) then
```

```
pac=pac+1
```

```

Ef=Ei
k=sqrt(2*m*Ef*(1+alfai*Ef)*el)/(2.*Pi*h)
r=ran2(idum)
theta=(((1-r)*(1+2*alfai*Ef)**3+r)**(1/3)-(1+alfai*Ef)/(alfai*
sEf)
fi=2.*Pi*ran2(idum)
theta=acos(theta)
C   ESPALHAMENTO POR FÔNOS ACÚSTICOS
    goto 60
END IF

C   -----
200 IF (((Gamma1)/tau).LT.ram).and.(ram.LE.((Gamma1+Gamma2)/
stau))) then
    neu=neu+1
    Ef=Ei
    k=sqrt(2*m*Ef*(1+alfai*Ef)*el)/(2.*Pi*h)
    theta=(1.-2.*ran2(idum))
    fi=2.*Pi*ran2(idum)
    theta=acos(theta)
C   ESPALHAMENTO POR IMPUREZAS NEUTTRAS
    goto 60
END IF

C   -----
300 IF ((0.LT.ram).and.(ram.LE.(Gamma1/tau)))
s then
    imp=imp+1
    Ef=Ei
    k=sqrt(2*m*Ef*(1+alfai*Ef)*el)/(2.*Pi*h)
    r=ran2(idum)
    theta=(1.-2.*(1.-r)/(1.+4.*r*kin*Kb*T*k**2/(Ni*el**2)))

```

```

    fi=2.*Pi*ran2(idum)
    theta=acos(theta)
C   ESPALHAMENTO POR IMPUREZAS IONIZADAS
    END IF
C   -----
C   *****VALORES      FINAIS      PARA      UM      A
CPARTÍCULA*****
C   *****
60  jj=jj+1
    ii=ii+1!DETERMINAR A PORCENTAGEM DE CADA MECANISMO DE
    CESPALHAMENTO
    kx=k*sin(theta)*cos(fi)
    ky=k*sin(theta)*sin(fi)
    kz=k*cos(theta)
    Ef1=Ef1 + Ef !Determinar a variação de energia do elétron
    p=p+2.*Pi*h*sqrt(kx**2+ky**2+kz**2)
    v=v+2.*Pi*h*sqrt(kx**2+ky**2+kz**2)/(m*(1+2.*alfai*Ef*el))
    t2=t2+(2.*Pi*h*sqrt(kx**2+ky**2+kz**2)/(m*(1+2.*alfai*Ef*el))*m/(F
    s*el))**2!valor quadratico médio do tempo de relaxação
50  CONTINUE
C   *****
C   -----CÁLCULO DOS VALORES MÉDIOS PARA UM ELÉTRON-----
-
    Energia=Energia+Ef1/jj
    momento=momento+p/jj
    velocidade=velocidade+v/jj
    temporelax2=temporelax2+t2/jj
C   -----SELEÇÃO DA PRÓXIMA PARTÍCULA-----
30  CONTINUE
C   *****
C   ----DETERMINAÇÃO DOS VALORES MÉDIOS PARA TODOS OS
CELÉTRONS-----

```

momento=momento/N

Energia=Energia/N

velocidade=velocidade/N

temporelax2=temporelax2/N

C *****

C ----CÁLCULO DA MOBILIDADE, DO COEFICIENTE HALL E DO FATOR CHALL----

rH=temporelax2/(velocidade*m/(F*el))**2 !FATOR HALL

By=0.6 ! INTENSIDADE DO CAMPO MAGNÉTICO

Rh2=1/(-Ni*1e-6*el/rH + Ni*1e-6*el**3/(m**2)*temporelax2*(By**2))

mu=el/m*temporelax2/(velocidade*m/(F*el)) !MOBILIDADE HALL

C *****

C -----CÁLCULO DA PORCENTAGEM DE CADA MECANISMO DE CESPALHAMENTO-----

imp=imp*100/ii

neu=neu*100/ii

poa=poa*100/ii

poe=poe*100/ii

pac=pac*100/ii

ina=ina*100/ii

ine=ine*100/ii

iea=iea*100/ii

iee=iee*100/ii

C *****

C -----SALVAR OS VALORES DO ESPALHAMENTO PARA A ENERGIA MÉDIA-----

C -----CÁLCULO DA TAXA DE ESPALHAMENTO DA ENERGIA FINAL-----

CALL

TAXA(Ei,tau,Gamma1,Gamma2,Gamma3,Gamma4,Gamma5,Gamma6,Gamma7,

sGamma8,Gamma9)

t0= 1./Gamma1+1./Gamma2+1./Gamma4+ 1./Gamma5+1./Gamma3 + 1./Gamma6

```

s+1./Gamma7 +1./Gamma8+1./Gamma9
WRITE(1,*) F,velocidade,Energia,rH,Rh2,mu,imp,neu,pac,poa,poe,ina,
sine,iea,iee
WRITE(2,*) F,Gamma1,Gamma2,Gamma3, Gamma4, Gamma5, Gamma6,
Gamma7,
sGamma8,Gamma9, t0
PRINT*,F,Energia,rH
C *****
C -----INICIO DOS CÁLCULOS PARA O PRÓXIMO VALOR DO CAMPO-----
---
40 CONTINUE
C *****
C -----FINAL DOS CÁLCULOS-----
CLOSE(1)
CLOSE(2)
PRINT*, 'CONCLUÖDO'
PRINT*, 'TEMPO TOTAL = ',t1,' s'
STOP
END
C *****
C *****
C *****
C -----SUBROTINA PARA CALCULAR AS TAXAS DE ESPALHAMENTO-----
C-----
SUBROUTINE
TAXA(Ei,tau,Gamma1,Gamma2,Gamma3,Gamma4,Gamma5,Gamma6,
sGamma7, Gamma8, Gamma9)
REAL*8 m,el, Kb,T,Pi,Eg,F
REAL*8 Ei,E,dEij
REAL Ni, Zn, b,alfai,alfaj,Zj
DOUBLE
PRECISION
Gamma1,Gamma2,Gamma3,Gamma4,Gamma5,Gamma6

```


s,Gamma7, Gamma8, Gamma9

DOUBLE PRECISION tau,A,B1,C,F0,N0,F1,g,u1

REAL*8 D,e0,ks,kin,h,Dij,mj

REAL*8 Nn,ro,u,w,wij

C *****

C -----CONSTANTES UNIVERSAIS-----

el=1.602e-19 ! carga do elétron (C)

e0= 8.85e-12 !permissividade no vácuo (F/m)

Kb=1.38062E-23/el ! Constante de Boltzman (J/K)

T=300. ! Temperatura (K)

h=1.055e-34/el! Constante de Planck (J.s)

Pi=4.*ATAN(1.) !Pi

C *****

m=9.1e-31*0.067 !razão massa efetiva/massa do elétron (Kg)

Eg=1.424 !Gap (eV)

Zn=1. !CARGA DA IMPUREZA

ks= 12.9 ! CONSTANTE DIELÉTRICA ESTÁTICA

kin= 10.92 !CONSTANTE DIELÉTRICA INFINITO

w= 4.5e13 !FREQUÊNCIA DO FÔNON (rad/s)

Ni=8e23 ! CONCENTRAÇÃO DE IMPUREZAS IONIZADAS (1/m^3)

Nn =1.e18 !CONCENTRAÇÃO DE IMPUREZA NEUTRA (1/m^3)

ro=5.37 !DENSIDADE DE MASSA (g/cm^3)

D= 7. !POTENCIAL DE DEFORMAÇÃO ACÉSTICO (eV)

u= 5.22e5 !VELOCIDADE ACUSTICA LONGITUDINAL (cm/s)

Zj=4

mj=0.58*9.1e-31

Dij=1e9

wij=4.56e13

alfai = 1 / Eg * (1 - m / 9.1E-31)**2 !COEFICIENTE DE

C NÃO-PARABOLICIDADE

$$\text{alfaj} = 1 / E_g * (1 - m_j / 9.1E-31)**2$$

$$dE_{ij}=0.48!13.9*K_b*T$$

C *****

GammaSs=1.15e13 !VALOR DO ESPALHAMENTO FICTÍCIO

C *****

C IMPUREZA IONIZADA-----

$$\text{Gamma1} = 4. * \text{Pi} * \text{Sqrt}((9.1E-31/e_l)**3)/(\text{Sqrt}(2.)*\text{Pi}**2*(h/e_l)**3$$

$$\text{C } s)*e_l**2 / (e_0**2*(h/e_l)*32) * \text{Zn}**2 * \text{Ni} * \text{Sqrt}((m / 9.1E-31)**3)/$$

$$\text{C } s(ks**2*(\text{Sqrt}((2*9.1E-31/(h/e_l)**2 / e_l) * (m / 9.1E-31) * (E_i * (1$$

$$\text{C } s+ \text{alfai} * E_i))))**4) * \text{Sqrt}(E_i * (1 + \text{alfai} * E_i)) * (1 + 2 * \text{alfai} *$$

$$\text{C } sE_i) * (2 * (\text{Sqrt}((2*9.1E-31/(h/e_l)**2/ e_l) * (m / 9.1E-31) * (E_i *$$

$$\text{C } s(1 + \text{alfai} * E_i)))) / (\text{Sqrt}(\text{Ni} * e_l / (e_0 * ks * K_b * T))))**2 * (1$$

$$\text{C } s/ (1 + ((\text{Sqrt}(\text{Ni} * e_l / (e_0 * ks * K_b * T)))/(2*(\text{Sqrt}((2*9.1E-31 /$$

$$\text{C } s(h/e_l)**2/e_l) * (m / 9.1E-31) * (E_i * (1 + \text{alfai} * E_i))))))**2)**2$$

C IMPUREZA NEUTRA-----

$$\text{Gamma2} = 20. * 4. * \text{Pi} * e_l * ks * N_n * (h/e_l)**3 / m**2 * e_0$$

C FÔNONS ACÚSTICOS-----

$$\text{Gamma3} = \text{Sqrt}((2 * 9.1E-31 / e_l)**3) * (m / 9.1E-31)**(3 / 2) * K_b$$

$$s*e_l / (2*\text{Pi}*(h/e_l)**4) * T * D**2 / (u**2 * \text{ro}) * (1 + 2 * \text{alfai} * E_i$$

$$s) * \text{Sqrt}(E_i * (1 + \text{alfai} * E_i)) * ((1 + \text{alfai} * E_i)**2 + 1 / 3*(\text{alfai}$$

$$s * E_i)**2)/(1 + 2 * \text{alfai} * E_i)**2$$

C ABSORÇÃO DE FÔNONS ÓTICOS POLAR-----

$$E = ((h/e_l) * w + E_i)$$

$$A = (2. * (1. + \text{alfai} * E_i) * (1. + \text{alfai} * E) + \text{alfai} * (E_i * (1. + \text{alfai} * E_i) + E * (1. + \text{alfai} * E))))**2$$

$$g = \text{sqrt}(E_i * (1. + \text{alfai} * E_i) * E * (1. + \text{alfai} * E))$$

$$u_1 = (4. * (1. + \text{alfai} * E_i) * (1. + \text{alfai} * E) + \text{alfai} * (E_i * (1. + \text{alfai} * E_i) + E * (1. + \text{alfai} * E))))$$

$$B_1 = -2.*\text{alfa}*g*u_1$$

$$C = 4. * (1. + \text{alfai} * E_i) * (1. + \text{alfai} * E) * (1. + 2. * \text{alfai} * E_i$$

$$s) * (1. + 2. * \text{alfai} * E)$$

$$N0 = 1 / (\text{Exp}((h/el)^* w / (\text{Kb} * T)) - 1)$$

$$F1 = (\text{Sqrt}(Ei * (1. + \text{alfai} * Ei)) + \text{Sqrt}(E * (1. + \text{alfai} * E))) / (s\text{Sqrt}(Ei * (1. + \text{alfai} * Ei)) - \text{Sqrt}(E * (1. + \text{alfai} * E)))$$

$$F1 = \text{Log}(\text{Abs}(F1))$$

$$F0 = 1 / C * (A * F1 + B1)$$

$$\text{Gamma4} = el * \text{Sqrt}(m / el)^* w / (\text{Sqrt}(2.)^*(h/el)^* 4. * \text{Pi} * e0) * (1 s/kin - 1 / ks) * (1. + 2. * \text{alfai} * E) / \text{Sqrt}(Ei * (1. + \text{alfai} * Ei)) s* F0 * N0$$

C EMISSÃO FÔNONS ÓTICOS POLAR-----

$$E = \text{abs}(Ei - (h/el)^* w)$$

$$A = (2. * (1. + \text{alfai} * Ei) * (1. + \text{alfai} * E) + \text{alfai} * (Ei * (1. + \text{alfai} * Ei) + E * (1. + \text{alfai} * E)))^* 2$$

$$g = \text{sqrt}(Ei * (1. + \text{alfai} * Ei) * E * (1. + \text{alfai} * E))$$

$$u1 = (4. * (1. + \text{alfai} * Ei) * (1. + \text{alfai} * E) + \text{alfai} * (Ei * (1. + \text{alfai} * Ei) + E * (1. + \text{alfai} * E)))$$

$$B1 = -2. * \text{alfai} * g * u1$$

$$C = 4. * (1. + \text{alfai} * Ei) * (1. + \text{alfai} * E) * (1. + 2. * \text{alfai} * Ei s) * (1. + 2. * \text{alfai} * E)$$

$$N0 = 1 / (\text{Exp}((h/el)^* w / (\text{Kb} * T)) - 1) + 1 \text{ !ADICIONE PARA EMISSÃO--}$$

$$F1 = (\text{Sqrt}(Ei * (1. + \text{alfai} * Ei)) + \text{Sqrt}(E * (1. + \text{alfai} * E))) / (s\text{Sqrt}(Ei * (1. + \text{alfai} * Ei)) - \text{Sqrt}(E * (1. + \text{alfai} * E)))$$

$$F1 = \text{Log}(\text{Abs}(F1))$$

$$F0 = 1 / C * (A * F1 + B1)$$

$$\text{Gamma5} = el * \text{Sqrt}(m / el)^* w / (\text{Sqrt}(2.)^*(h/el)^* 4. * \text{Pi} * e0) * (1 s/kin - 1 / ks) * (1. + 2. * \text{alfai} * E) / \text{Sqrt}(Ei * (1. + \text{alfai} * Ei)) s* F0 * N0$$

C ABSORÇÃO INTERVALE NÃO-EQUIVALENTE

$$E = \text{abs}(Ei - dEij + h * wij / el)$$

$$N0 = 1 / (\text{Exp}((h/el)^* wij / (\text{Kb} * T)) - 1)$$

```

F1=(1+alfai*Ei)*(1+alfaj*E)/((1+2*alfai*Ei)*(1+2*alfaj*E))
F0=sqrt((9.1E-31/el)**3)*el*Zj*(mj/9.1E-31)**(1.5)*Dij**2/(ro*wij*
ssqrt(2.)*Pi*(h/el)**3)
Gamma6=(1.+2.*alfaj*E)*sqrt(E*(1.+alfaj*E))*F1*N0*F0

```

C EMISSÃO INTERVALE NÃO-EQUIVALENTE

```

E=abs(Ei-dEij-h*wij/el)
N0 = 1/(Exp((h/el)*wij/(Kb*T))-1)+1
F1=(1+alfai*Ei)*(1+alfaj*E)/((1+2*alfai*Ei)*(1+2*alfaj*E))
F0=sqrt((9.1E-31/el)**3)*el*Zj*(mj/9.1E-31)**(1.5)*Dij**2/(ro*wij*
ssqrt(2.)*Pi*(h/el)**3)
Gamma7=(1.+2.*alfaj*E)*sqrt(E*(1.+alfaj*E))*F1*N0*F0

```

C ABSORÇÃO INTERVALE EQUIVALENTE

```

E=abs(Ei+h*wij/el)
N0 = 1/(Exp((h/el)*wij/(Kb*T))-1)+1
F0=sqrt((9.1E-31/el)**3)*el*(Zj-1)*(mj/9.1E-31)**(1.5)*Dij**2/(ro*
swij*sqrt(2.)*Pi*(h/el)**3)
Gamma8=sqrt(E)*N0*F0

```

C EMISSÃO INTERVALE EQUIVALENTE

```

E=abs(Ei-h*wij/el)
N0 = 1/(Exp((h/el)*wij/(Kb*T))-1)+1
F0=sqrt((9.1E-31/el)**3)*el*(Zj-1)*(mj/9.1E-31)**(1.5)*Dij**2/(ro*
swij*sqrt(2.)*Pi*(h/el)**3)
Gamma9=sqrt(E)*N0*F0

```

C ----- E FALTA O ESPALHAMENTO POR LIGAS-----

```

tau=Gamma1+Gamma2+Gamma3+Gamma4+Gamma5+Gamma6+Gamma7+Gamma8
+Gamma9

```

```

tau=GammaSs+tau

```

```

RETURN

```

```

END

```

C *****

```

C *****
C *****
C GERADOR DE NUMERO RANDÔMICO-----
FUNCTION ran2(idum)
INTEGER idum,IM1,IM2,IMM1,IA1,IA2,IQ1,IQ2,IR1,IR2,NTAB,NDIV
REAL ran2,AM,EPS,RNMX
PARAMETER (IM1=2147483563,IM2=2147483399,AM=1./IM1,IMM1=IM1-
1,IA1=
&40014,IA2=40692,IQ1=53668,IQ2=52774,IR1=12211,IR2=3791,NTAB=32,NDI&
&V=1+IMM1/NTAB,EPS=1.2e-7,RNMX=1.-EPS)
INTEGER idum2,j,k,iv(NTAB),iy
SAVE iv,iy,idum2
DATA idum2/123456789/, iv/NTAB*0/, iy/0/
if (idum.le.0) then
idum=max(-idum,1)
idum2=idum
do j=NTAB+8,1,-1
k=idum/IQ1
idum=IA1*(idum-k*IQ1)-k*IR1
if (idum.lt.0) idum=idum+IM1
if (j.le.NTAB) iv(j)=idum
enddo
iy=iv(1)
endif
k=idum/IQ1
idum=IA1*(idum-k*IQ1)-k*IR1
if (idum.lt.0) idum=idum+IM1
k=idum2/IQ2
idum2=IA2*(idum2-k*IQ2)-k*IR2
if (idum2.lt.0) idum2=idum2+IM2

```

```
j=1+iy/NDIV
iy=iv(j)-idum2
iv(j)=idum
if(iy.lt.1)iy=iy+IMM1
ran2=min(AM*iy,RNMX)
return
END
```

```
C *****
```

10. Referências

1. MAGALHÃES, E. C. S. Propriedades Ópticas de Filmes Finos de Dióxido de Estanho, Salvador, 2006.
2. DA SILVA, M. V. S. **Estudo de Filmes Finos de SnO₂ por espectroscopia Infravermelha**. Salvador, p. 45. 2007.
3. KUMAR, S. G.; DEV, L. G. Review on Modified TiO₂ Photocatalysis under UV/Visible Light: Selected Results and Related Mechanisms on Interfacial Charge Carrier Transfer Dynamics. **Journal of Physical Chemistry** , v. 115, p. 13211–13241, 2011.
4. HASHIMOTO, K.; IRIE, H.; FUJISHIMA, A. TiO₂ Photocatalysis: A Historical Overview and Future Prospects. **Japanese Journal of Applied Physics**, v. 44, n. 12, p. 8269 - 8285, 2005.
5. BAO, S. et al. New Nanostructured TiO₂ for Direct Electrochemistry and Glucose Sensor Applications. **Advanced Functional Material**, v. 18, p. 591–599, 2008.
6. VITICOLI, M. et al. Third-generation biosensors based on TiO₂ nanostructured films. **Materials Science and Engineering C**, v. 26, p. 947 - 951, 2006.
7. DA SILVA, M. V. S. et al. **Fabricação de Filmes Finos de CuInSe₂ por Eletrodeposição**. Belém do Pará. 2010.
8. SANTOS, E. S. **Medida de Condutividade de Semicondutores à Baixa Temperatura**. Salvador. 2009.
9. ROBERT, R.; BERLEZE, S. M. **Teorema de van der Pauw**. [S.l.]: Revista Brasileira de Física, v. 29, 2007. 15-18 p.
10. GIROTTO, E. M.; SANTOS, I. A. **Medidas de Resistividade Elétrica DC em Sólidos: Como Efetuá-las Corretamente**. [S.l.]: Quimica Nova, v. 25, 2002. 639-647 p.
11. SMYTHE, W. R. **Static and Dynamic Electricity**. 2^a. ed. New York: McGraw-Hill Book Company, Inc., 1950.
12. JACOBONI, C.; REGGIANE, L. The Monte Carlo Method for the Solution of Charge Transport in Semiconductors with Applications to Covalent Materials. **Reviews of Modern Physics**, 55, 1983.
13. LUNDSTROM, M. **Fundamentals of Carrier Transport**. 2^a. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000.

14. BALESHTA, T. M.; KEYS, J. D. Single Electrometer Method of Measuring Transport Properties of High-Resistivity Semiconductors. **American Journal of Physics**, v. 36, n. 23, 1968.
15. BEAN, C. P.; DEBLOIS, R. W.; NESBITT, L. B. Eddy-Current Method for Measuring the Resistivity of Metals. **Journal of Applied Physics**, v. 30, n. 1976, 1959.
16. DAYBELL, M. D. Eddy Current Method for Low Temperature Resistivity Measurements. **Review of Scientific Instruments**, v. 38, n. 1412, 1967.
17. GASPAR, A. **Física - Eletromagnetismo e Física Moderna, Vol. 3**. [S.l.]: àtica, 2002.
18. TIWARI, S.; GREENHAM, N. C. Charge mobility measurement techniques. **Optical and Quantum Electronics**, v. 41, n. 2, p. 69-89, 2009.
19. MADELUNG, O. **Introduction to Solid State Theory**. [S.l.]: Springer, 1996.
20. MARK, S.; MORDECHAI, S. **Applications of Monte Carlo Method in Science and Engineering**. [S.l.]: InTech , 2011.
21. HALL, E. H. On a New Action of the Magnet on Electric Currents. **American Journal of Mathematics** , v. Vol. 2, n. 3, p. 287-292 , 1879.
22. BUBE, R. H. **Photoconductivity of Solids**. New York: John Wiley e Sons. Inc, 1960.
23. GOLAN, G. et al. Hot-Probe method for evaluation of impurities concentration in semiconductors. **Microelectronics Journal**, 2006. 910 - 915.
24. SCONZA, A.; TORZO, G. A simple and instructive version of the Haynes-Shockley experiment. **European Journal Physical**, n. 8, 1987.
25. REZENDE, S. M. **Materiais e Dispositivos Eletrônicos**. [S.l.]: Livraria da Física, 2004.
26. EINSTEIN, A. Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. **Ann. Phys.**, v. 322, p. 549–560, 1905.
27. NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de Física Básica**. 4^a. ed. [S.l.]: [s.n.], 2004.
28. GRUUNDMANN, M. **The Physics of Semiconductor**. 1^a. ed. [S.l.]: Springer, 2006.

29. COLINGE, J. P.; COLINGE, C. A. **Physics of Semiconductor Devices**. [S.l.]: Kluwer Academic Publishers, 2000.
30. SZE, S. M. **Physics of Semiconductor Devices**. 2^a. ed. [S.l.]: John Willey and Sons, 1981.
31. HAMAGUCHI, C. **Basic Semiconductor Physics**. 2^a. ed. [S.l.]: Springer, 2001.
32. VAN DER PAUW, L. J. **A method of Measuring the Resistivity and Hall Coefficient on Lamellae of Arbitrary Shape**. [S.l.]: Philips Technical Review, v. 20, 1958. ISBN 8.
33. OLIVEIRA, C. E. M. D.; CARVALHO, M. M. G. D. **Sistema Automatizado para Medidas de Efeito Hall em Semicondutores**. [S.l.]: [s.n.], v. 11, 1996. 23-46 p. ISBN 1.
34. RAZEGHI, M. **Fundamental of Solid State Engineering**. 2^a. ed. [S.l.]: Springer, 2006.
35. CEOLIN, M. F. **Estudo da Mobilidade Eletrônica nos Compostos InGaAsP**. [S.l.]: Dissertação de Mestrado - UNICAMP, 1983.
36. YOUNG, H.; FREEDMAN, R. **Física III: Eletromagnetismo – Sears & Zemansky**. 12^a. ed. [S.l.]: Pearson, 2009.
37. KITTEL, C. **Introdução à Física do Estado Sólido**. [S.l.]: [s.n.], 7^a Edição.
38. SINGH, J. **Semiconductor Devices: Basic Principles**. [S.l.]: John Wiley and Sons, Inc., 2001.
39. CARDONA, M.; PETER, Y. Y. **Fundamentals of Semiconductors**. [S.l.]: Springer, 1996. 212 p.
40. ENDERLEIN, R.; HORING, N. J. M. **Fundamentals of Semiconductor Physics and Devices**. 1^a. ed. New Jersey: Word Scientific, 1997.
41. BHATTACHARYYA, K.; GOODNICK, S. M.; WAGER, J. F. Monte Carlo Simulation of Electron Transport in Alternating-Current Thin-Films Electroluminescent Devices. **Journal Applied Physics**, 1 April 1993. 3390-3395.
42. LUIGE, P. et al. Physical Review B, 39, 1989.
43. SHEN, M. et al. Monte Carlo Simulation of Spin-Polarized Transport. **Lectures Notes in Computer Science**, 2668, 2003. 881-891.

44. WORDELMAN, C. J.; RAVAIOLI, U. Integration of a Particle-Particle-Particle-Mesh Algorithm with the Ensemble Monte Carlo Method for the Simulation of Ultra-Small Semiconductor Devices. **IEEE Transaction on Electron Devices**, 47, 2000. 410-416.
45. SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Mecânica Quântica Moderna**. 2ª. ed. Porto Alegre: Bookman, 2013.
46. ASHCROFT, N. M.; MERMIM, D. N. **Física do Estado Sólido**. [S.l.]: Cengage Learning, 2011.
47. SINGH, J. **Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2003.
48. MACHLINE, C. et al. **Manual de Administração da Produção**. Rio de Janeiro: Fundação Getúlio Vargas, v. 2, 1970.
49. WOLLER, J. **The Basics of Monte Carlo Simulations, Physical Chemistry Lab**. Lincoln: Spring, 1996.
50. KOONIN, S. E.; MEREDITH, D. C. **Computational Physics - Fortran Version**. [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
51. ANGELOTTI, W. F. D. et al. Uma Abordagem Simplificada do Método Monte Carlo Quântico: Da Solução de Integrais ao Problema da Distribuição Eletrônica. **Química Nova**, 31, 2008. 433-444.
52. BIAGI, S. F. Monte Carlo simulation of electron drift and diffusion in counting gases under the influence of electric and magnetic fields. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research**, 421, 1999. 234 - 240.
53. MUSTAFA, A.; ÖZBAS, Ö. Monte Carlo Simulation for Electron Dynamics in Semiconductor Devices. **Mathematical and Computational Applications**, 10, 2005. 19-26.
54. MAJORANNA, A.; MUSCATO, O.; MILAZZO, C. Charge Transport in 1D Silicon Devices via Monte Carlo Simulation and Boltzmann-Poisson Solver. **COMPEL**, 23, 2004. 410-425.
55. STEFAN, V. D. Free-flight Generation in Direct Simulation Monte Carlo for Carrier Transport in Semicondutores. **Communications to SIMAI Congress**, 3, 2009. 12.
56. WHITLOCK, M. H. K.; PAULA, A. **Monte Carlo Method**. [S.l.]: Wiley-BlackWell, 2008.

57. VASILESKA, D. et al. Semiconductor Device Modeling. **Journal of Computational and Theoretical Nanoscience**, 5, 2008. 1-32.
58. WHELAN, C. T.; MASON, N. J. **Electron Scattering**. [S.l.]: Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2005.
59. FAWCETT W., B. A. D. A. S. S. Monte Carlo Determination of Electron Transport Properties in Gallium Arsenide. **Journal of Physical Chemistry of Solids**, 1970. 1963-1990.
60. JALLEPALLI, S. et al. A full-band Monte Carlo model for hole transport in silicon. **J. Appl. Phys.**, 81, 1997.
61. ARABSHAHI, H.; KHALVATI, M. R.; REZAEI ROKN-ABADI, M. Temperature and Doping Dependencies of Electron Mobility in InAs, AlAs and AlGaAs at High Electric Field Application. **Brazilian Journal of Physics**, v. 38, n. 3, p. 293-296, 2008.
62. STALLING, P. et al. Determining carrier mobility with a metal–insulator–semiconductor structure. **Organic Electronics**, 2008.
63. BASSALO, J. M. F. **Eletrodinâmica Clássica**. São Paulo: Livraria da Física, 2007.
64. NOTAROS, B. M. **Eletromagnetismo**. 1^a. ed. São Paulo: Person, 2012.
65. JENKINS, S. A. **Theoretical Models of Eddy Current Interaction with defects**. Guildford. 1991.
66. STRATTON, J. A. **Electromagnetic Theory**. [S.l.]: [s.n.], 1941.
67. WEBER, A. **Mathematical Methods for Physicist**. 6^a. ed. [S.l.]: Elsevier.
68. BOWLER, J. R. **Theory Eletromagnetic Nondestructive Evaluation**. Ames: Iowa State University, 2004. (Graduate Tutorial Notes).
69. ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. **Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables**. New York: John Wiley & Sons, 1972. (equação 9.1.21).
70. EATON, P. A. 3D electromagnetic inversion using integral equations. **Geophysical Prospecting**, 39, n. 6, 1989. 2829-2839.

71. DODDY, C. V.; CHENG, C. C.; DEEDS, W. E. Induction coils coaxial with an arbitrary number of cylindrical conductors. **Journal of Applied Physics**, 2, n. 45, 1973. 638-647.
72. CHINAGLIA, D. L. et al. Espectroscopia de Impedância no Laboratório de Ensino. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, 30, n. 4, 2008.
73. JACKSON, J. D. **Classical Electrodynamics**. 3^a. ed. [S.l.]: John Wiley, 1998.
74. DA SILVA, M. V. S. **Estudo de filmes finos de Disseleneto de Cobre e Índio para aplicação em células solares**. Salvador. 2010.
75. MACKELVEY, J. P. Diffusion Effects in Drift Mobility Measurements in Semiconductors. **Journal of Applied Physics**, 27, 1956.
76. SIU, E. K. M.; MANDELIS, A. Combined photo-acoustic and photoconductive spectroscopic Investigations of non-radiative recombination and electronic transport phenomena in crystalline n-type CdS. II Theory. **Physical Review B**, 34, 1986.
77. ESSALEH, L.; WASIM, S. W.; GALIBERT, J. Hall coefficient and Hall mobility in the variable range hopping conduction in n-type CuInSe₂. **Materials Letters**, v. 60, p. 1947-1949, 2006.
78. HAMADI, O. A.; SHAKIR, N. J.; MOHAMMED, F. H. Magnetic Field and Temperature Dependent Measurements of Hall Coefficient in Thermal Evaporated Tin-Doped Cadmium Oxide Thin Films. **Bulg. J. Phys.**, n. 37, p. 223-231, 2010.
79. DEY, K. K. Magnetic field dependence of electrical transport properties in acceptor doped bismuth. **Journal of Applied Physics**, v. 7, n. 2, p. 10-16, 2015.
80. SALINAS, S. R. A. **Introdução a Física estatística**. 2^a. ed. [S.l.]: Edusp, 2005.
81. SYSTEMS, L. C. **Displex Closed Cycle Cryostats**. [S.l.].
82. KEITHLEY, I. **Hall Effect Card: Instruction Manual**. [S.l.]. 1986.
83. ARAÚJO, C. M. et al. Band-gap shift of the heavily doped single- and double-donor systems Si:Bi and Si:P,Bi. **Physical Review B**, 62 No 19, 2000.
84. OZBAS., O.; AKARSU, M. Monte Carlo Simulation of Electron Transport in InSb. **Turky Journal of Physics**, 2002.
85. MADELUNG, O. **Semiconductors: Data Handbook**. [S.l.]: Springer.

86. RODILLA, H. et al. High-mobility heterostructures based on InAs and InSb: A Monte Carlo study.. **Journal of Applied Physics** , v. 113705, n. 105, p. 1-6, 2009.
87. CHIN, V. W. L.; EGAN, R. J.; TANSLEY, T. L. Carrier concentration and compensation ratio dependence of electron drift mobility in InAs_{1-x}Sb_x. **Journal Applied Physics**, v. 72, p. 1410-1415, 1992.
88. ABRAMOF, A. et al. Transport Proprieties os Silicon Implanted with Bismuth. **Physical Review B**, 55, 1997. 9584 - 9589.
89. ABRAMOF, E. et al. Metal_nonmetal transition and resistivity of silicon implanted with bismuth. **Journal of Materials Reseach**, 12, No 3, Mar 1997.
90. DA SILVA, A. F. et al. Impurity resistivity of the double-donor system Si:P,Bi. **Physical Review B**, v. 60, n. 23, p. 15824 - 15828, 1999.
91. DA SILVA, A. F. et al. Electrical resistivity of bismuth implanted into silicon. **Journal Applied Physics**, 79 No 1, 1996.
92. REIS, F. T. Fotocondutividade dependente da temperatura em filmes finos de germânio hidrogendao dopados com gálio e arsênio. **Tese de Doutorado, UNICAMP**, 2001.
93. NEAMEN, D. A. **Semiconductor Physics and Devices**. 3^a. ed. [S.l.]: McGraw - Hill, 2003.
94. PEREIRA, R. M. Caracterização óptica e elétrica de materiais fotocondutores e fotorefrativos. **Dissertação de mestrado em física**, 2006.
95. ROCHA, L. M. **Cálculo 2**. [S.l.]: Atlas, 1995.