

Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”

Instituto de Geociências e Ciências Exatas

Campus de Rio Claro

Francisco Conti Bauke

Portadores Quentes: Modelo Browniano

Rio Claro - SP

2011

Francisco Conti Bauke

Portadores Quentes: Modelo Browniano

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Geociências e Ciências Exatas da Unesp de Rio Claro como requisito à obtenção do título de Mestre em Física Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. Roberto E. Lagos Monaco

Rio Claro - SP

2011

537.622 Bauke, Francisco Conti
B346p Portadores quentes : modelo browniano / Francisco Conti Bauke. -
Rio Claro : [s.n.], 2011
51 f. : il., figs., gráfs., forms.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista, Instituto de
Geociências e Ciências Exatas
Orientador: Roberto E. Lagos Monaco

1. Semicondutores. 2. Formalismo de Langevin 3. Movimento
Browniano. 3. Equação de Langevin. 4. Portadores Quentes. I. Título.

Ficha Catalográfica elaborada pela STATI - Biblioteca da UNESP
Campus de Rio Claro/SP

Francisco Conti Bauke

Portadores Quentes: Modelo Browniano

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Geociências e Ciências Exatas da Unesp de Rio Claro como requisito à obtenção do título de Mestre em Física Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. Roberto E. Lagos Monaco

Comissão Examinadora

Prof. Titular Roberto E. Lagos Monaco

UNESP – Rio Claro

Prof. Dr. José Antonio Roversi

UNICAMP

Prof. Titular Bernardo Laks

UNICAMP

Rio Claro, 17 de fevereiro de 2011

Agradecimentos

Primeiramente gostaria de agradecer ao meu orientador, Roberto E. Lagos Monaco, por todo o tempo destinado a tirar as minhas dúvidas desde o tempo da graduação, fossem elas dúvidas referentes ao trabalho ou de ordem pessoal. Certa vez ele me disse que os alunos acabam incorporando um pouco da personalidade do orientador, se este for o meu caso, saiba que sinto muito orgulho em ser como o senhor.

A toda a minha família, em especial aos meus pais, Luiz Carlos Bauke e Elda Terezinha Conti Bauke, juntamente com a minha irmã, Tais Conti Bauke, por todo o apoio nos momentos bons e ruins, que mesmo à distância foram fundamentais para chegar onde estou hoje, e também por nunca deixar de acreditar em mim me motivando a seguir em busca dos meus objetivos.

Muito obrigado a todos os amigos que estiveram ao meu lado desde o início, e aos companheiros de república por ter compartilhado comigo momentos inesquecíveis, em especial a Rodrigo Ramazotti (Digons), Carlos Aleixo (Mexicano), Antônio Nogueira Neto (Netão), Jorge Massayuki Kondo, Caroline Gameiro (Castor), Carlos Escanhoela (Carlota), Maria Luisa Braunger (Malu), os recém chegados Lucas Squillante (Folen) e Danilo Rando (Mudinho), a todo o pessoal da Toca do Shrek pelos incontáveis churrascos, a minha namorada Bárbara Pinto Carneiro (Tuba) por estar sempre ao meu lado me apoiando em todas as decisões.

Agradeço também a Universidade Estadual Paulista (Unesp) por ter me dado a oportunidade de concluir meus estudos em uma das melhores universidades do país.

Finalmente agradeço a CNPq por ter me dado todo o apoio financeiro sem o qual não poderia concluir esta dissertação.

Resumo

Neste trabalho estudamos o modelo do movimento Browniano de uma partícula carregada sob a ação de campos elétrico e magnético, externos e homogêneos, no formalismo de Langevin. Calculamos a energia cinética média através do teorema da flutuação-dissipação e obtivemos uma expressão para a temperatura efetiva das partículas Brownianas em função da temperatura do reservatório e dos campos externos. Esta temperatura efetiva mostrou-se sempre maior que a temperatura do reservatório, o que explica a expressão “portadores quentes”. Estudamos essa temperatura efetiva no regime assintótico, ou seja, no estado estacionário atingido em tempos muito longos (quando comparado com o tempo de colisão) e a utilizamos para escrever as equações de transporte em semicondutores, denominadas equações de Shockley generalizadas sendo que incluem nesse caso também a ação do campo magnético.

Uma aplicação direta e relevante foi a modelagem para o já conhecido efeito Gunn para portadores assumidos como Brownianos. A temperatura efetiva calculada por nós no regime transiente permitiu estudar também os efeitos do reservatório na relaxação da temperatura efetiva à temperatura terminal (de não equilíbrio e estacionária).

Nossos resultados no que diz respeito ao efeito Gunn, embora seja o modelo mais simples de um portador Browniano, mostrou uma surpreendente concordância com resultados experimentais, sugerindo que modelos mais sofisticados devam incluir os elementos apresentados neste estudo.

Palavras chave: Movimento Browniano, Equação de Langevin, Portadores Quentes

Abstract

We present a Brownian model for a charged particle in a field of forces, in particular, electric and magnetic external homogeneous fields, within the Langevin formalism. We compute the average kinetic energy via the fluctuation dissipation and obtain an expression for the Brownian particle's effective temperature. The latter is a function of the heat bath temperature and both external fields. This effective temperature is always greater than the heat bath temperature, therefore the expression "hot carriers". This effective temperature, in the asymptotic regime, the stationary state at long times (greater than the collision time), is used to write down the transport equations for semiconductors, namely the generalized Shockley equations, now incorporating the magnetic field effect.

A direct and relevant application follows: a model for the well known Gunn effect, assuming a Brownian scheme. In the transient regime the computed effective temperature also allow us to probe some features of the heat bath, as the effective temperature relaxes to its terminal stationary value.

As for our results in the Gunn effect model, the simplest of all in a Brownian scheme, we obtain a surprisingly good agreement with experimental data, suggesting that more involved models should include our minimal assumptions.

Keywords: Brownian Motion, Langevin Equation, Hot Carriers

Índice de Figuras

Figura 1 - Efeito Gunn	30
Figura 2 – Sistema de bandas para o GaAs	31
Figura 3 – Curva Experimental	32
Figura 4 – Velocidade de Arraste vs. Campo Elétrico.....	36
Figura 5 – Resultados Experimentais com GaAs dopado para diversos campos magnéticos .	37
Figura 6 – Transiente de Temperatura $\theta=0$ e $b=0.1$	39
Figura 7 – Transiente de Temperatura $\theta=0$ e $b=0.5$	39
Figura 8 – Transiente de Temperatura $\theta=0$ e $b=1$	40
Figura 9 – Transiente de Temperatura $\theta=0$ e $b=2$	40
Figura 10 – Transiente de Temperatura $\theta=0$ e $b=10$	41
Figura 11 – Transiente de Temperatura $\theta=0.25\pi$ e $b=0.1$	41
Figura 12 – Transiente de Temperatura $\theta=0.25\pi$ e $b=0.5$	42
Figura 13 – Transiente de Temperatura $\theta=0.25\pi$ e $b=1$	42
Figura 14 – Transiente de Temperatura $\theta=0.25\pi$ e $b=2$	43
Figura 15 – Transiente de Temperatura $\theta=0.25\pi$ e $b=10$	43
Figura 16 – Transiente de Temperatura $\theta=0.5\pi$ e $b=0.1$	44
Figura 17 – Transiente de Temperatura $\theta=0.5\pi$ e $b=0.5$	44
Figura 18 – Transiente de Temperatura $\theta=0.5\pi$ e $b=1$	45
Figura 19 – Transiente de Temperatura $\theta=0.5\pi$ e $b=2$	45
Figura 20 – Transiente de Temperatura $\theta=0.5\pi$ e $b=10$	46

Sumário

1. Introdução.....	7
2. O movimento Browniano	9
2.1. O Modelo de Langevin	10
2.2. Os Efeitos do Campo Magnético	14
3. Transporte de Portadores Elétricos	23
3.1. A Equação de Transporte	24
3.2. As Equações de Shockley	26
3.3. As Equações de Shockley com o Campo Magnético	27
4. Semicondutores e o Efeito Gunn	29
4.1. O Efeito Gunn.....	30
4.2. A Mobilidade em Semicondutores	32
4.3. A Ação do Campo Magnético	34
4.4. O Transiente da Temperatura	38
5. Conclusões	48
6. Referências	50

1. Introdução

No ano de 1905 um jovem e até então desconhecido cientista trabalhando num escritório de patentes em Berna na Suíça, sendo seu primeiro emprego após a obtenção do doutorado, mudaria para sempre a história da física ao publicar quatro trabalhos revolucionários. No primeiro deles propôs o conceito dos fótons (quanta de luz) e usou a sua ideia para explicar o efeito fotoelétrico, trabalho pelo qual recebeu o premio Nobel em 1921. Em seu segundo artigo Einstein explicou o modelo do movimento Browniano, seu trabalho serviu não somente para provar a existência do átomo como também para provar a validade de métodos estatísticos no estudo da física. O terceiro, o mais famoso entre os leigos, foi o trabalho sobre a relatividade restrita o qual serviu de base para o quarto artigo, em que ele deduziu a famosa equação $E=mc^2$. Apesar de ter ficado famoso fora do mundo acadêmico pela sua teoria da relatividade e seu jeito peculiar, o trabalho de Einstein mais citado e talvez mais importante foi justamente o trabalho sobre o movimento Browniano (também tema de sua dissertação de doutorado). O ano de 1905 ficou conhecido como *AnnusMirabilis* graças aos trabalhos de Albert Einstein.

A presente dissertação está focada no estudo sobre o movimento Browniano¹ (movimento aleatório de partículas macroscópicas em um fluido como consequência dos choques das moléculas do próprio fluido), descoberto pelo botânico Robert Brown² ao estudar a suspensão de grão de pólen numa molécula de água. Os resultados de Einstein foram provados anos mais tarde com as experiências realizadas pelo físico francês Jean Perrin³, que acabou agraciado com o premio Nobel em 1926. Existem relatos de observações anteriores a de Brown, apesar de a descoberta ter sido atribuída a ele. O fato de que a teoria molecular ainda não era bem compreendida e aceita na época levou-o a conclusões erradas, chegando a sugerir que as moléculas apresentavam vida própria, conclusões que logo foram descartadas.

O enigma foi resolvido por Albert Einstein¹ essencialmente combinando o processo estocástico conhecido hoje como *random walk* (caminhos aleatórios), com a distribuição de Maxwell-Boltzmann⁴. Sua teoria se baseava na ideia de que se a partícula sofre uma colisão ela tende a ganhar velocidade, porém se o meio é muito viscoso esse ganho de energia é rapidamente dissipado e o resultado é uma mudança no deslocamento da partícula, ou seja, a cada nova colisão a partícula dá um “salto” realizando um movimento aleatório. Einstein

conseguiu associar a estes saltos uma equação diferencial parcial para a densidade de probabilidade de deslocamento em uma dimensão. A solução da equação mostrou que o deslocamento quadrático médio deve aumentar linearmente com o tempo. Ele conseguiu ainda escrever as constantes em função da temperatura e viscosidade do fluido.

Após a publicação dos trabalhos de Einstein vários cientistas buscaram aperfeiçoar esse modelo, um deles foi Paul Langevin, que conseguiu escrever uma equação diferencial estocástica para o problema partindo da equação de Newton⁵. O problema consistia em uma força viscosa sistemática (Stokes) e uma força de natureza randômica, cuja forma não pode ser descrita matematicamente, mas podemos associar a ela propriedades estatísticas. Utilizando sua modelagem, Langevin conseguiu recuperar os resultados obtidos anteriormente por Einstein de uma forma muito mais simples.

Após estas descobertas o problema do movimento Browniano ficou por muito tempo “esquecido”, parte deste esquecimento se deve ao fato dos grandes avanços em diversas áreas da física nas décadas que se seguiram, um exemplo bastante relevante foi o desenvolvimento da mecânica quântica, mas a principal dificuldade era a realização de experimentos à nível molecular (*single molecule experiment*). Hoje em dia com o aparecimento da microeletrônica e do domínio de estruturas a níveis nanométricas o modelo Browniano está sendo considerado como relevante nas mais diversas áreas do conhecimento, em particular, em sistemas nanoscópicos, inertes e vivos.

2. O movimento Browniano

O movimento Browniano foi explicado por Einstein combinando a distribuição de Maxwell-Boltzmann com o processo de movimento aleatório em uma dimensão conhecido como o bêbado unidimensional (random walk)⁴, ele associou a este movimento uma equação diferencial parcial para a densidade de probabilidade de deslocamento. Este processo será brevemente descrito nesta dissertação que terá como embasamento principal o formalismo apresentado pelo físico Paul Langevin, que recuperou os resultados de Einstein de uma forma muito mais simples, através de uma equação diferencial estocástica.

2.1. O Modelo de Langevin

No ano de 1908, o físico francês Paul Langevin sugeriu um novo modelo para o problema do movimento Browniano. Diferentemente do modelo apresentado por Einstein, onde a ideia principal se baseava em uma equação diferencial parcial para a densidade de probabilidade de deslocamento, Langevin apresentou uma equação diferencial estocástica para descrever tal movimento. De uma forma muito mais simples e considerando algumas propriedades estatísticas ele conseguiu recuperar os resultados obtidos por Einstein. Seu modelo parte da equação de Newton e considera duas forças agindo sobre a partícula, uma de natureza dissipativa (Stokes) representada por $\mathbf{F}_S$ e outra de natureza randômica $\mathbf{F}_R(t)$, responsável por representar os inúmeros choques das moléculas do fluido com a partícula em questão:

$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}_S + \mathbf{F}_R(t) \quad (2.1)$$

Considerando uma partícula aproximadamente esférica de raio a , com uma massa m , se movendo num fluido de viscosidade η com uma velocidade $\mathbf{v}$, a força de Stokes ^{6,7} é representada por:

$$\mathbf{F}_S = -6\pi a \eta m \mathbf{v} \quad (2.2)$$

A força estocástica não possui uma forma analítica, porem propriedades estatísticas podem ser associadas a esta função. Antes, porém, iremos definir o ruído (o ruído é uma forma de quantizar a força que atua sobre a partícula Browniana) como a força randômica por unidade de massa da partícula Browniana:

$$\mathbf{A}(t) = \frac{\mathbf{F}_R(t)}{m} \quad (2.3)$$

Tendo definido o ruído podemos lhe atribuir as seguintes propriedades⁷:

$$\langle \mathbf{A}(t) \rangle = 0 \quad (2.4)$$

$$\langle A_i(t) A_j(t) \rangle = 2 \delta_{ij} \delta(t - t) \quad (2.5)$$

A primeira propriedade indica que a partícula tem ruído médio nulo, ou seja, possui a mesma probabilidade de receber choques em qualquer direção. A segunda diz respeito à correlação à tempos distintos, neste caso não existem correlações exceto a tempos quase

idênticos, de forma que a memória da partícula é muito “curta” (ruído Markoviano) representada adequada e matematicamente pela função delta. A constante Γ quantifica o tamanho da flutuação da força randômica.

Com a definição do tempo de relaxação τ , e do seu inverso λ como:

$$\lambda = \tau^{-1} = 6\pi\eta a \quad (2.6)$$

a equação (2.1) utilizando as definições (2.3) e (2.6) fica reduzida a:

$$\frac{dv}{dt} + \lambda v = A(t) \quad (2.7)$$

A equação acima seria facilmente integrada caso fosse conhecida a forma analítica de $A(t)$. Como apenas conhecemos propriedades dadas por médias sobre este ruído não encontraremos nenhuma expressão analítica para a velocidade $v(t)$, e sim o valor médio $\langle v(t) \rangle$, este pode ser calculado assumindo a forma do ruído conhecido e logo calculando os valores médios da solução, obtendo-a somente em termos das propriedades estatísticas do ruído. Começamos utilizando o tradicional método do fator integrante⁸, multiplicando a equação (2.7) pelo fator $e^{\lambda t}$ e logo integrando:

$$e^{\lambda t} \frac{dv}{dt} + e^{\lambda t} \lambda v = e^{\lambda t} A(t) \quad (2.8)$$

$$\frac{d}{dt} [e^{\lambda t} v] = e^{\lambda t} A(t) \quad (2.9)$$

$$\int_0^t \frac{d}{dt} [e^{\lambda t} v] dt = \int_0^t e^{\lambda t} A(t) dt \quad (2.10)$$

$$e^{\lambda t} v(t) - v_0 = \int_0^t e^{\lambda t} A(t) dt \quad (2.11)$$

$$v(t) = e^{-\lambda t} v_0 + \int_0^t e^{\lambda(t-t)} A(t) dt \quad (2.12)$$

Nesta expressão v_0 representa a velocidade inicial. Aplicando a propriedade (2.4) e calculando a média da velocidade, a equação (2.12) resulta na fórmula:

$$\langle v(t) \rangle = e^{-\lambda t} v_0 \quad (2.13)$$

Esta expressão recupera o resultado de Stokes, simplesmente um decaimento exponencial da velocidade inicial com o tempo característico τ .

Tendo em mãos o resultado da velocidade média, oriundo da resolução da equação (2.7) podemos agora encontrar o valor da velocidade ao quadrado:

$$\mathbf{v}(t)^2 = e^{-2\lambda t} \mathbf{v}_0^2 + 2e^{-\lambda t} \mathbf{v}_0 \int_0^t e^{\lambda(t-t')} \mathbf{A}(t') dt' + \int_0^t e^{\lambda(t-t')} \mathbf{A}(t') dt' \int_0^t e^{\lambda(t-t'')} \mathbf{A}(t'') dt'' \quad (2.14)$$

$$\mathbf{v}(t)^2 = e^{-2\lambda t} \mathbf{v}_0^2 + 2e^{-\lambda t} \mathbf{v}_0 \int_0^t e^{\lambda(t-t')} \mathbf{A}(t') dt' + \int_0^t dt' \int_0^{t'} e^{\lambda(t+t'-2t'')} \mathbf{A}(t'') \mathbf{A}(t') dt'' \quad (2.15)$$

A segunda propriedade da função $A(t)$, dada pela equação (2.5), combinada com uma propriedade bem definida da função delta⁹:

$$\int f(x) \delta(x - y) dx = f(y) \quad (2.16)$$

nos permite encontrar a velocidade quadrática media:

$$\langle \mathbf{v}(t)^2 \rangle = \langle \mathbf{v}(t) \rangle^2 + \frac{\Gamma}{\lambda} (1 - e^{-2\lambda t}) \quad (2.17)$$

Por outro lado, o resultado esperado para tempos muito “longos” (equilíbrio termodinâmico) é de que a partícula obedeça ao princípio da equipartição da energia⁶:

$$\frac{1}{2} m \langle \mathbf{v}(t)^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T \quad (2.18)$$

Esses tempos muito “longos” ($t \gg \tau$) correspondem ao regime assintótico e formalmente é o limite $t \rightarrow \infty$. Combinando as equações (2.17) e (2.18) naquele limite encontramos um resultado muito importante conhecido como o teorema da flutuação-dissipação^{1,10}:

$$\frac{\Gamma}{\lambda} = \frac{3k_B T}{m} \quad (2.19)$$

Esta equação relaciona a dissipação do sistema nela representada pela constante de atrito λ (Stokes) com as flutuações do sistema, dada pela amplitude do ruído Γ (ajustado através das condições de contorno do sistema). T é a temperatura do reservatório térmico, m a massa da partícula Browniana e k_B é a constante de Boltzmann.

Esta relação tem uma importância fundamental no esquema Browniano, através dela podemos calcular o coeficiente de difusão do sistema, e consequentemente seu deslocamento quadrático médio através da temperatura e, como sugerido por Einstein¹, o numero de

Avogadro pode ser calculado medindo o deslocamento quadrático médio da partícula Browniana através do teorema de flutuação dissipação (Einstein encontrou uma relação entre a amplitude do ruído Γ e a constante de atrito λ).

Um formalismo equivalente, onde é calculada a distribuição de probabilidades da partícula Browniana, denominado formalismo de Fokker-Planck é brevemente descrito a seguir. Este formalismo não será utilizado nesta dissertação.

Considerando um gás Browniano carregado composto por N partículas (de massa m e carga q) num reservatório com temperatura homogênea sob a ação de campos externos (não necessariamente uniformes no espaço, nem independentes do tempo). Partindo da equação de Kramers para uma função de distribuição de uma única partícula $P(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$, com posição $\mathbf{x}$, velocidade $\mathbf{v}$ e tempo t em contato com um reservatório não homogêneo de temperatura $T(\mathbf{x})$ e sofrendo a ação de um conjunto de forças: contribuição mecânica $\mathbf{F}_{mec} = -\nabla W$, onde $W = -\mathbf{x}\mathbf{F}_{ext}(t) + U_{mec}$; contribuição elétrica $\mathbf{F}_{el} = q\mathbf{E} = -q\nabla\phi$. A força externa pode ser escrita como:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}_{mec}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{F}_{el}(\mathbf{x}, t) = -\nabla U \quad (2.20)$$

sendo:

$$U = -\mathbf{x}\mathbf{F}_{mec}(t) + U_{mec} + q\phi \quad (2.21)$$

Para uma partícula Browniana carregada, a equação de Kramers (equação de Fokker-Planck no espaço de fase) para a distribuição $P(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ é dada por¹¹:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}} + \frac{1}{m} \mathbf{F}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\tau^{-1} \mathbf{v} P + \Gamma \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} \right) \quad (2.22)$$

onde o tempo de colisão é denotado por τ , a mobilidade μ definida pela relação $m\mu = \tau$ ($\gamma = \mu^{-1}$ é o coeficiente de fricção de Stokes). A mobilidade e o coeficiente de difusão D , estão relacionados com a temperatura através do teorema da flutuação-dissipação $D = \mu k_B T_R$, denominada também a relação de Sutherland-Einstein^{1,10}, sendo T_R a temperatura do reservatório térmico. Note que neste esquema a mobilidade μ (ou τ) pode apresentar uma dependência na posição; e Γ esta relacionado com as flutuações, dado por $D = \tau^2 \Gamma$.

2.2. Os Efeitos do Campo Magnético

O modelo de Langevin para o estudo do transporte de portadores já é bem definido do ponto de vista da aplicação de um campo elétrico. A contribuição deste trabalho se dá no estudo da ação conjunta dos campos elétrico e magnético, este último geralmente não é considerado na literatura, no que diz respeito ao movimento Browniano. Recentemente, os efeitos combinados dos campos elétrico e magnético passaram a ser estudados de forma sistemática na literatura^{12,13,14,15,16,17,18,19,20,21,22,23}.

Para iniciar o estudo da ação dos campos elétrico e magnético sobre a partícula consideraremos inicialmente o modelo de Langevin sujeito a forças de natureza randômica (ruído) $\mathbf{F}_R$, viscosa (Stokes) $\mathbf{F}_S$ além da adição da força de Lorentz (que será a responsável pela inclusão dos campos elétrico e magnético) $\mathbf{F}_L$:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}_R + \mathbf{F}_S + \mathbf{F}_L \quad (2.23)$$

A força randômica e a força de Stokes já foram tratadas na seção 2.1 e são representadas pelas equações (2.2) e (2.3). A força de Lorentz^{11,15} é dada por (em unidades CGS):

$$\mathbf{F}_L = q\mathbf{E} + \frac{q}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (2.24)$$

sendo q a carga do portador, c a velocidade da luz, $\mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$ os campos elétrico e o campo magnético aplicados respectivamente.

Através destas definições podemos escrever a equação de Langevin considerando o campo elétrico e o campo magnético:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}_R(t) - 6\pi\eta a m \mathbf{v} + q\mathbf{E} + \frac{q}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (2.25)$$

Redefinindo algumas grandezas como:

$$q\mathbf{E} = -\frac{1}{m} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{u} \quad (2.26)$$

$$\frac{q\mathbf{B}}{mc} = \boldsymbol{\omega} \quad (2.27)$$

sendo ω a frequência ciclotrônica e utilizando as definições (2.3) e (2.6) podemos reescrever a equação (2.25) como:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{1}{m} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} - (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v} + \lambda \mathbf{v}) + \mathbf{A}(t) \quad (2.28)$$

Uma definição muito útil que passara a ser usada a partir deste ponto é o tensor generalizado de Stokes¹¹ Λ :

$$\Lambda \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v} \quad (2.29)$$

que pode ser escrito também na forma matricial, as duas representações são equivalentes e serão utilizadas alternadamente ora na forma matricial, ora na forma vetorial, conforme facilite a apresentação dos resultados:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda & -\omega_z & \omega_y \\ \omega_z & \lambda & -\omega_x \\ -\omega_y & \omega_x & \lambda \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

O método para resolver a equação de Langevin é o mesmo utilizado na seção 2.1 tomando o devido cuidado de que agora o fator integrante é uma matriz. É importante ressaltar que os coeficientes da matriz independem do tempo. Esta ressalva tem importância fundamental na utilização do método, pois não podemos garantir a validade do mesmo no caso da matriz possuir coeficientes que variam no tempo. Um estudo paralelo a esta dissertação está sendo realizado para generalizar nossos resultados para o caso de um tensor de Stokes dependente do tempo.

Escrevemos então o fator integrante:

$$e^{\Lambda t} \quad (2.31)$$

Esta matriz (fator) pode ser calculada através do teorema de Cayley-Hamilton²⁴. Este teorema mostra que toda matriz satisfaz sua própria equação polinomial característica, sendo assim, é possível escrever uma matriz elevada a uma potência n como uma combinação de matrizes de potências $n-1, n-2, n-3, \dots$

Dada uma matriz $\mathbf{M}$ de ordem n e autovalores μ então sua equação polinomial característica é da forma:

$$f(\mu) = \det(\mathbf{M} - \mu \mathbf{I}) = 0 \quad (2.32)$$

$$f(\mu) = \mu^n + a_1\mu^{n-1} + a_2\mu^{n-2} + a_3\mu^{n-3} + \dots \quad (2.33)$$

Nestas equações I representa a matriz identidade e os a_n representam os coeficientes da equação. Pelo teorema então podemos escrever:

$$\mathbf{M}^n = -a_1\mathbf{M}^{n-1} - a_2\mathbf{M}^{n-2} - a_3\mathbf{M}^{n-3} - \dots \quad (2.35)$$

Utilizaremos o método de Putzer²⁵ para expressar o fator integrante (2.31). O método é baseado no teorema de Cayley-Hamilton²⁴ onde a matriz de n -ésima potência pode ser escrita como uma combinação de matrizes com potências menores. Para isso vamos escrever a função de uma matriz como uma serie de potências:

$$f(\mathbf{M}) = \sum_{i=0}^{n-1} a_i \mathbf{M}^i \quad (2.36)$$

A série é truncada em $n-1$ justamente por $\mathbf{M}$ obedecer o teorema de Cayley-Hamilton, onde n é a ordem da matriz. No nosso caso temos uma matriz tridimensional ($n = 3$), portanto:

$$f(\mathbf{M}t) = a_0 + a_1\mathbf{M}t + a_2\mathbf{M}^2t^2 \quad (2.37)$$

Agora que sabemos o método para resolver o problema, vamos nos voltar a matriz em questão (2.30), cujos autovalores (não degenerados, que facilita as aplicações dos diversos teoremas) são:

$$\mu_1 = \lambda \quad (2.38)$$

$$\mu_2 = \lambda + i|\omega| \quad (2.39)$$

$$\mu_3 = \lambda - i|\omega| \quad (2.40)$$

Pelo teorema esta equação (2.37) possui solução tanto para a matriz como para seus autovalores, logo podemos montar um sistema para determinar a_0 , a_1 , e a_2 (lembrando que a nossa função é uma exponencial):

$$\begin{cases} e^{\lambda t} = a_0 + a_1\lambda t + a_2(\lambda t)^2 \\ e^{(\lambda+i|\omega|)t} = a_0 + a_1(\lambda + i|\omega|)t + a_2((\lambda + i|\omega|)t)^2 \\ e^{(\lambda-i|\omega|)t} = a_0 + a_1(\lambda - i|\omega|)t + a_2((\lambda - i|\omega|)t)^2 \end{cases} \quad (2.41)$$

Utilizando o método de Cramer²⁶ para resolver este sistema finalmente encontramos:

$$a_0 = e^{\lambda t} \left[1 - \frac{\lambda^2}{|\omega|^2} (\cos \omega t - 1) - \frac{\lambda}{|\omega|} \sin \omega t \right] \quad (2.42)$$

$$a_1 = \frac{1}{t} e^{\lambda t} \left[\frac{1}{|\omega|} \sin \omega t - \frac{2\lambda}{|\omega|^2} (1 - \cos \omega t) \right] \quad (2.43)$$

$$a_2 = -\frac{1}{t^2} e^{\lambda t} \frac{1}{|\omega|^2} (\cos \omega t - 1) \quad (2.44)$$

Após termos determinado os coeficientes da expansão podemos escrever a função (2.31) como:

$$e^{\Lambda t} = e^{\lambda t} \left[1 + \frac{1}{|\omega|^2} (\Lambda - \lambda)^2 (1 - \cos \omega t) + \frac{1}{|\omega|} (\Lambda - \lambda) \sin \omega t \right] \quad (2.45)$$

sendo ω é o módulo do vetor $\boldsymbol{\omega}$.

Tendo este resultado em mãos podemos voltar para a equação de Langevin com o campo elétrico e o campo magnético, e aplicar o método de resolução proposto (mantendo a ordem da multiplicação da matriz sempre pela esquerda):

$$e^{\Lambda t} \frac{dv}{dt} + \Lambda e^{\Lambda t} \mathbf{v} = e^{\Lambda t} \mathbf{A}(t) - e^{\Lambda t} \frac{1}{m} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}} \quad (2.46)$$

$$\frac{d}{dt} [e^{\Lambda t} \mathbf{v}] = e^{\Lambda t} \left[\mathbf{A}(t) - \frac{1}{m} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}} \right] \quad (2.47)$$

$$e^{\Lambda t} \mathbf{v}(t) - \mathbf{v}_0 = \int_0^t e^{\Lambda t'} \mathbf{A}(t') dt' + \int_0^t e^{\Lambda t'} \mathbf{u} dt' \quad (2.48)$$

isolando a velocidade na equação acima e resolvendo o ultimo termo da equação podemos facilmente escreve-la na forma:

$$\mathbf{v}(t) = e^{-\Lambda t} \mathbf{v}_0 + \int_0^t e^{\Lambda(t'-t)} \mathbf{A}(t') dt' + \Lambda^{-1} (1 - e^{-\Lambda t}) \mathbf{u} \quad (2.49)$$

Esta expressão representa a velocidade da partícula considerando a força viscosa (Stokes), a força randômica (ruído Markoviano) e a força de Lorentz. Para prosseguir com os estudos definiremos o operador Λ^{-1} (que leva em consideração a ação dos campos elétrico e magnético associados) atuando em um vetor genérico $\mathbf{q}$ e é o inverso do tensor generalizado de Stokes.

$$\Lambda^{-1} = \frac{1}{\Lambda} \quad (2.50)$$

Partindo da equação (2.29), que funciona como um operador atuando no vetor $\mathbf{v}$, é possível reescrevê-lo na forma:

$$\Lambda \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v} = \mathbf{q} \quad (2.51)$$

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\Lambda} \mathbf{q} = \Lambda^{-1} \mathbf{q} \quad (2.52)$$

mas, podemos escrever este mesmo vetor em função de $\mathbf{q}$ e $\boldsymbol{\omega}$ da seguinte maneira:

$$\mathbf{v} = \alpha \mathbf{q} + \beta \mathbf{q} \times \boldsymbol{\omega} + \gamma \boldsymbol{\omega} \quad (2.53)$$

Agora voltando à equação (2.51) e utilizando (2.53):

$$\mathbf{q} = \Lambda \mathbf{v} = \alpha [\lambda \mathbf{q} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{q}] + \beta [\lambda \mathbf{q} \times \boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{q} \times \boldsymbol{\omega}] + \gamma [\lambda \boldsymbol{\omega} + \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{\omega}] \quad (2.54)$$

e utilizando a identidade vetorial²⁷:

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} \times \mathbf{C} = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \quad (2.55)$$

é possível escrever a equação (2.54) na forma:

$$\mathbf{q} = (\alpha\lambda + \beta\omega^2)\mathbf{q} + (\beta\lambda - \alpha)\mathbf{q} \times \boldsymbol{\omega} + (\gamma\lambda - \beta(\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{q}))\boldsymbol{\omega} \quad (2.56)$$

Assim conseguimos identificar os valores de α , β e γ igualando os dois lados da expressão (2.56) termo a termo e resolvendo o sistema que dali resulta:

$$\alpha = \frac{\lambda}{\lambda^2 + \omega^2} \quad (2.57)$$

$$\beta = \frac{1}{\lambda^2 + \omega^2} \quad (2.58)$$

$$\gamma = \frac{1}{\lambda} \frac{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{q}}{\lambda^2 + \omega^2} \quad (2.59)$$

Sabendo também que λ é o inverso do tempo de relaxação (2.6) temos finalmente o operador Λ^{-1} atuando no vetor genérico $\mathbf{q}$:

$$\Lambda^{-1} \mathbf{q} = \frac{1}{1 + \tau^2 \omega^2} [\tau \mathbf{q} + \tau^2 \mathbf{q} \times \boldsymbol{\omega} + \tau^3 (\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\omega}) \boldsymbol{\omega}] \quad (2.60)$$

Este é o primeiro resultado de interesse, agora sabemos que considerar a ação do campo magnético em uma grandeza vetorial, equivale a trocar o escalar λ^{-1} pelo operador Λ^{-1} .

Outro resultado que nos interessa bastante é saber como a função (2.45) atua sobre o vetor genérico $\mathbf{q}$, para isso vamos primeiramente considerar a seguinte representação da equação (2.29):

$$(\Lambda - \lambda) \mathbf{q} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{q} \quad (2.61)$$

A equação (2.45) operando em um vetor genérico $\mathbf{q}$, utilizando-se a propriedade (2.55) e a equação (2.61) pode ser escrita da seguinte maneira:

$$e^{-\Lambda t} \mathbf{q} = e^{-\lambda t} \left[\cos \omega t \mathbf{q} + \frac{1}{|\omega|^2} (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{q}) (1 - \cos \omega t) \boldsymbol{\omega} + \frac{1}{|\omega|} \sin \omega t \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{q} \right] \quad (2.62)$$

Este resultado será muito utilizado para a dedução da velocidade quadrática média, juntamente com a aplicação do operador Λ^{-1} na própria equação (2.62) que resulta em:

$$\begin{aligned} \Lambda^{-1} e^{-\Lambda t} \mathbf{q} = & \frac{e^{-\lambda t}}{1 + \tau^2 |\omega|^2} \left[\tau (\cos \omega t + \tau |\omega| \sin \omega t) \mathbf{q} \right. \\ & + \tau (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{q}) \left(\frac{1}{|\omega|^2} (1 - \cos \omega t) - \frac{\tau}{|\omega|} \sin \omega t + \tau^2 \right) \boldsymbol{\omega} \\ & \left. + \tau \left(\tau \cos \omega t + \frac{1}{|\omega|} \sin \omega t \right) \mathbf{q} \times \boldsymbol{\omega} \right] \end{aligned} \quad (2.63)$$

Tendo em mãos estes resultados podemos definir a velocidade quadrática média $\langle \mathbf{v}(t) \rangle$. Partindo da equação da velocidade (2.49) e considerando as propriedades estatísticas do ruído branco (Markoviano) dadas pelas expressões (2.4) e (2.5), além de tomarmos o devido cuidado de escolhermos as condições da velocidade inicial a partir de um determinado reservatório com uma dada temperatura inicial T_0 , ou seja, consideramos um *ensemble* com condições iniciais distribuídas por uma maxwelliana, também denominadas condições iniciais térmicas, sendo que o desvio quadrático médio pode ser associado a uma temperatura denominada temperatura inicial T_0 . Assim a velocidade inicial tem as seguintes propriedades estatísticas:

$$\langle \mathbf{v}_0 \rangle = 0 \quad (2.64)$$

$$\langle v_{0i} v_{0j} \rangle = \frac{T_0}{m} \delta_{ij} \quad (2.65)$$

Como é de praxe não existe uma direção privilegiada antes da aplicação dos campos e as velocidades iniciais obedecem à distribuição de Maxwell-Boltzmann⁴. Lembrando que para estes cálculos estamos considerando unidades naturais ($k_B = 1$).

A velocidade quadrática média é de nosso interesse, isto implica que após calcular o quadrado da velocidade e fazer a média sobre as condições iniciais e sobre o ruído, os termos que dependem linearmente da velocidade inicial e/ou do ruído branco serão desconsiderados

de antemão do cálculo, pois obedecem as relações (2.4) e (2.64) resultando em uma contribuição nula desses termos.

Após estas ressalvas podemos iniciar o cálculo da velocidade quadrática:

$$\mathbf{v}^2 = (e^{-\Lambda t} \mathbf{v}_0)^2 + [(\Lambda^{-1} - \Lambda^{-1} e^{-\Lambda t}) \mathbf{u}]^2 + \int_0^t \int_0^t e^{\Lambda(t'-t)} \mathbf{A}(t') e^{\Lambda(t''-t)} \mathbf{A}(t'') dt' dt'' \quad (2.66)$$

O primeiro termo da equação acima é exatamente a equação (2.62) aplicada no vetor $\mathbf{v}_0$. Elevando esta equação ao quadrado teremos:

$$(e^{-\Lambda t} \mathbf{v}_0)^2 = e^{-2\lambda t} \mathbf{v}_0^2 \quad (2.67)$$

O segundo termo da equação (2.66) mostra uma combinação entre os quadrados das equações (2.60) e (2.63) além do produto entre elas (sendo $\mathbf{u}$ dado pela equação (2.26)):

$$[(\Lambda^{-1} - \Lambda^{-1} e^{-\Lambda t}) \mathbf{u}]^2 = (\Lambda^{-1} \mathbf{u})^2 + 2(\Lambda^{-1} \mathbf{u})(\Lambda^{-1} e^{-\Lambda t} \mathbf{u}) + (\Lambda^{-1} e^{-\Lambda t} \mathbf{u})^2 \quad (2.68)$$

Definiremos o campo magnético de forma adimensional:

$$\mathbf{b} = \tau \boldsymbol{\omega} \quad (2.69)$$

Tendo esta definição em mente podemos calcular cada um dos termos da equação (2.68) separadamente:

$$(\Lambda^{-1} \mathbf{u})^2 = \tau^2 \mathbf{u}^2 \left(\frac{1+b^2(\cos \theta)^2}{1+b^2} \right) \quad (2.70)$$

$$2(\Lambda^{-1} \mathbf{u})(\Lambda^{-1} e^{-\Lambda t} \mathbf{u}) = \frac{2e^{-\lambda t}}{(1+b^2)^2} \tau^2 \mathbf{u}^2 \left[((1+b^2) \cos \omega t + 2|b| \sin \omega t)(\sin \theta)^2 + (1+b^2)^2 (\cos \theta)^2 \right] \quad (2.71)$$

$$(\Lambda^{-1} e^{-\Lambda t} \mathbf{u})^2 = \frac{e^{-2\lambda t}}{(1+b^2)^2} \tau^2 \mathbf{u}^2 [(1+b^2)(1+b^2(\cos \theta)^2 + 4|b| \cos \omega t \sin \omega t (\sin \theta)^2)] \quad (2.72)$$

sendo θ o ângulo entre os campos elétrico e magnético.

E finalmente o último termo da equação (2.66), e aquele que contribui significativamente no regime assintótico possui a seguinte forma:

$$\int_0^t \int_0^t e^{\Lambda(t'-t)} \mathbf{A}(t') e^{\Lambda(t''-t)} \mathbf{A}(t'') dt' dt'' = \frac{3}{F} [1 - e^{-2\lambda t}] \quad (2.73)$$

Com os resultados (2.67), (2.70), (2.71), (2.72), (2.73) associados às condições (2.4), (2.5), (2.64) e (2.65) finalmente conseguimos montar a expressão que representa a velocidade quadrática média:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v}^2(t) \rangle = & \frac{3T_0}{m} e^{-2\lambda t} + \frac{3T_R}{m} [1 - e^{-2\lambda t}] \\ & + \frac{\tau^2 \mathbf{u}^2}{1 + \mathbf{b}^2} \left[(1 + \mathbf{b}^2 (\cos \theta)^2) \right. \\ & + \frac{2e^{-\lambda t}}{1 + \mathbf{b}^2} [((1 + \mathbf{b}^2) \cos \omega t + 2|b| \sin \omega t) (\sin \theta)^2 + (1 + \mathbf{b}^2)^2 (\cos \theta)^2] \\ & \left. + \frac{e^{-2\lambda t}}{1 + \mathbf{b}^2} [(1 + \mathbf{b}^2)^2 (1 + \mathbf{b}^2 (\cos \theta)^2) + 4|b| \cos \omega t \sin \omega t (\sin \theta)^2] \right] \end{aligned} \quad (2.74)$$

nesta expressão T_R é a temperatura do reservatório, diferente daquele das condições iniciais de velocidade T_0 .

Agora a partir da expressão para a velocidade quadrática média podemos definir uma temperatura efetiva (de não equilíbrio) do sistema através do teorema da equipartição da energia, analogamente a como foi feito na seção 2.1. O conceito de temperatura de não equilíbrio é uma contradição de termos uma vez que a temperatura só é definida no equilíbrio. Essa, nossa definição, é uma grandeza proporcional a energia cinética média cuja constante de proporcionalidade é fixada exigindo que no limite assintótico e na ausência de campos externos esta temperatura generalizada convirja à temperatura (de equilíbrio) do reservatório

$$\frac{3}{2} T_{ef}(t) = \frac{1}{2} m \langle \mathbf{v}^2(t) \rangle \quad (2.75)$$

resultando na expressão final:

$$\begin{aligned} T_{ef} = & T_0 e^{-2\lambda t} + T_R [1 - e^{-2\lambda t}] \\ & + \frac{1}{3} \frac{\tau^2 q^2 E^2}{m} \frac{1}{1 + \mathbf{b}^2} \left[(1 + \mathbf{b}^2 (\cos \theta)^2) + \frac{2e^{-\lambda t}}{1 + \mathbf{b}^2} [((1 + \mathbf{b}^2) \cos \omega t + 2|b| \sin \omega t) (\sin \theta)^2 + \right. \\ & \left. (1 + \mathbf{b}^2)^2 (\cos \theta)^2] + \frac{e^{-2\lambda t}}{1 + \mathbf{b}^2} [(1 + \mathbf{b}^2)^2 (1 + \mathbf{b}^2 (\cos \theta)^2) + 4|b| \cos \omega t \sin \omega t (\sin \theta)^2] \right] \end{aligned} \quad (2.76)$$

E no regime assintótico ($t \rightarrow \infty$) obtemos o resultado estacionário, normalizado à temperatura do reservatório:

$$\Theta = \frac{T_{ef}}{T_R} = 1 + \frac{\tau^2 q^2 E^2}{3mT_R} \left[\frac{1+b^2(\cos \theta)^2}{1+b^2} \right] \quad (2.77)$$

É possível perceber nessas expressões que a temperatura efetiva de cada partícula Browniana é sempre maior que a temperatura do reservatório T_R , por este motivo estes portadores Brownianos são denominados portadores quentes (*hot carriers*).

Aproveitamos o contexto para comentar o formalismo de Fokker Planck Kramers. Considerando a ação dos campos elétrico e magnético combinados podemos escrever a equação de Kramers (2.22) como¹¹:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}} + \frac{1}{m} \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\tau^{-1} \mathbf{v} P + \Gamma \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} \right) \quad (2.78)$$

sendo:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}, t) + \frac{q}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (2.79)$$

onde temos separado a força num termo que não depende da velocidade que pode ser derivado de um potencial escalar e outro termo que depende da velocidade. Substituindo esta partição da força na equação de Kramers acima obtemos¹¹**Erro! Indicador não definido.:**

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{x}} + \frac{1}{m} \mathbf{F}(\mathbf{x}, t) \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left(\Lambda \mathbf{v} P + \Gamma \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} \right) \quad (2.80)$$

Este resultado mostra a relação íntima entre o formalismo de Fokker Planck Kramers e o formalismo de Langevin.

3. Transporte de Portadores Elétricos

O mecanismo de transporte de elétrons ou outros portadores de carga, em alguns materiais mediante aplicação de um campo elétrico, pode ser modelado no esquema Browniano. Neste caso os portadores se comportam como uma partícula Browniana (carregada), que sujeitas à ação do campo elétrico adquirem uma aceleração constante modulada pelo valor do campo aplicado. O próprio meio, composto por elétrons e os átomos ou íons do material através de diversos mecanismos de colisão, funciona como um meio dissipador freando e/ou impulsionando o portador.

3.1. A Equação de Transporte

O modelo do movimento Browniano para o transporte de elétrons é análogo a aquele da partícula imersa em um fluido, a diferença se dá na aplicação do campo elétrico $\mathbf{E}$ que dá uma direção preferencial ao movimento. O portador, ou elétron, está sujeito a colisões com as outras partículas do meio. A parte sistemática desta interação pode ser modelada de forma análoga à força de Stokes, representada por uma constante de tempo dissipativa $\tau = \lambda^{-1}$ conhecido como tempo característico das colisões portador-fluido. O restante destas interações, a parte não sistemática, é modelada como uma força randômica caracterizada pela amplitude do ruído Γ . O portador de carga q e massa m também sofre a influência dos campos externos, neste caso o campo elétrico, resultando na força $q\mathbf{E}$. Assim a equação para a velocidade do portador pode ser escrita como:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\lambda\mathbf{v} + \frac{q\mathbf{E}}{m} + \mathbf{A}(t) \quad (3.1)$$

No regime assintótico ($t \rightarrow \infty$), os efeitos inerciais são desprezíveis, ou seja, a aceleração média é nula. Calculando a média da equação anterior neste regime e utilizando a propriedade (2.4), definimos a velocidade terminal média ou velocidade de arraste (*drift*) $\mathbf{v}_d$ como:

$$\mathbf{v}_d = \frac{q\tau}{m}\mathbf{E} = \mu\mathbf{E} \quad (3.2)$$

sendo a mobilidade elétrica definida pela expressão:

$$\mu = \frac{q\tau}{m} \quad (3.3)$$

A mobilidade é sempre definida como positiva, ou seja, para portadores negativos a carga q representa o módulo da mesma e um sinal negativo deve ser adicionado à equação (3.2).

Pela lei de Ohm, que relaciona a densidade de corrente elétrica $\mathbf{J}$ com o campo elétrico $\mathbf{E}$ (relação linear), tendo como coeficiente a condutividade σ que pode ser escrita em função da mobilidade μ , levando em conta a definição (3.3), através da relação:

$$\sigma = \frac{q^2 n \tau}{m} = q n \mu \quad (3.4)$$

desta forma a densidade de corrente elétrica fica definido como:

$$\mathbf{J} = n\mu\mathbf{E} \quad (3.5)$$

Uma grandeza de suma importância presente na equação (3.5) é a densidade de portadores n , que pode depender da temperatura. Os compostos metálicos se caracterizam entre outras coisas por ter a densidade de portadores independente da temperatura. Nos compostos não metálicos, em particular os semicondutores, a densidade de portadores $n(T)$ aumenta com a temperatura. Nestes materiais outra grandeza que depende da temperatura é o tempo de colisões $\tau(T)$ ²⁸.

A densidade de corrente elétrica $\mathbf{J}$ no caso Browniano tem duas contribuições principais: a densidade de corrente difusiva que resulta simplesmente dos gradientes das densidades de portadores modeladas no esquema Browniano através da força randômica e a corrente ôhmica, ou advecção, proporcional a densidade de portadores e ao campo elétrico:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = \mu n(\mathbf{x}, t)\mathbf{E} - D \frac{\partial n(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} \quad (3.6)$$

Neste caso a equação de Kramers é reduzida a equação de Smoluchowski^{11,15,29}, no regime assintótico:

$$\frac{\partial n(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\frac{q\tau E}{m} n(\mathbf{x}, t) + D \frac{\partial n(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} \right) \quad (3.7)$$

com o coeficiente de difusão D dado pela relação de Einstein (teorema da flutuação-dissipação^{1,10,11}):

$$D = \frac{k_B T}{m} \tau \quad (3.8)$$

A equação (3.7) na verdade é uma equação de continuidade para a densidade de corrente e pode ser escrita como:

$$\frac{\partial n(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{J}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} = 0 \quad (3.9)$$

3.2. As Equações de Shockley

Em materiais semicondutores a densidade de portadores depende da temperatura. Os portadores ou elétrons móveis pertencem à banda de condução, eles são excitados térmica ou ópticamente a partir da banda de valência. A diferença de energia entre a banda de condução e a banda de valência é chamada gap denotado por Δ . Existem também portadores positivos denominados buracos (*holes*)²⁸, que apresentam uma massa efetiva e tempo de colisão diferenciados. Nós assumimos um tempo de colisão associado a cada tipo de portador.

Quando o elétron passa da banda de condução para a banda de valência ele pode criar (recombinar) um par elétron-buraco. Este mecanismo deve ser acrescentado às equações de transporte. Os portadores gerados e recombinados tem uma vida média τ_e (elétrons) e τ_h (buracos). Desta forma as equações de transporte para os dois tipos de portadores são:

$$\frac{\partial n_e(x,t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_e \mathbf{E} n_e(x,t) + D_e \frac{\partial n_e(x,t)}{\partial x} \right) = -\frac{1}{\tau_e} (n_e(x,t) - n_e^{eq}) \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial n_h(x,t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(-\mu_h \mathbf{E} n_h(x,t) + D_h \frac{\partial n_h(x,t)}{\partial x} \right) = -\frac{1}{\tau_h} (n_h(x,t) - n_h^{eq}) \quad (3.11)$$

as equações (3.10) e (3.11) representam as equações de transporte para elétrons e buracos respectivamente sendo $n_e(x,t)$ e $n_h(x,t)$ as respectivas densidades de portadores, D_e e D_h os coeficientes de difusão, μ_e e μ_h as mobilidades que dependem dos tempos de colisões τ_e e τ_h e das massas efetivas m_e e m_h :

$$\mu_e = \frac{q\tau_e}{m_e} \quad (3.12)$$

$$\mu_h = \frac{q\tau_h}{m_h} \quad (3.13)$$

As densidades identificadas com o índice superior *eq* correspondem às densidades dos portadores em equilíbrio nos processos de geração e recombinação²⁸.

A partir das equações (3.10) e (3.11) podemos escrever as densidades de correntes para os elétrons e buracos respectivamente como:

$$\mathbf{J}_e = \mu_e \mathbf{E} n_e(x,t) + D_e \frac{\partial n_e(x,t)}{\partial x} \quad (3.14)$$

$$\mathbf{J}_h = -\mu_h \mathbf{E} n_h(x,t) + D_h \frac{\partial n_h(x,t)}{\partial x} \quad (3.15)$$

resultando nas equações de Shockley para elétrons e buracos:

$$\frac{\partial n_e(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_e} (n_e(\mathbf{x}, t) - n_e^{eq}) - \nabla \mathbf{J}_e \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial n_h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_h} (n_h(\mathbf{x}, t) - n_h^{eq}) - \nabla \mathbf{J}_h \quad (3.17)$$

3.3. As Equações de Shockley com o Campo Magnético

As equações de Shockley, apresentadas na seção anterior, não levam em consideração uma possível influência do campo magnético no transporte dos portadores. Agora apresentaremos uma generalização destas equações considerando tal efeito.

Como já vimos anteriormente e também no contexto de Kramers (2.22), a inclusão do campo magnético é feita “girando” o coeficiente de Stokes, substituindo o escalar λ pelo tensor $\mathcal{A}$, ou seja, aplicando $\mathcal{A}^{-1}$ nas expressões das densidades de correntes. Para facilitar a visualização, vamos reescrever as equações (3.14) e (3.15), de uma forma geral:

$$\mathbf{J}_e = \mu_e (k_B T \nabla n_e + n_e \mathbf{E}) \quad (3.18)$$

$$\mathbf{J}_h = \mu_h (k_B T \nabla n_h - n_h \mathbf{E}) \quad (3.19)$$

sendo os coeficientes de difusão (teorema de flutuação dissipação^{1,10}):

$$D_i = \mu_i k_B T \quad (3.20)$$

A dependência espacial e temporal das densidades de portadores é implícita e o índice i varre elétrons (e) e buracos (h).

De uma forma mais simplificada podemos representar as equações (3.18) e (3.19) por:

$$\mathbf{J}_i = \mu_i \mathbf{G}_i \quad (3.21)$$

onde $\mathbf{G}$ é dado por:

$$\mathbf{G}_i = k_B T \nabla n_i \pm n_i \mathbf{E} \quad (3.22)$$

A aplicação do campo magnético é introduzida pela aplicação do tensor Λ^{-1} em $\mathbf{G}^{11,15}$ (a mobilidade é inversamente proporcional ao coeficiente de atrito λ):

$$\mu_i = \frac{q\tau_i}{m_i} = \frac{q}{m_i\lambda_i} \quad (3.23)$$

$$\mathbf{J}_i = \frac{q}{m_i} \Lambda_i^{-1} \mathbf{G}_i \quad (3.24)$$

Sendo o tensor inverso de Stokes dado por (para vetor arbitrário $\mathbf{q}$):

$$\Lambda_i^{-1} \mathbf{q} = \frac{1}{1+\tau_i^2\omega_i^2} [\tau_i \mathbf{q} + \tau_i^2 \mathbf{q} \times \omega_i + \tau_i^3 (\mathbf{q} \cdot \omega_i) \omega_i] \quad (3.25)$$

e com:

$$\omega_i = \pm \frac{qB}{m_i c} \quad (3.26)$$

com o sinal negativo para portadores do tipo elétrons.

Para sistemas que apresentam além do gradiente de concentração também um gradiente de temperatura (forma mais geral possível) a equação fica (considerando $k_B=1$):

$$\mathbf{J}_i = \frac{q}{m_i} \Lambda_i^{-1} [\nabla(Tn_i) \pm n_i \mathbf{E}] \quad (3.27)$$

com o sinal positivo para os portadores do tipo elétrons.

Agora podemos escrever as equações para as correntes considerando a ação do campo magnético (e também para o caso não isotérmico, a temperatura do reservatório sendo não homogênea):

$$\mathbf{J}_e = \frac{q}{m_e} \Lambda_e^{-1} [n_e \nabla T + T \nabla n_e + n_e \mathbf{E}] \quad (3.28)$$

$$\mathbf{J}_h = \frac{q}{m_h} \Lambda_h^{-1} [n_h \nabla T + T \nabla n_h - n_h \mathbf{E}] \quad (3.29)$$

E desta forma podemos finalmente escrever as equações de transporte para os semicondutores considerando a ação dos campos elétrico e magnético combinados:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_e} (n_e - n_e^{eq}) - \frac{q}{m_e} \nabla [n_e \Lambda_e^{-1} \nabla T + T \Lambda_e^{-1} \nabla n_e + n_e \Lambda_e^{-1} \mathbf{E}] \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial n_h}{\partial t} = -\frac{1}{\tau_h} (n_h - n_h^{eq}) - \frac{q}{m_h} \nabla [n_h \Lambda_h^{-1} \nabla T + T \Lambda_h^{-1} \nabla n_h - n_h \Lambda_h^{-1} \mathbf{E}] \quad (3.31)$$

4. Semicondutores e o Efeito Gunn

Em certos materiais semicondutores, submetidos à ação de um campo elétrico, a curva da velocidade de arraste (drift) pelo campo elétrico apresenta um crescimento anômalo, uma vez que para uma região de campo elétrico crescente, a curva decresce (efeito não ôhmico). Este decrescimento é chamado de condutividade diferencial negativa e será o objeto de estudo deste capítulo.

4.1. O Efeito Gunn

O efeito Gunn foi descoberto no ano de 1963 por J. B. Gunn enquanto media a corrente de elétrons quentes (proporcional à velocidade de arraste) em função do campo elétrico aplicado em semicondutores do tipo III-V, em especial o GaAs (Arseneto de Gálio). Aumentando o valor do campo elétrico a partir do zero a corrente aumentava de uma forma essencialmente linear até um dado valor de campo E_0 . Após este valor a corrente começava a oscilar (num gráfico da corrente versus tempo). Estas oscilações são coerentes desde que a amostra seja suficientemente fina. O campo necessário para que as oscilações comecem a aparecer é chamado de *threshold Field* e é da ordem de 3keV/cm, para amostras finas e geram oscilações com frequências da ordem de 5GHz.

A Figura 1 mostra o gráfico qualitativo da velocidade de arraste em função do campo elétrico. Um fato interessante a ser notado é o comportamento da curva na região onde aumentando o campo elétrico ocorre uma diminuição da corrente (região entre E_c e E_b), esta região é chamada de condutância diferencial negativa ou *negative differential conductance* (NDC).

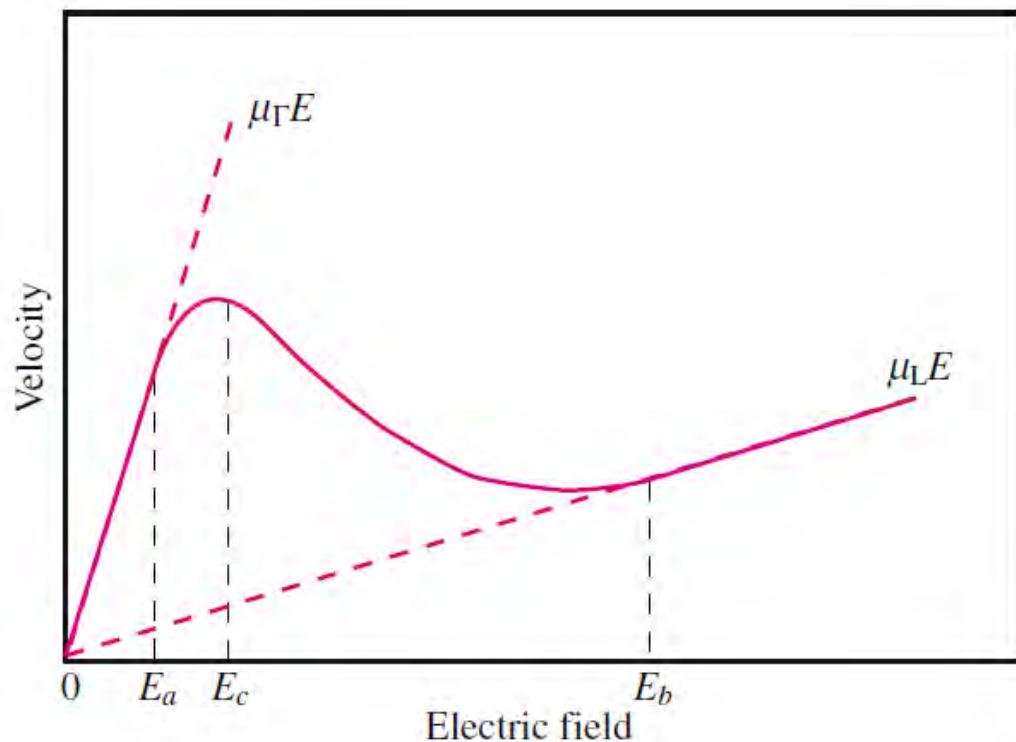


Figura 1 - Efeito Gunn (referência ³⁰)

O mecanismo físico responsável pela NDC está ligado ao sistema de bandas no material semiconductor. No caso do GaAs a estrutura de bandas dos elétrons inclui um vale central e seis vales secundários, separados por um *gap* de $\Delta=0,36\text{eV}$ como pode ser visto na Figura 2:

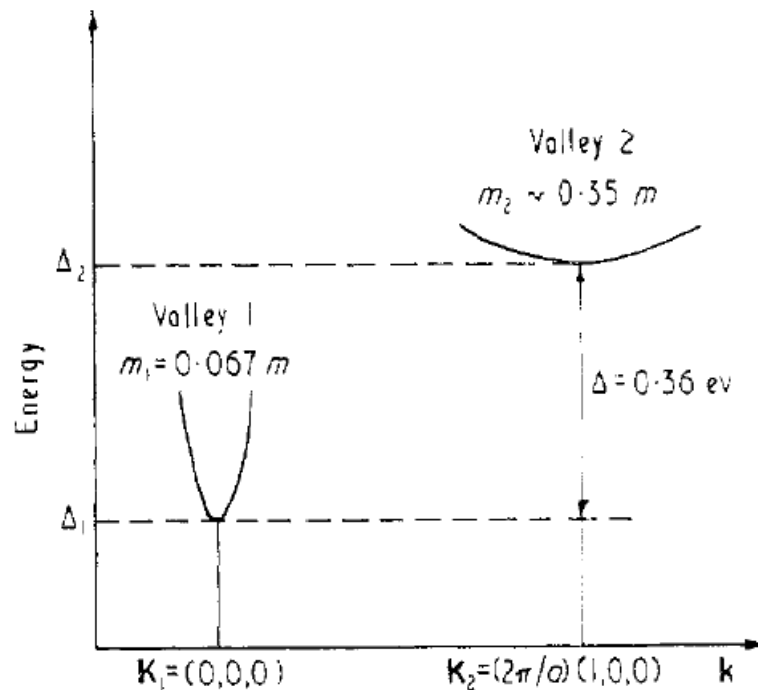


Figura 2 – Sistema de bandas para o GaAs (referencia ³¹)

Os vales possuem diferentes massas e mobilidades, neste caso a massa do vale secundário é maior ao modo que sua mobilidade é menor, isto significa que os elétrons no vale secundário tem uma velocidade de arraste muito menor que no vale central.

A amostra em equilíbrio térmico possui a maioria dos elétrons no vale central e a taxa de densidade de elétrons entre as bandas é dada pelo fator de Boltzmann. Sendo a banda central energeticamente mais favorável, a corrente, a campos elétricos muito pequenos, é essencialmente constituída pelos elétrons da banda central, de alta mobilidade; um comportamento ôhmico. Assim que o campo elétrico é aumentado, a taxa de população das bandas de maior energia aumenta (a banda superior passa a ser mais povoada à medida que a banda inferior se esvazia de acordo com o fator de Boltzmann). Nesta nova situação a corrente tem uma contribuição maior dos elétrons da banda superior, de menor mobilidade. Assim, à medida que o campo elétrico aumenta a velocidade de arraste diminui a partir de um

dado valor de campo elétrico crítico, como pode ser observado na figura 1 (modelo qualitativo). Já na figura 3 mostramos um resultado experimental.

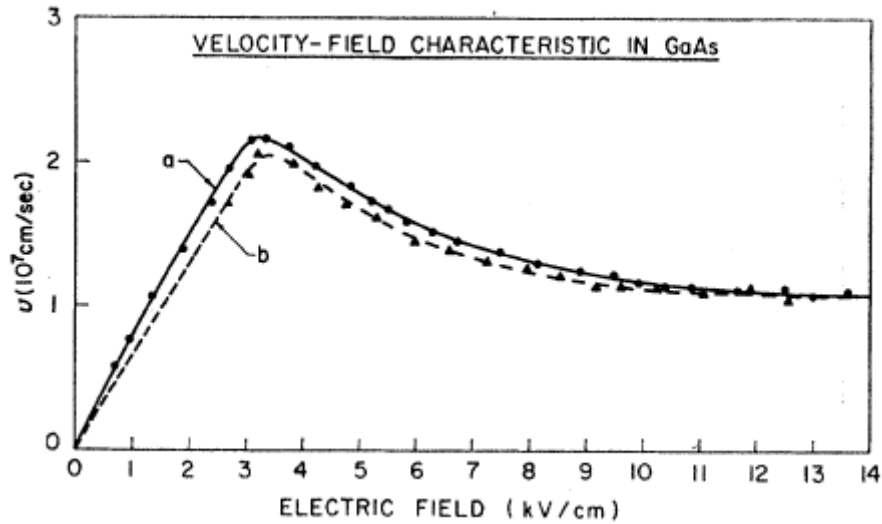


Figura 3 – Curva Experimental (referência ³²)

4.2. A Mobilidade em Semicondutores

Em um modelo simples para a mobilidade μ em certos materiais semicondutores^{30,33}, para uma temperatura próxima a ambiente, é proporcional ao inverso da raiz quadrada da massa e da temperatura:

$$\mu \sim m^{-\frac{1}{2}} T^{-\frac{1}{2}} \quad (4.1)$$

No caso dos semicondutores com estrutura multi bandas para os portadores, a mobilidade é a média térmica das mobilidades associadas a cada banda, e para o caso de duas bandas (nomeadas 1, de alta mobilidade, e 2, de baixa mobilidade, respectivamente) temos a seguinte expressão:

$$\bar{\mu} = \frac{\mu_1 n_1 + \mu_2 n_2}{n_1 + n_2} \quad (4.2)$$

Os valores de n_1 e n_2 (densidade de elétrons) estão relacionados com a energia de cada banda ε dada pelo fator de Boltzmann juntamente com a degenerescência (densidade de estados) $D(\varepsilon)$, que é proporcional à potência 3/2 da massa efetiva associada a cada banda:

$$n(\varepsilon_i) \sim D(\varepsilon_i) e^{-\beta \varepsilon_i} \quad (4.3)$$

com $i=1,2$.

Definindo β da forma padrão (em unidades naturais $k_B=1$):

$$\beta = \frac{1}{T} \quad (4.4)$$

A mobilidade de cada banda então é dada neste modelo simples com um valor dado μ_0 :

$$\mu_i = \mu_0 m_i^{-\frac{1}{2}} T^{-\frac{1}{2}} \quad (4.5)$$

A mobilidade efetiva (resultante da contribuição das duas mobilidades) em função do gap Δ é dada por:

$$\bar{\mu} = \frac{\mu_0}{\sqrt{T}} \left(\frac{1 + 6 \left(\frac{m_2}{m_1} \right) e^{-\beta \Delta}}{1 + 6 \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta \Delta}} \right) \quad (4.6)$$

Nesta expressão o fator 6 está relacionado com a degenerescência da banda 2 (seis vales secundários) no caso do GaAs e a massa da primeira banda esta incorporada a um novo μ_0 .

4.3. A Ação do Campo Magnético

Nesta seção será explorado o aspecto mais relevante desta dissertação: como o campo magnético modifica a resposta do sistema, abordando todos os conceitos vistos anteriormente.

Partindo das equações (3.2) e (3.3) podemos escrever a velocidade de arraste em função do campo elétrico, uma relação linear, sendo a constante de proporcionalidade a mobilidade que por sua vez é proporcional ao tempo de colisões (assumimos um tempo de colisões único para ambas as bandas). Este tempo de colisões é inversamente proporcional à constante de atrito λ , logo a velocidade de arraste é dada por:

$$\mathbf{v}_d \sim \frac{1}{\lambda\sqrt{T}} \left(\frac{1+6\left(\frac{m_2}{m_1}\right)e^{-\beta\Delta}}{1+6\left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\beta\Delta}} \right) \mathbf{E} \quad (4.7)$$

Os efeitos do campo magnético são incorporados substituindo λ^{-1} por Λ^{-1} como já foi visto anteriormente. Combinamos o resultado (2.60) com a projeção da velocidade de arraste na direção do campo elétrico que definimos como v_E :

$$v_E = \frac{\mathbf{v}_d \cdot \mathbf{E}}{|\mathbf{E}|} \quad (4.8)$$

e também introduzimos a temperatura efetiva dos portadores Θ (normalizada à temperatura do reservatório T_R) equação (2.77) resultando na expressão:

$$v_E \sim \frac{1}{\sqrt{\Theta}} \left(\frac{1+6\left(\frac{m_2}{m_1}\right)e^{-\frac{\Delta}{T_R\Theta}}}{1+6\left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{\Delta}{T_R\Theta}}} \right) \frac{(\Lambda^{-1}\mathbf{E}) \cdot \mathbf{E}}{|\mathbf{E}|} \quad (4.9)$$

Onde:

$$\Theta = 1 + \frac{\tau^2 q^2 \mathbf{E}^2}{3mT_R} \left[\frac{1+b^2(\cos\theta)^2}{1+b^2} \right] \quad (4.10)$$

Nesta ultima expressão b é o campo magnético na forma adimensional, θ é o ângulo formado pelos campos elétrico e magnético, m é uma massa efetiva média. Da equação [83] observa-se o seguinte: a temperatura dos portadores é sempre maior que a temperatura do reservatório; o efeito do campo magnético é nulo quando o campo elétrico é nulo. Para campo elétrico não nulo os portadores são “esquentados” quadraticamente sendo o efeito máximo para campo magnético nulo ou paralelo, ou seja, o campo magnético “resfria” em geral os

portadores. Estes resultados coincidem com os resultados obtidos nas referencias^{11,15} no formalismo de Kramers e quando são desconsiderados efeitos dos gradientes da densidade de portadores. Estes resultados coincidem também com os obtidos por Shockley na ausência de campo magnético³⁴.

Definimos um campo elétrico adimensional dado pela expressão:

$$e^2 = \frac{\tau^2 q^2 E^2}{3mT_R} \quad (4.11)$$

Utilizando valores típicos da literatura^{30,33}, o campo elétrico adimensional com valor unitário corresponde a um campo elétrico ≈ 1 KVolt/cm. De forma análoga o valor unitário do campo magnético adimensional corresponde a um campo magnético ≈ 1 Tesla. Também na literatura^{30,33} encontramos valores para a razão das massas $m_2/m_1 \approx 10$ e para o gap à temperatura ambiente $T_R \Delta \approx 12$.

A expressão adimensional final é dada por:

$$v_E = \frac{\gamma}{\sqrt{\Theta}} \left(\frac{1+60e^{-\frac{12}{\Theta}}}{1+130e^{-\frac{12}{\Theta}}} \right) e \quad (4.12)$$

onde:

$$\gamma = \frac{1+b^2(\cos \theta)^2}{1+b^2} \quad (4.13)$$

e a temperatura efetiva normalizada adimensional é dada por:

$$\Theta = 1 + 0.04\gamma e^2 \quad (4.14)$$

Podemos agora fazer um gráfico da velocidade de arraste em função do campo elétrico:

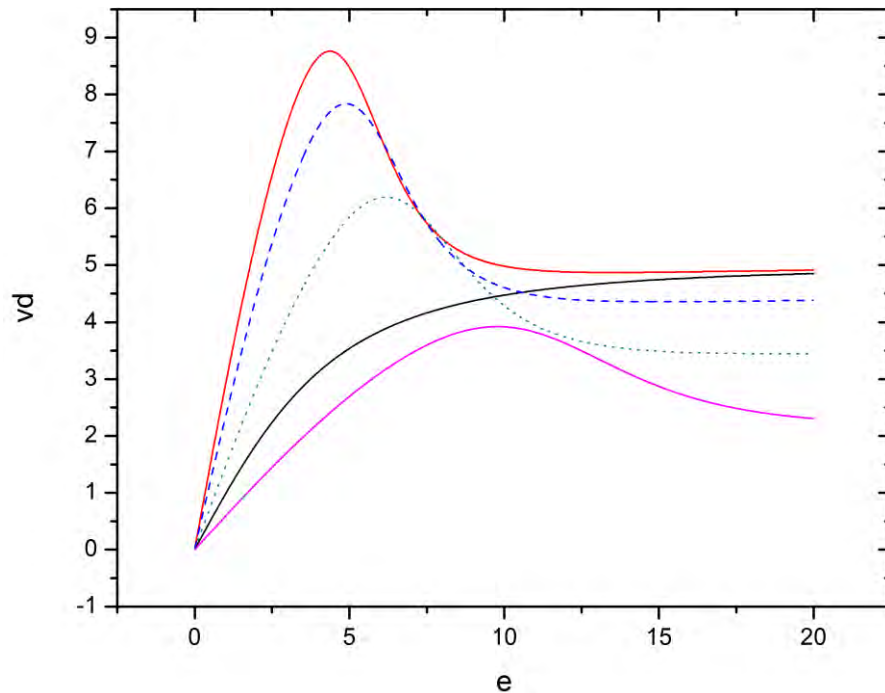


Figura 4 – Velocidade de Arraste vs. Campo Elétrico

Na Figura 4 estão representadas as curvas da velocidade de arraste (em unidades arbitrárias) em função do campo elétrico aplicado. A curva de referência (preta) representa o caso de uma banda, ou seja, $\Delta=0$ e sem a presença do campo magnético. Nela vemos que a velocidade de arraste inicialmente aumenta linearmente com o campo elétrico (comportamento ohmico) saturando-se à campos maiores atingindo um valor terminal. Em todas as outras curvas vemos a velocidade aumentando conforme o campo elétrico aumenta até um valor crítico deste campo, a partir dele, conforme é aumentado a velocidade diminui até atingir a saturação. Esta é a assinatura do efeito Gunn. A curva vermelha representa um campo magnético nulo (que é equivalente ao caso em que os campos elétrico e magnético estão na mesma direção), neste caso o campo elétrico crítico (*threshold Field*) é da ordem de 4KVolt/cm (da mesma ordem de grandeza do valor experimental, ver Figura 3). As linhas azul, verde e rosa representam respectivamente campos magnéticos da ordem de 0,5, 1 e 2 Teslas (todos perpendiculares ao campo elétrico). Esses resultados teóricos apresentam uma concordância qualitativa com resultados experimentais³⁵. Esta referência foi a única que achamos que mediu os efeitos do campo magnético na condutância diferencial negativa em um semiconductor similar ao estudado por nós (GaAs), nesse caso foi numa amostra de GaAs dopada com pequenas concentrações de N, portanto a comparação tem de ser feita considerando que não é exatamente o mesmo composto.

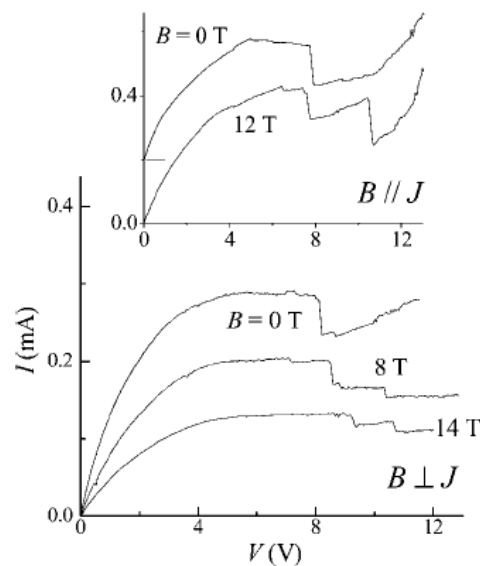


Figura 5 – Resultados Experimentais com GaAs dopado para diversos campos magnéticos (referência³⁵)

Segundo nosso modelo (Figura 4) a corrente se satura para valores de campos elétricos muito altos, no caso experimental (Figura 5) isso não acontece em geral. Uma simples explicação, além da ressalva anterior, pode ser a seguinte: para esses altos campos elétricos a temperatura dos portadores é muito alta e outros mecanismos de colisões devem ser adicionados, além daquele considerado originalmente por nós, que modela simplesmente a mobilidade como proporcional ao inverso da raiz quadrada da temperatura.

Também segundo nosso modelo o efeito do campo magnético paralelo ao campo elétrico não é diferente do caso de campo magnético nulo. Nos resultados experimentais existe um pequeno deslocamento no eixo vertical (ver Figura 5) nas correntes para campo magnético nulo e campo magnético paralelo ao campo elétrico, comportamento para o qual não encontramos uma explicação. Porém para campos magnéticos perpendiculares nossos resultados estão em muito boa concordância com os dados experimentais uma vez que aumentando o campo magnético, o valor crítico de campo elétrico aumenta e a velocidade de arraste crítica diminui.

Nosso modelo é muito simples: a velocidade de arraste é linear no campo elétrico, porém o fator de proporcionalidade (mobilidade) depende da temperatura, dado pela fórmula $v_E = \mu(T) * E$. Para temperatura constante o resultado é o clássico comportamento ôhmico. Na literatura^{30,35, 36} o efeito de saturação é incorporado fenomenologicamente, na forma

$v_E = \mu(T) * E * (1 + a^2 E^2)^{-1/2}$ sendo a um parâmetro ajustável. Nosso modelo persiste em considerar a resposta ôhmica no sentido de que a velocidade de arraste é proporcional ao campo elétrico, e a temperatura como função dos campos incorpora em $v_E = \mu(T(E, B)) * E$ os efeitos não ôhmicos e o comportamento anômalo denominado condutância diferencial negativa.

Nosso modelo coincide com o modelo de Shockley^{34,36} para o caso de banda única e campo magnético nulo. Portanto nossa contribuição, inédita, é uma generalização daquele resultado para o caso de duas bandas e a incorporação do campo magnético no estudo da condutância diferencial negativa, cujo efeito é notório (ver Figura 4 e Figura 5).

4.4. O Transiente da Temperatura

Nesta seção, estudamos a temperatura efetiva dada pela equação (2.76) na sua forma mais geral como função do tempo e até atingir seu valor assintótico. Embora a temperatura fora de equilíbrio seja uma contradição de termos (a temperatura só esta bem definida em equilíbrio⁴), uma grandeza que converge à temperatura no equilíbrio que pode ser considerada uma generalização coerente é a média da energia cinética do portador em função do tempo^{11,15}. Consideramos também condições iniciais “térmicas”, ou seja, velocidades iniciais que se distribuem por uma maxwelliana com desvio quadrático associado a uma temperatura denominada temperatura inicial T_0 .

Apresentamos os gráficos da temperatura efetiva em função do tempo para diversas condições iniciais de diversas configurações de campos. A temperatura do reservatório T_R foi fixada em 400°K, e em cada caso consideramos duas condições iniciais de temperatura T_0 , uma “fria” (200°K) e outra “quente” (600°K). Nas figuras 6-10 os campos elétrico e magnético estão na mesma direção, nas figuras 11-15 os campos estão em um ângulo de 45° e nas figuras 16-20 eles são perpendiculares. Em todos os gráficos aparece também o caso de campo magnético igual nulo para as duas condições iniciais, tanto a “fria” como a “quente”, de temperatura como uma curva referencial.

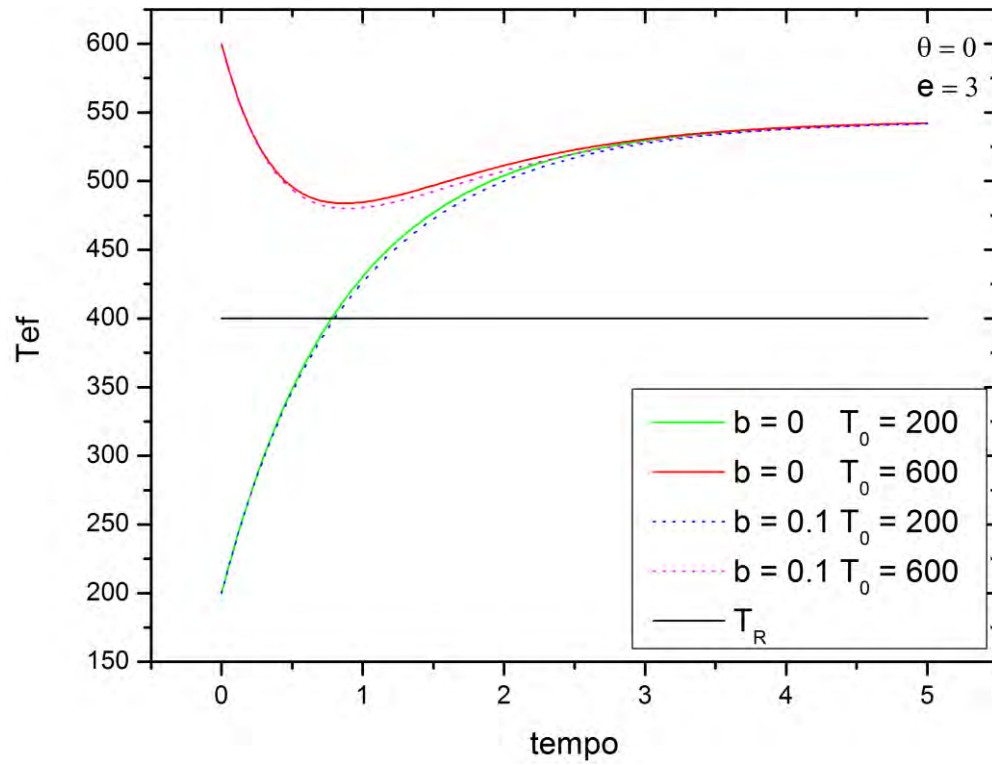


Figura 6 – Transiente de Temperatura $\theta=0$ e $b=0.1$

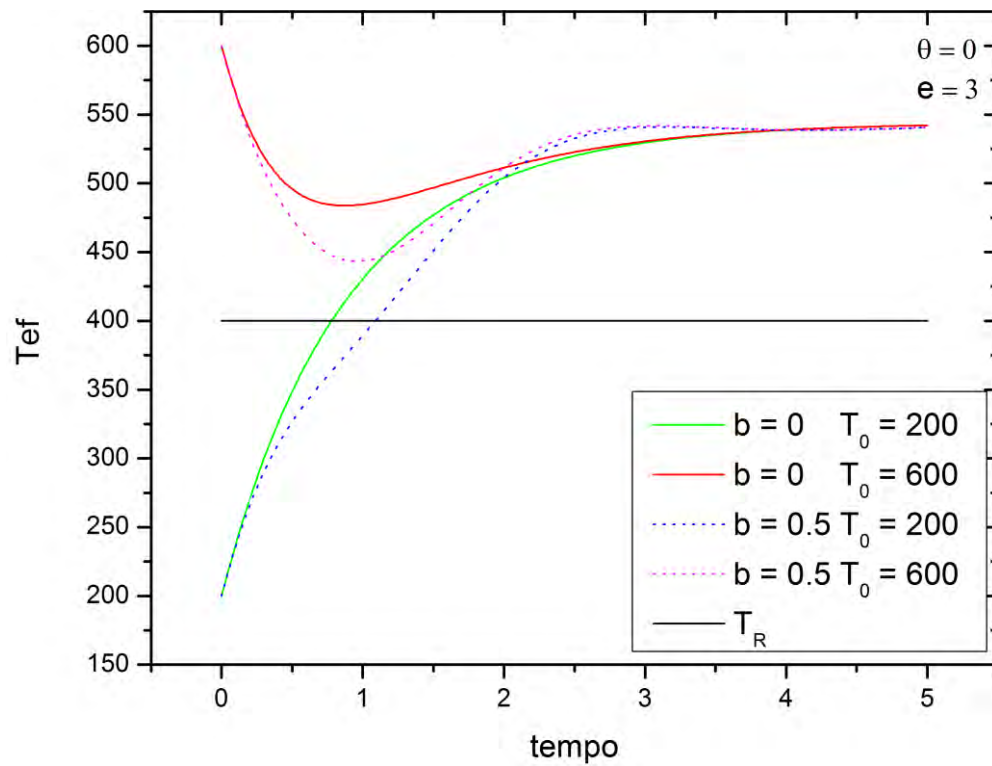


Figura 7 – Transiente de Temperatura $\theta=0$ e $b=0.5$

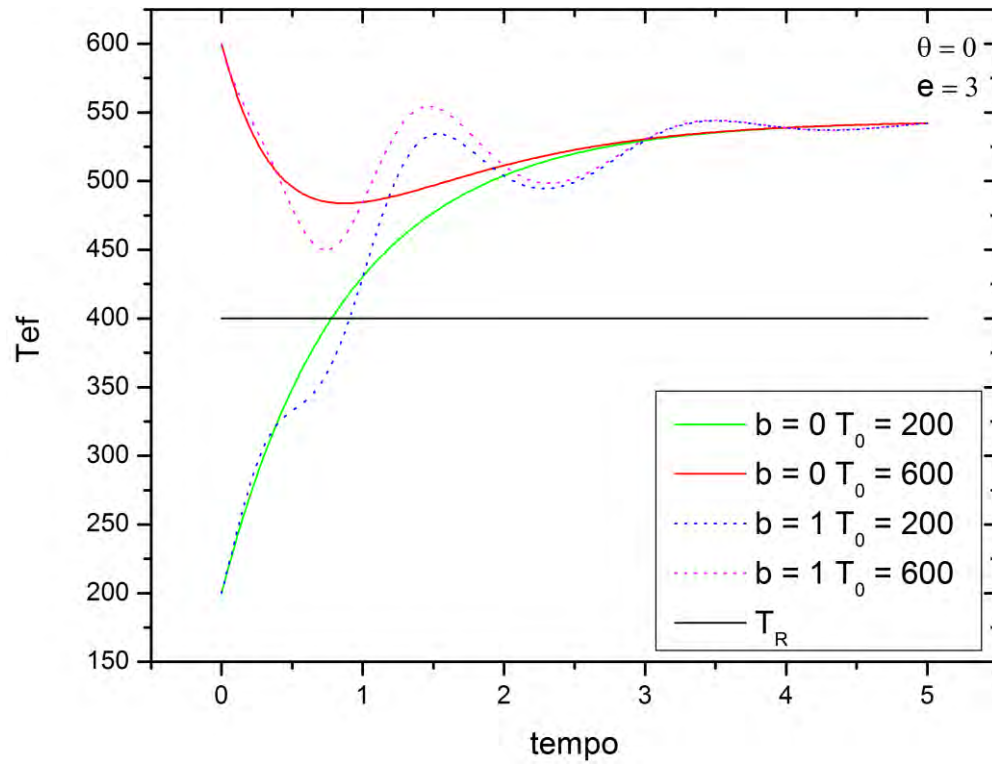


Figura 8 – Transiente de Temperatura $\theta=0$ e $b=1$

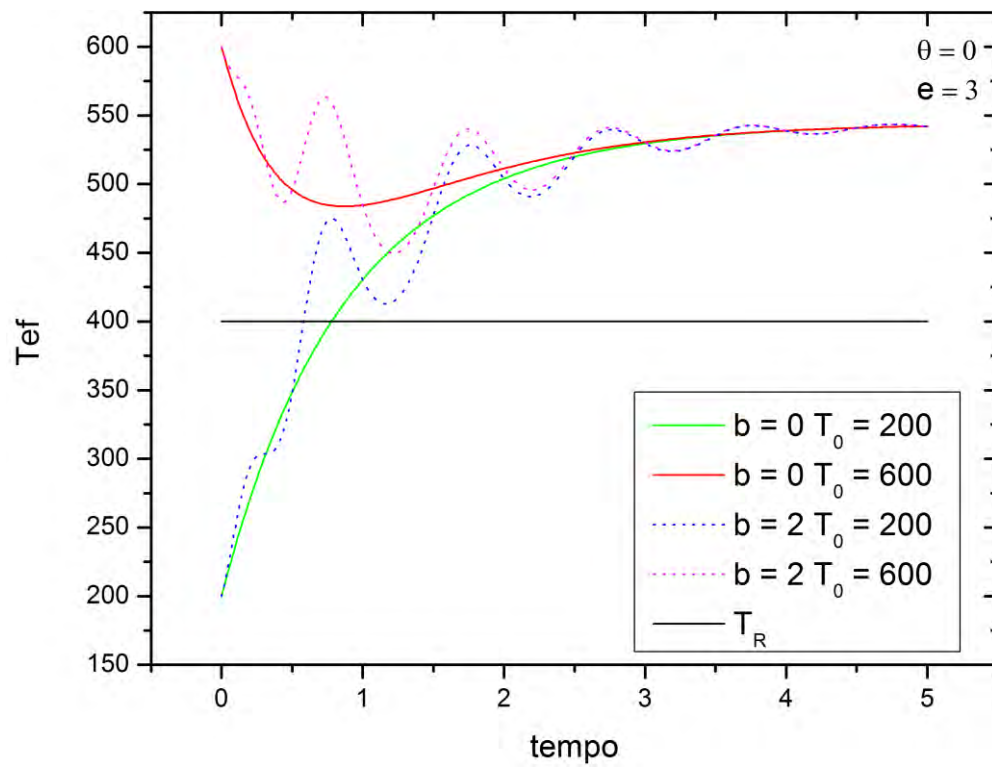


Figura 9 – Transiente de Temperatura $\theta=0$ e $b=2$

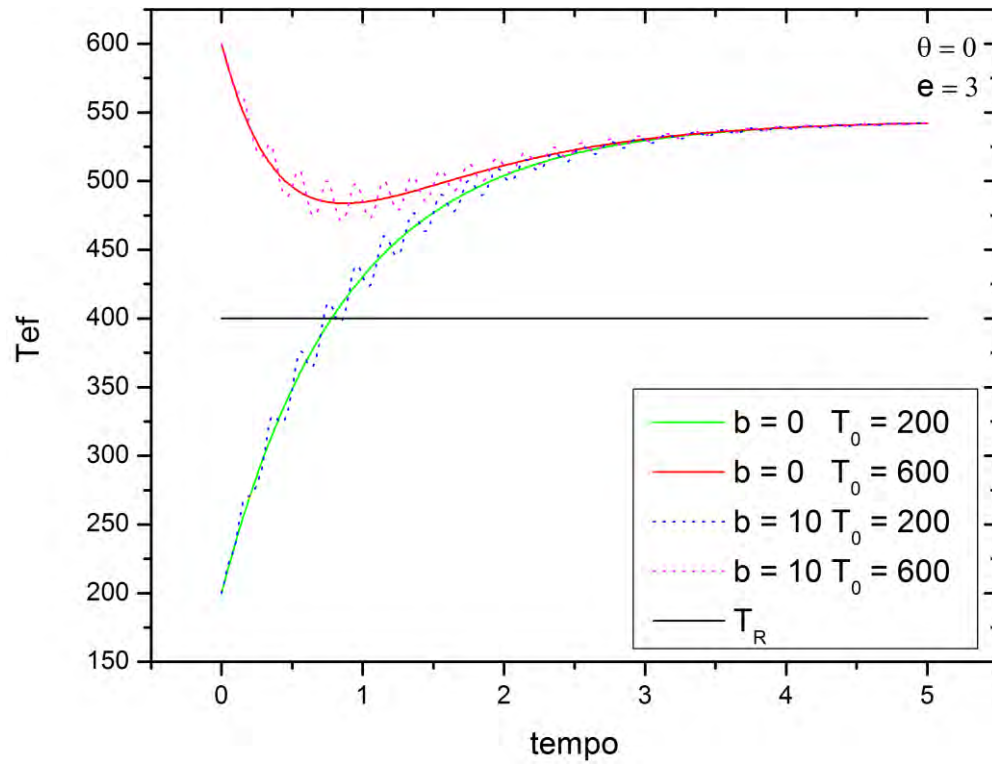


Figura 10 – Transiente de Temperatura $\theta=0$ e $b=10$

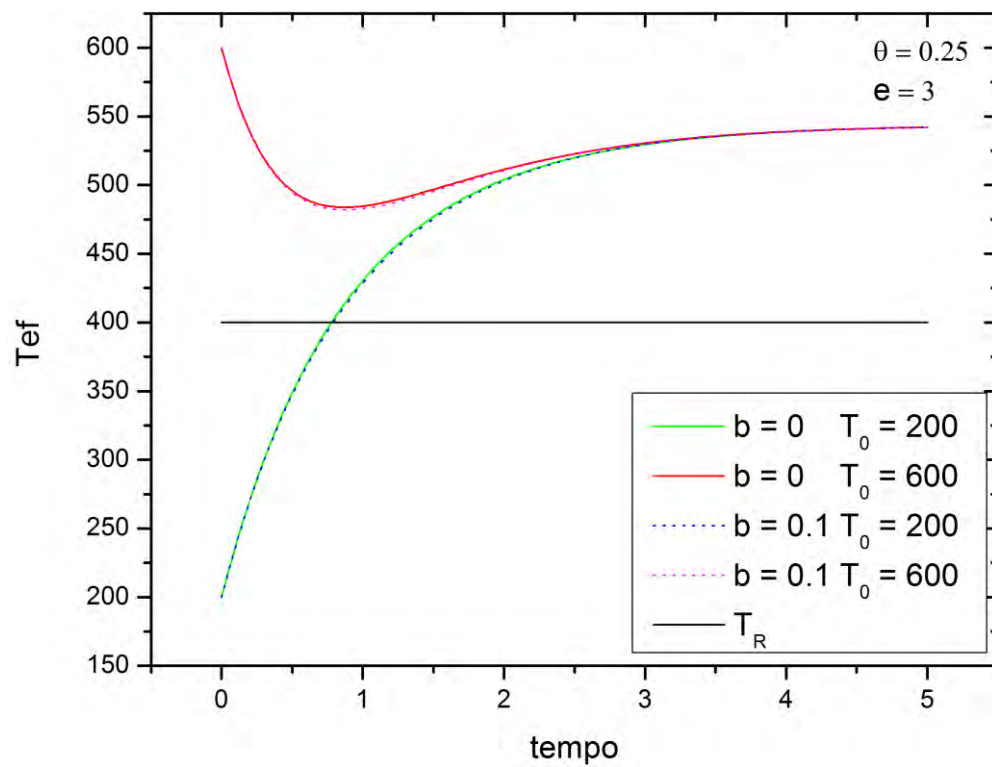


Figura 11 – Transiente de Temperatura $\theta=0.25\pi$ e $b=0.1$

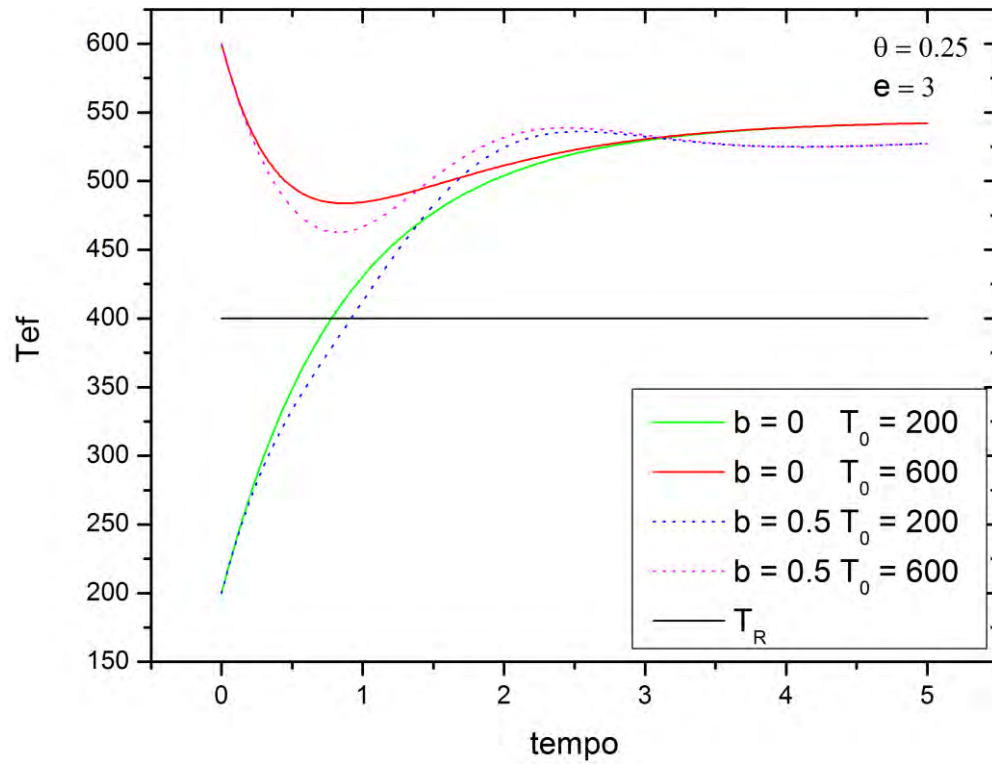


Figura 12 – Transiente de Temperatura $\theta=0.25\pi$ e $b=0.5$

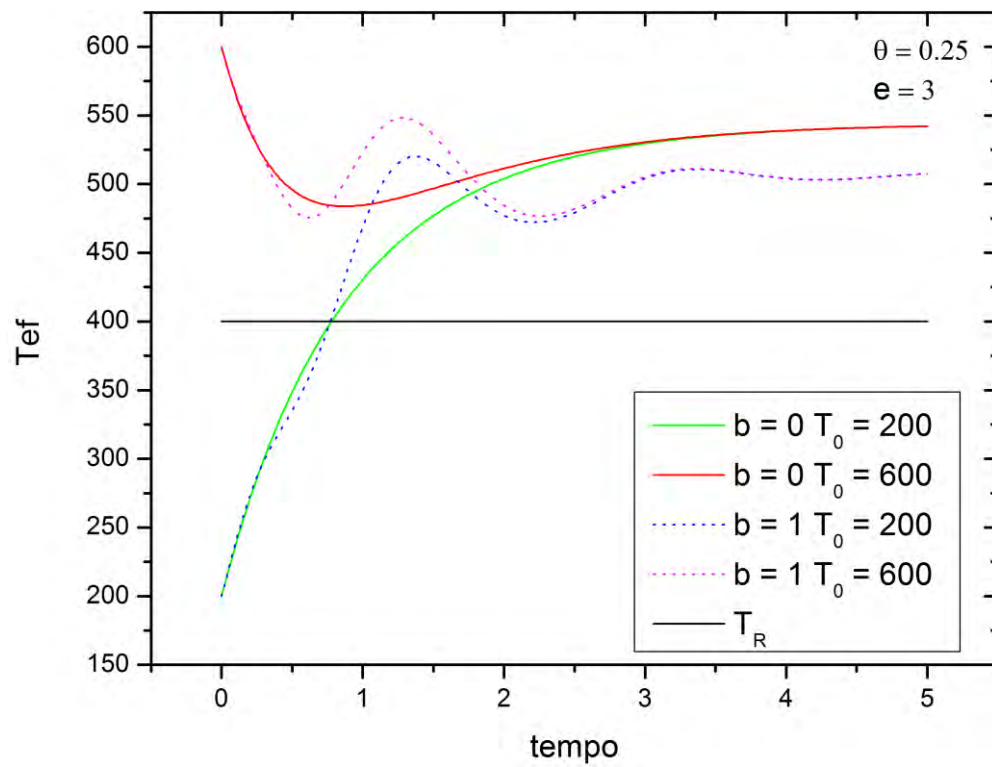


Figura 13 – Transiente de Temperatura $\theta=0.25\pi$ e $b=1$

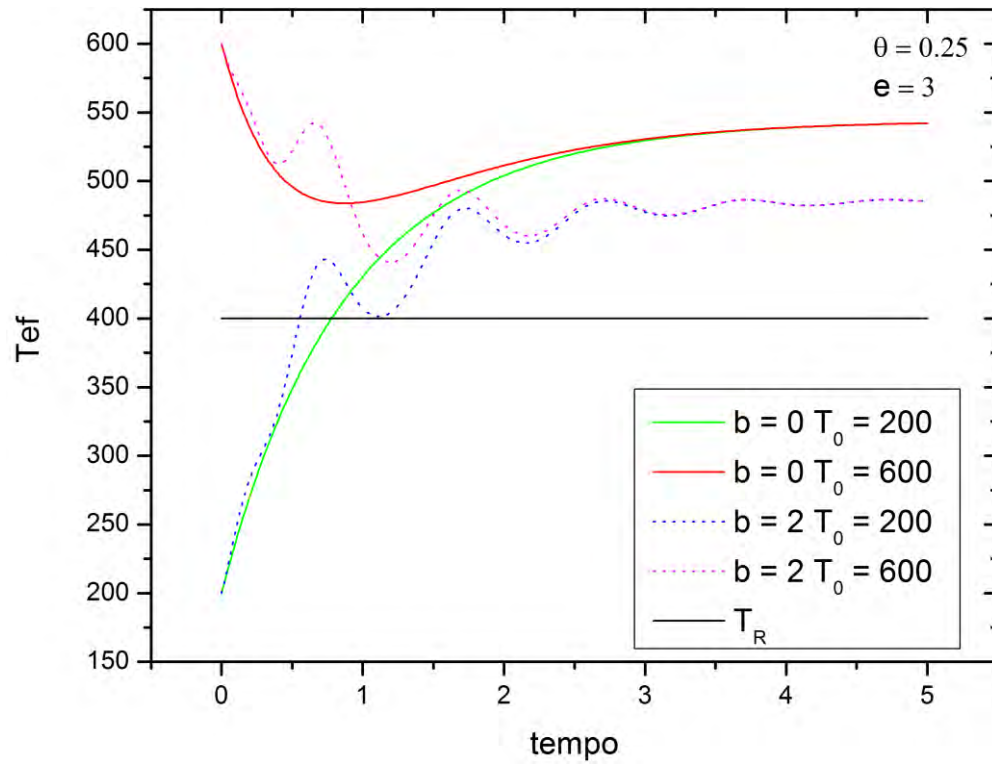


Figura 14 – Transiente de Temperatura $\theta=0.25\pi$ e $b=2$

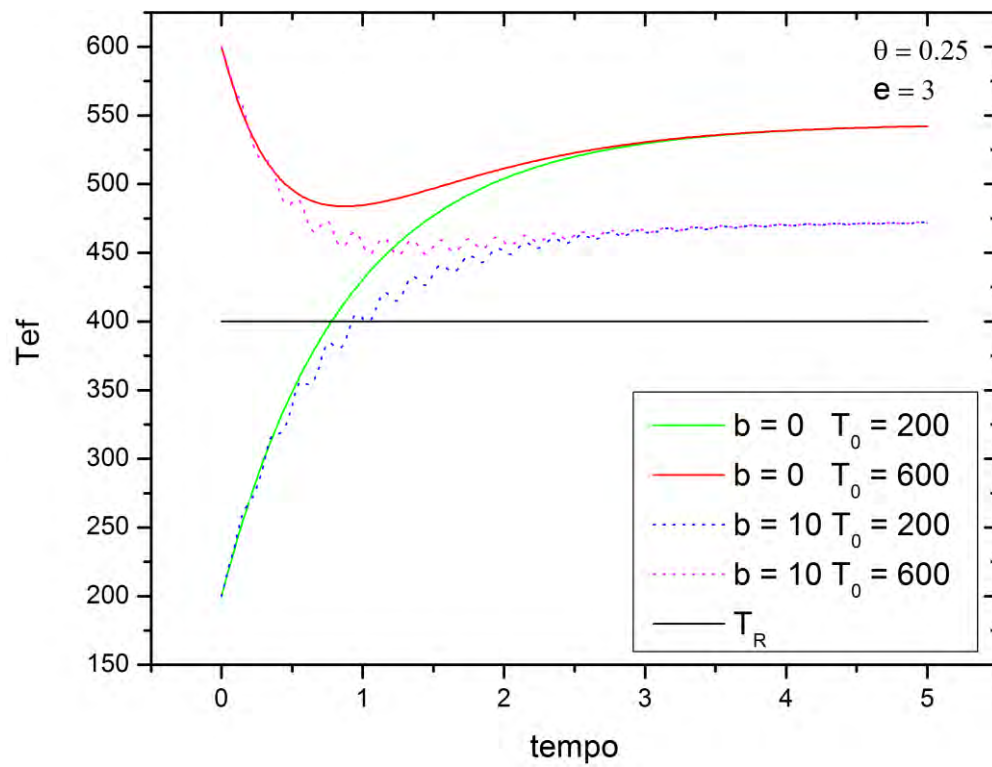


Figura 15 – Transiente de Temperatura $\theta=0.25\pi$ e $b=10$

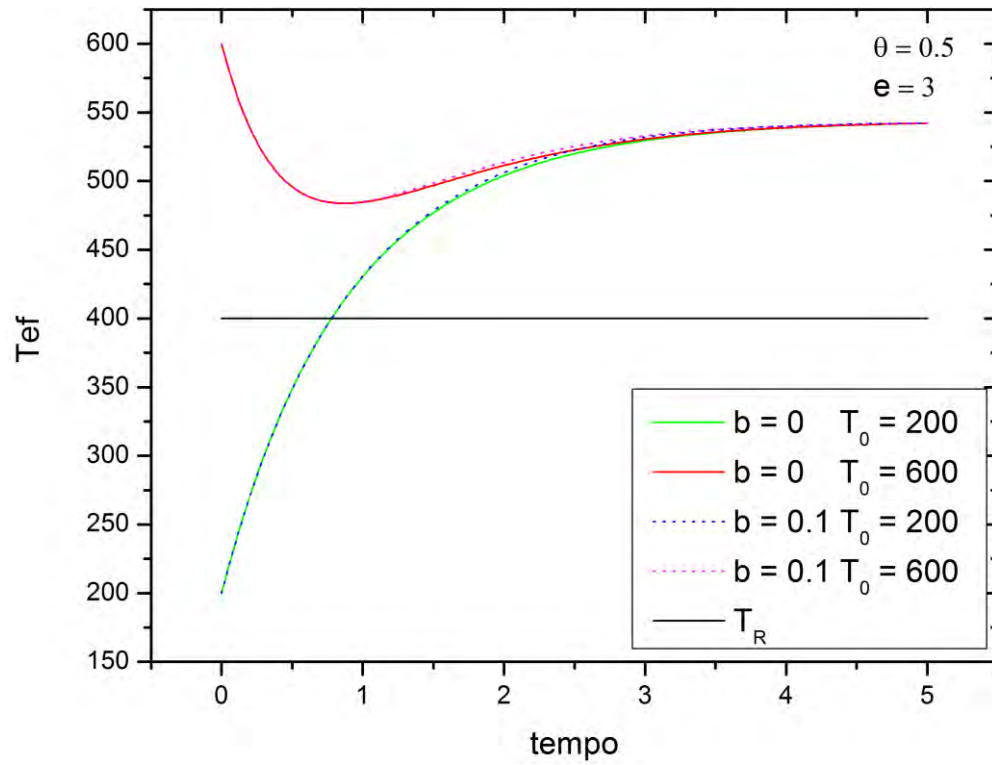


Figura 16 – Transiente de Temperatura $\theta=0.5\pi$ e $b=0.1$

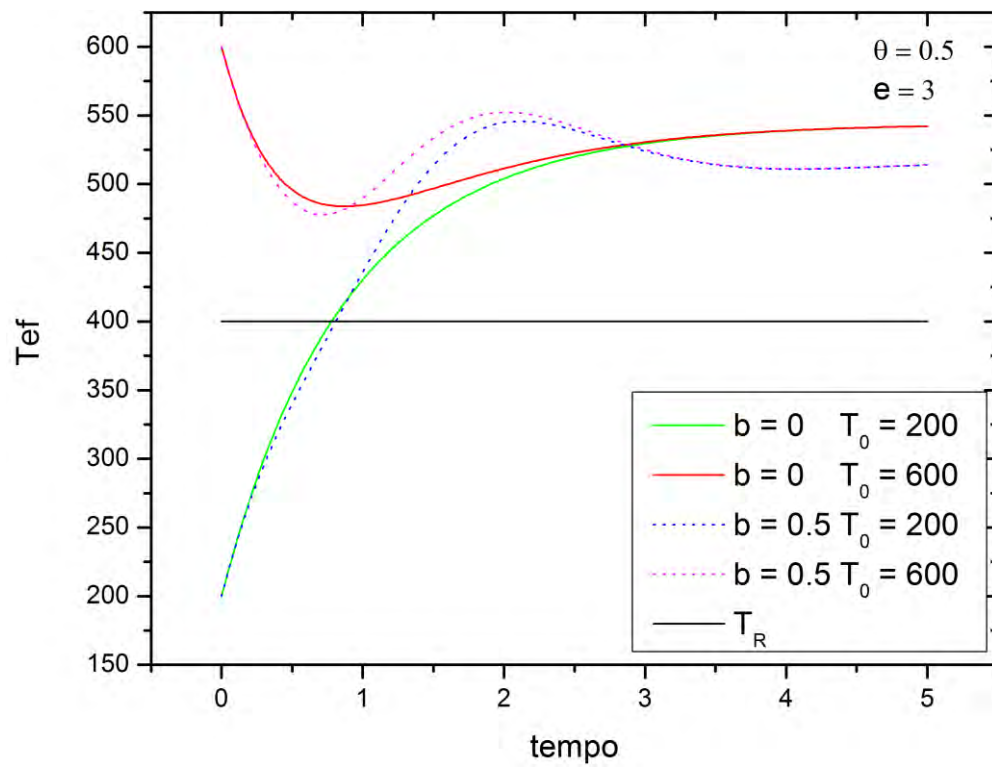


Figura 17 – Transiente de Temperatura $\theta=0.5 \pi$ e $b=0.5$

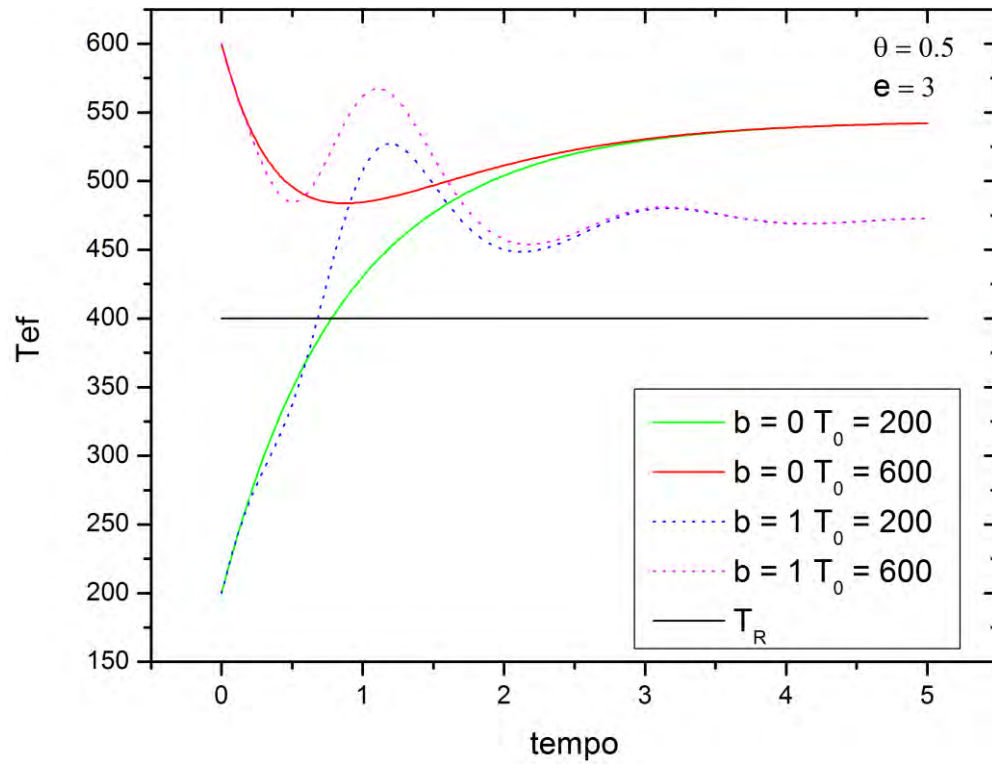


Figura 18 – Transiente de Temperatura $\theta=0.5\pi$ e $b=1$

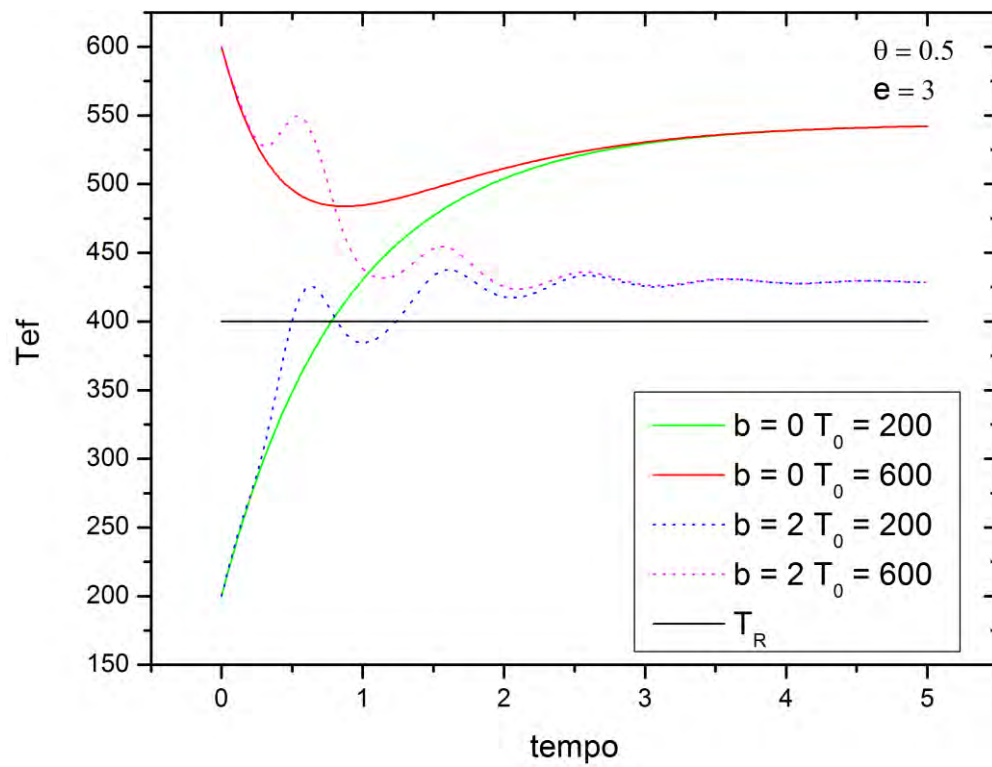


Figura 19 – Transiente de Temperatura $\theta=0.5\pi$ e $b=2$

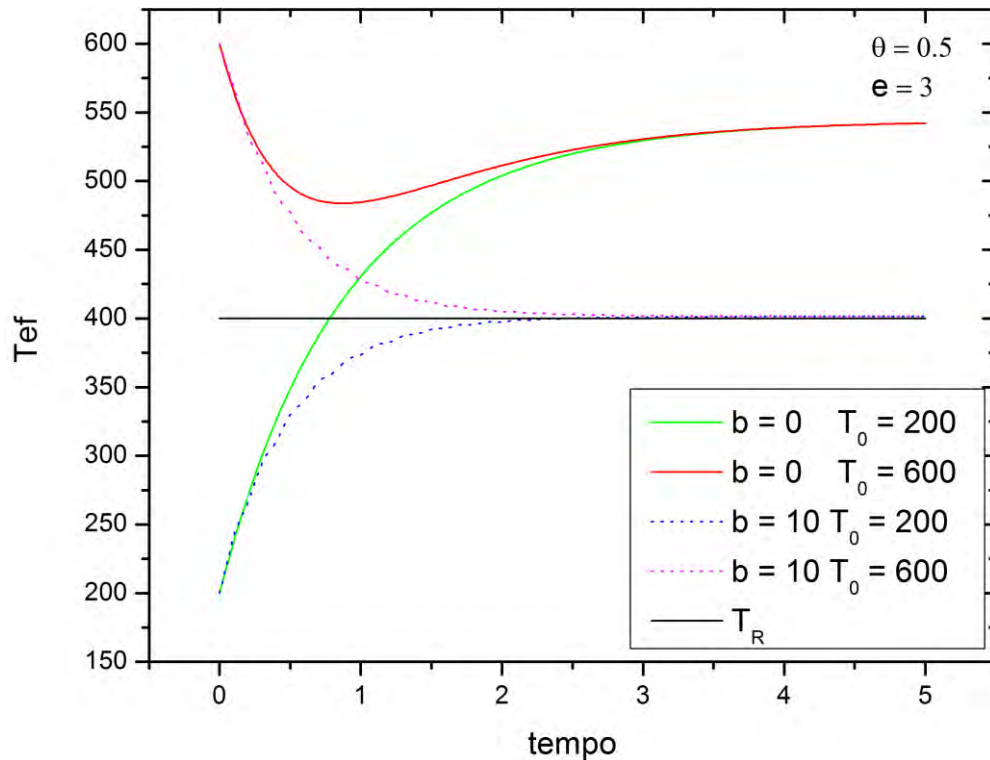


Figura 20 – Transiente de Temperatura $\theta=0.5\pi$ e $b=10$

Nos gráficos onde o campo elétrico e o campo magnético se encontram na mesma direção, figuras 6-10, podemos notar que o campo magnético vai perdendo sua importância exceto por pequenas oscilações até atingir o regime assintótico estacionário com o mesmo valor terminal que o caso de campo magnético nulo

Nos casos em que o campo elétrico e campo magnético não são paralelos a contribuição do campo magnético além das oscilações é reduzir o valor terminal da temperatura. Nas figuras de 11-15 fixamos o valor do ângulo entre os campos em 45° e variamos as intensidades do campo magnético. A temperatura terminal diminui, quando comparada com o caso de campo magnético nulo ou paralelo. Esse efeito de diminuição é acentuado à medida que a aumentamos a intensidade do campo magnético (lembrando que o ângulo entre os campos é fixo). Este efeito é maximizado nas figuras 16-20 onde os campos elétrico e magnético são perpendiculares. Em particular no caso representado na figura 20 onde o campo magnético possui intensidade de 10 Teslas, o efeito do campo elétrico na temperatura efetiva terminal é praticamente anulado pela presença do campo magnético perpendicular, ou seja, o “aquecimento elétrico” dos portadores é “resfriado magneticamente” sendo a temperatura terminal levemente superior a temperatura de equilíbrio do reservatório.

A influência do campo magnético sobre a temperatura efetiva de sistemas brownianos carregados é de suma importância como pudemos perceber, embora tenha sido raramente considerada na literatura. Através da aplicação de tais campos podemos resfriar o sistema, e como sabemos a temperatura é diretamente proporcional ao coeficiente de difusão¹:

$$D = \frac{k_B T}{6m\pi a\eta} \quad (4.15)$$

portanto a simples aplicação de um campo magnético pode ser um método eficiente para diminuir o coeficiente de difusão dos portadores Brownianos, ou seja, confinando os portadores por um período de tempo maior. Essa consideração esta em acordo com as conclusões de T. P. Simões em sua tese de doutorado³⁷, onde foi analisada a solução exata da equação de Kramers para partículas Brownianas carregadas.

Um resultado ainda provisório, no senso de que mais estudos são necessários, é que no caso de campo magnéticos nulo/paralelo ao campo elétrico ou sendo não paralelo de pequena intensidade observamos que a temperatura terminal é atingida sempre “por baixo”, ou seja, para condição inicial “fria” a partícula se “esquenta” até atingir a temperatura terminal sem nunca ultrapassar este valor; para a condição inicial “quente” observamos primeiro um “resfriamento” a um valor abaixo da temperatura terminal e logo um comportamento similar ao caso “frio”. Assim que aumentamos o valor do campo magnético no caso não paralelo este efeito deixa de existir acompanhado de um comportamento oscilatório. Para valores de campos magnéticos muito altos a temperatura efetiva se relaxa sem cruzar a temperatura terminal, tanto no caso “quente” como no caso “frio”. Alguns destes comportamentos já foram relatados na literatura^{15,37}.

5. Conclusões

Estudamos neste trabalho o modelo do movimento Browniano para uma partícula carregada, na formulação de Langevin. Após uma revisão inicial, estudando a fundo os conceitos principais deste modelo, incorporamos a ação dos campos elétrico e magnético externos e simultâneos nesse formalismo. Os efeitos do campo magnético em sistemas Brownianos até recentemente não era muito estudado. Nossa contribuição é inédita e reforça e corrobora estudos similares feitos no formalismo de Fokker Planck Kramers.

No capítulo 2 generalizamos o teorema de flutuação dissipação definindo uma temperatura efetiva (de não equilíbrio) que depende do tempo e dos campos externos aplicados, e que atinge um estado estacionário (ou terminal) no regime assintótico, sendo essa temperatura sempre maior que a temperatura do reservatório, resultando nos denominados portadores “quentes”.

No capítulo 3 reescrevemos as equações de transporte em semicondutores (equações de Shockley) considerando a força de Lorentz sobre os portadores.

Porém, a maior contribuição desta dissertação esta no capítulo 4, onde de uma forma simples e elegante elaboramos um modelo para descrever o efeito Gunn. Aplicando modelos qualitativos existentes na literatura no que se referem à semicondutores com estrutura multi bandas e considerando um modelo linear no campo elétrico para a velocidade de arraste incorporamos os efeitos não ôhmicos através da dependência da mobilidade na temperatura, neste caso substituindo a temperatura do reservatório pela temperatura efetiva dos portadores. Utilizando valores (aproximados pela ordem de grandeza) conhecidos na literatura para o composto GaAs, pudemos quantificar o efeito Gunn não somente no aspecto qualitativo mas também quantitativo, por exemplo o campo elétrico crítico calculado resultou ser da mesma ordem que o medido experimentalmente $\sim 4\text{KVolt/cm}$. Nosso modelo também coincide com modelos anteriores no caso particular de campo magnético nulo. O efeito do campo magnético na condutância diferencial negativa em nosso modelo é inédito e em concordância qualitativa com o único dado experimental que conseguimos encontrar na literatura, de um composto parente do GaAs. O efeito do campo magnético é “resfriar” o “esquentamento elétrico” dos portadores diminuindo a velocidade de arraste crítica e aumentando o campo elétrico crítico no efeito Gunn.

Finalmente no estudo da temperatura efetiva transiente mostrou-se que o efeito do campo magnético, como no efeito Gunn (onde a temperatura efetiva relevante é a temperatura efetiva assintótica ou terminal), é de “resfriar” o “esquentamento elétrico” dos portadores. Este “resfriamento” nunca é menor que a temperatura do reservatório térmico. Também, sendo o coeficiente de difusão proporcional à temperatura, o efeito do campo magnético é retardar a difusão. Em resumo, o campo magnético pode ser utilizado como um mecanismo não invasivo (sem contato físico com a amostra) para “resfriar” e “confinar” portadores.

6. Referências

-
- ¹ A. Einstein, Ann Phys. **17** (1905) 549.
- ² R. Brown, Philos. Mag. **4** (1828) 161; Edinb. New Philos. J. **5** (1928) 358.
- ³ J. B. Perrin, Ann. Chim. Phys. **18** (1909) 5.
- ⁴ F. Reif “Fundamentals of statistical and thermal physics” McGraw-Hill (1965).
- ⁵ P. Langevin, C. R. Hebd. Seances Acad. Sci. **146** (1908) 530.
- ⁶ R. M. Mazo “Brownian Motion, Fluctuations, Dynamics and Applications” Clarendon Press, Oxford (2002).
- ⁷ R. K. Pathria “Statistical Mechanics” Pergamon Press (1972)
- ⁸ R. L. Borrelli e C. S. Coleman “Differential Equations. A Modeling Perspective” John Wiley & Sons (1998)
- ⁹ G. Arfken and H. Weber “Essential Mathematical Methods for Physicists” Elsevier Ac. Press. (2004).
- ¹⁰ W. Sutherland, Philos. Mag. **9** (1905) 781.
- ¹¹ R.E. Lagos e T. P. Simões, Physica **A 390** (2011) 1591.
- ¹² R. Czopnik e P. Gabaczewski, Phys. Rev. **E 63** (2001) 021105.
- ¹³ L. A. Barreiro, J. R. Campanha e R. E. Lagos, Rev. Mex. Fís. **48**, Suppl. **3** (2002).
- ¹⁴ L. Ferrari, J. Chem. Phys. **118** (2003) 11092.
- ¹⁵ T. P. Simões e R. E. Lagos, Physica **A 355** (2005) 274.
- ¹⁶ J. I. Jiménez-Aquino e M. Romero-Batista, Rev. Mex. Fís. **E 52** (2006) 182.
- ¹⁷ J. I. Jiménez-Aquino e M. Romero-Batista, Phys Rev. **E 74** (2006) 041117; *ibid* **E 76** (2007) 021106.
- ¹⁸ J. I. Jiménez-Aquino e M. Romero-Batista, Physica **A 386** (2007) 63.
- ¹⁹ R. Filiger e P. Reimann, EPL **77** (2007) 30008.
- ²⁰ N. Voropajeva e T. Örd, Physics Letters **A 372** (2008) 2167.
- ²¹ F. N. C. Parran, M. P. Solon e J. P. Esguerra, Phys. Rev. **E 77** (2008) 022101.
- ²² J. I. Jiménez-Aquino, M. Romero-Batista e A. C. Pérez-Guerrero Noyola, Rev. Mex. Fís. **54** (2008) 81.
- ²³ J. I. Jiménez-Aquino, R. M. Velasco e F. J. Uribe, Phys. Rev. **E 77** (2008) 051105; *ibid* **E 78** (2008) 032102.

-
- ²⁴ T. M. Apostol “Multi-Variable Calculus and Linear Algebra, with Applications to Differential Equations and Probability” Vol. 2, 2nd Edition, John Wiley & Sons (1969).
- ²⁵ E. J. Putzer, American Mathematical Monthly, **73** (1966) 2-7.
- ²⁶ T. M. Apostol “Calculus: Introduction, with Vectors and Analytic Geometry” Vol. 1, 2nd Edition, John Wiley & Sons (1969).
- ²⁷ J. D. Jackson “Classical Electrodynamics” John Wiley & Sons (1925).
- ²⁸ N. W. Ashcroft e N. D. Mermin “Solid State Physics” Saunders College Publishing (1976).
- ²⁹ R. E. Lagos “Introdução Informal à Teoria dos Processos Estocásticos” Apostila, Unesp – Rio Claro (2008).
- ³⁰ M. Cardona e P. Y. Yu “Fundamentals of Semiconductors” 3^a Ed., Springer-Verlag (2001).
- ³¹ P. N. Butcher, Rep. Prog. Phys. **30** (1967) 97.
- ³² J. G. Ruch e G. S. Kino, Phys. Rev. **174** (1968) 921.
- ³³ S. M. Sze “Semiconductor Devices: Physics and Technology” 2^a Ed., John Wiley & Sons, Inc. (2002).
- ³⁴ W. Shockley, Bell Syst. Tech. J. **30** (1951) 990.
- ³⁵ A. Patané e A. Ignatov, D. Fowler, O. Makarovsky, L. Eaves, L. Geelhaar e H. Riechert,, Phys. Rev. E **72** (2005) 033312.
- ³⁶ R. A. Smith “Semiconductors” 2nd Edition, Cambridge University Press (1978)
- ³⁷ T. P. Simões “Solução Exata da Equação de Kramers para uma particular carregada” Tese de doutorado, IGWF UNICAMP (2010).