



# ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,  
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

## **CARACTERIZAÇÃO TEÓRICA DO COMPORTAMENTO “TWO PHONON MODE” DO AlGaAs NA FASE CÚBICA**

**Felipe Figueiredo Silva<sup>1</sup> ; Adriano Manoel dos Santos<sup>2</sup>**

UEMS, C. Postal 351, 79804-970 Dourados-MS; E-mail:  
felipefigueiredo153@hotmail.com

Bolsista de Iniciação Científica PIBIC<sup>1</sup>. Professor Orientador<sup>2</sup>.  
FUNDECT/CNPq/PIBIC/UEMS

### **RESUMO**

O estudo das propriedades vibracionais da rede cristalina permite obter ou prever informações sobre o sistema que está sendo estudado. Por exemplo, o comportamento vibracional das estruturas cristalinas tem influência sobre a resistência elétrica e condutividade térmica. Na caracterização das amostras é possível obter informações sobre os fônons ópticos, acústicos, interações rede-fótons e rede-elétrons. O cálculo vibracional de sistemas pequenos tem sido realizado principalmente pelos chamados métodos ab-initio, que são métodos cujos cálculos são de primeiros princípios e que não dependem de dados empíricos. O método semi-empírico denominado Valence Force Field é utilizado na descrição da dinâmica vibracional de estruturas cristalinas. Este método considera que as interações atômicas se dão principalmente pelos elétrons de valência. O modelo de Feenstra será utilizado na descrição das interações atômicas de curto alcance, elaborado segundo a concepção do Valence Force Field e o modelo de Ewald para as interações de longo alcance, nos quais tem sido utilizados com sucesso na

descrição das propriedades vibracionais de estruturas zinblende e diamante. O uso deste modelo permite, conseqüentemente, a determinação do espectro de fônons e da densidade de estados vibracionais.

**Palavras-chave:** Semicondutor, Cúbica, AlGaAs.

## INTRODUÇÃO

Uma das características dos materiais semicondutores é apresentar um valor de resistência elétrica situada entre condutores e isolantes. Porém, um semicondutor, à temperatura zero, é um sólido que pode ser considerado como isolante, pois sua banda de valência está cheia e a banda de condução vazia. Características como estas fazem com que os dispositivos constituídos por semicondutores sejam à base da eletrônica moderna, sendo empregados na fabricação de transístores, retificadores, díodos e os circuitos integrados. [1,2]

Um exemplo da aplicação destes dispositivos são os módulos fotovoltaicos que permitem a conversão direta da radiação solar (fótons) em energia elétrica. A maior parte dos aparelhos semicondutores aplicados comercialmente é constituída por Si, porém, há outros materiais semicondutores como o Ge, o GaAs, SiC, entre outros.

A liga semicondutora AlGaAs é uma composição intermediária entre o AlAs e o GaAs, apresentando características físicas intermediárias que a torna útil na concepção de dispositivos opto-eletrônicos. [3]

O estudo das propriedades vibracionais da rede cristalina permite obter ou prever informações sobre o sistema que está sendo estudado. Por exemplo, o comportamento vibracional das estruturas cristalinas tem influência sobre a resistência elétrica e condutividade térmica. Na caracterização das amostras é possível obter informações sobre os fônons ópticos, acústicos, interações rede-fótons e rede-elétrons. [1,2]

O cálculo vibracional de sistemas pequenos tem sido realizado principalmente pelos chamados métodos ab-initio, que são métodos cujos cálculos são de primeiros princípios e que não dependem de dados empíricos. O problema no uso dos métodos ab-

início está associada à dificuldade de simular estruturas complexas, pois a execução dos mesmos exige uma elevada quantidade de memória e um longo tempo computacional.

O método semi-empírico denominado Valence Force Field é utilizado na descrição da dinâmica vibracional de estruturas cristalinas. Este método considera que as interações atômicas se dão principalmente pelos elétrons de valência, cuja dinâmica poderia ser simulada por meio de molas que se distenderiam segundo a lei de Hooke. Além de permitir uma análise simplificada do comportamento dos fônons a partir de um potencial previamente estabelecido, reduz drasticamente a memória e o tempo de computação. [4]

Para estudar os fônons ( $TO_{\Gamma}$ ) nas ligas emprega-se o método parametrizado denominado *Random Element Isodisplacement (REI)*. Neste método, para gerar a equação de movimento para os átomos da rede de uma liga do tipo  $A_xB_{1-x}C$ , foi considerado que os íons A e B estivessem aleatoriamente distribuídos na mesma sub rede e que os átomos de mesma espécie vibrariam em fase e com amplitudes idênticas, o mesmo acontecendo com os átomos C. Com isto é possível reproduzir o comportamento dos fônons em Gama nas ligas estudadas, por meio de um ajuste dos parâmetros existentes em seu modelo. A suposição de um mesmo movimento vibracional para átomos de mesma espécie é um fato verdadeiro nos nitretos binários tanto para  $TO_{\Gamma}$ , quanto para  $LO_{\Gamma}$ , portanto, de acordo com o *REI* a única mudança no tratamento da liga ternária seria a introdução de uma aleatoriedade, indicando que cada átomo está sujeito a uma força produzida pela média estatística de seus vizinhos. [2,4,5]

Uma extensão do método *REI*, o método *MREI (Modified Random Element Isodisplacement)*, leva em consideração a polarização do campo elétrico, o que possibilitou o cálculo do comportamento do modo  $LO_{\Gamma}$ . De acordo com o *MREI* é possível estabelecer regras que permitam determinar quando uma liga poderá apresentar comportamentos de fônons *one-mode* ou *two-mode*. [5]

Segundo o método *MREI* quando a massa do átomo B for menor que a massa reduzida dos átomos AC e quando a massa do C for menor que a massa reduzida dos átomos AB, os modos ópticos devem apresentar um comportamento do tipo *two-mode*. Nos casos onde quaisquer destas relações não são satisfeitas, os ramos ópticos comportam-se como *one-mode*. [2]

Apesar de o método MREI ser muito utilizado na literatura, observamos que este método é limitado, pois não permite prever o comportamento da curva de dispersão dos fônons, na realidade este método fica limitado apenas à descrição do ponto de alta simetria  $\Gamma$ .

O objetivo deste trabalho é a simulação numérica da dinâmica vibracional da liga ternária AlGaAs na fase cúbica para diferentes valores de concentração, e a partir disto verificar se o modelo semi-empírico, definido pelo potencial de Feenstra e pela interação iônica, permite descrever o comportamento “two phonon modes”, que é verificada experimentalmente para esta liga.

Assim foi utilizado o método *Valence Force Field (VFF)* na descrição das interações atômicas de curto alcance, cujas energias potenciais foram elaboradas segundo a concepção de Feenstra, juntamente com o método do íon rígido, representando as interações de longo alcance. Estas concepções de energia potencial foram utilizadas com sucesso na descrição das propriedades vibracionais de estruturas zinblende e diamante. O uso deste modelo permite, conseqüentemente, a determinação do espectro de fônons e da densidade de estados vibracionais.

## **MATERIAIS E MÉTODOS**

### **2.1 DINÂMICA VIBRACIONAL**

O estudo das propriedades vibracionais da rede cristalina permite obter ou prever informações sobre o sistema que está sendo estudado, como por exemplo, a vibração da estrutura cristalina influencia no comportamento da resistência elétrica e da capacidade térmica.

Para descrever o efeito promovido pelas interações de curto alcance (interações de orbitais) e de longo alcance (interações elétricas) no processo vibracional de um material utilizamos o método do Valence Force Field e o do Íon Rígido.[6,7] Antes, porém, é necessário entender e descrever a matriz dinâmica do material.

Para apresentar as equações que descrevem o comportamento vibracional da rede cristalina e que levam à Matriz Dinâmica, partiremos de duas suposições: [Adriano Manoel]

- Cada átomo vibra em torno de uma posição média, que corresponde a de equilíbrio, dada pela rede de Bravais do cristal.
- O deslocamento médio de cada átomo é pequeno, quando comparado à distancia entre os átomos.

A primeira suposição nos conduz a um modelo de interação onde não se leva em conta qualquer mecanismo de difusão, enquanto a segunda garante uso da Teoria Clássica do Cristal Harmônico, podemos considerar que os elétrons estarão sempre no estado fundamental para uma dada configuração instantânea da posição nuclear. [4]

Segundo a Teoria Clássica do Cristal harmônico a energia potencial elástica de um sistema cristalino pode ser determinada como:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{lK, l'K'} \sum_{ij} \phi_{ij}^o(lK, l'K') u_i(lK) u_j(l'K'). \quad (1)$$

Onde  $l$  é célula primitiva,  $K$  são átomos da célula primitiva,  $\phi_{ij}^o(lK, l'K')$  representa o tensor constante de força atômica, no qual os símbolos  $i$  e  $j$  correspondem às coordenadas cartesianas,  $u$  corresponde a função deslocamento de cada átomo na rede,

$$\phi_{ij}^o(lK, l'K') = \frac{\partial^2 U}{\partial u_i(lK) \partial u_j(l'K')}. \quad (2)$$

Conhecendo a energia potencial harmônica de um cristal tridimensional é possível calcular a força resultante da interação do cristal perturbado com um determinado átomo da rede por meio da equação  $\vec{F} = -\vec{\nabla}U$ , ou seja,

$$M_k \ddot{u}_i(lK) = - \frac{\partial U}{\partial u_i(lK)} = - \sum_{l'K'j} \phi_{ij}^o(lK, l'K') u_j(l'K'). \quad (3)$$

A solução para a equação de movimento (3) para os deslocamentos atômicos pode ser descrita em função de uma onda plana dependente de um vetor de onda  $\vec{k}$  e de uma frequência angular  $\omega$ ;

$$u_i(lK) = \frac{W_i(K/\vec{k}) e^{i[\vec{k} \cdot \vec{R}(lK) - \omega \cdot t]}}{\sqrt{FM_K}} \quad (4)$$

onde  $W_i(K/\vec{k})$  é chamado de vetor de polarização,  $\vec{k} \cdot \vec{R}(lK)$  representa a defasagem da onda entre os planos de átomos,  $\vec{R}(lK)$  é o vetor posição,  $\omega \cdot t$  representa a parte

temporal associada ao deslocamento do  $K$ -ésimo átomo e  $F$ , o fator de normalização. Substituindo a (4) em (3) obtemos na forma matricial;

$$(D - I\omega^2)W = 0, \quad (5)$$

onde  $D$  é matriz dinâmica,  $I$  a matriz identidade,  $\omega$  a frequência de vibração dos fônons,  $W$  é o vetor de polarização, que são determinados respectivamente por meio dos autovalores e auto-vetores.

Onde

$$D_{ij}(KK'|\vec{k}) = \sum_{l'} \frac{\phi_{ij}^o(lK, l'K') e^{i\vec{k}[\vec{R}(l'K') - \vec{R}(lK)]}}{\sqrt{M_K M_{K'}}} \quad (6)$$

A matriz (6) é conhecida na literatura como matriz dinâmica, de acordo com (5) é possível determinar os espectros de fônons. Para isso é preciso encontrar o tensor constante de força da equação (2), que é o único parâmetro na equação (6) que não conhecemos. O tensor constante de força é dependente da energia potencial, que neste será representada por interações de curto e longo alcance, descritas respectivamente por meio dos métodos *VFF* e da interação elétrica entre as cargas efetivas.

## 2.2 INTERAÇÃO DE CURTO ALCANCE

O método semi-empírico *VFF* é utilizado na descrição da dinâmica vibracional de estruturas cristalinas.[6] Este método considera que a dinâmica, proveniente das interações atômicas que têm origem nos elétrons de valência, pode ser simulada por meio de molas que se distenderiam segundo a lei de Hooke.

Para representar esta interação atômica, que neste caso é de curto alcance, será utilizado o modelo de Feenstra, elaborado segundo a concepção do *VFF*, o uso deste sistema permite determinar o espectro de fônons e a densidade de estado vibracional. Neste modelo a interação é representada por um potencial elástico que descreve o sistema cristalino por interações que podem ser simuladas como molas. O modelo descreve a energia potencial vibracional em termos de dois parâmetros, que são as constantes de força,

$$U = \frac{1}{2} \sum_{lK} \sum_{l'K' \neq lK} [\alpha(lK, l'K') |(\vec{u}(lK) - \vec{u}(l'K')) \cdot \vec{e}(lK, l'K')|^2 + \beta(lK, l'K') |(\vec{u}(lK) - \vec{u}(l'K')) \times \vec{e}(lK, l'K')|^2], \quad (7)$$

sendo

$$\vec{e}(lK, l'K') = \frac{\vec{R}(lK) - \vec{R}(l'K')}{|\vec{R}(lK) - \vec{R}(l'K')|}, \quad (8)$$

sendo  $\vec{e}$  o versor que indica a direção entre as posições dos átomos  $lK$  e  $l'K'$  (versor direcional). Os parâmetros  $\alpha(lK, l'K')$  e  $\beta(lK, l'K')$ , que representam ligações dos átomos  $lK$  e  $l'K'$  são chamados de constantes de força de estiramento e constante de força angular, respectivamente.

Partindo da equação (2) para o tensor constante de força atômica, procedendo a derivada segunda da energia potencial em relação do deslocamento dos átomos  $lK$  e  $l'K'$  verifica-se que o tensor constante de força atômica dependerá somente dos parâmetros  $\alpha$ ,  $\beta$  e dos versores direcionais. Para calcular a curva de dispersão de fônons é necessário conhecer os parâmetros, para os primeiros e segundos vizinhos. Onde  $\alpha_1$  e  $\beta_1$  representam as constantes de força de ligação com os primeiros vizinhos,  $\alpha_2$  e  $\beta_2$  as ligações com os segundos vizinhos, e assim sucessivamente.

### 2.3 INTERAÇÃO DE LONGO ALCANCE

Para representar as interações de longo alcance será utilizado o modelo do Íon Rígido, que foi desenvolvido para o estudo da dinâmica da rede de cristais iônicos. Este método considera que as cargas iônicas podem ser aproximadas por cargas pontuais centradas no núcleo dos átomos. A energia potencial elétrica, correspondente a interação coulombiana entre átomos ionizados, para uma determinada estrutura cristalina é dada por:[7]

$$U = \frac{1}{2} \sum_{lK} \sum_{l'K' \neq lK} \frac{e^*(lK)e^*(l'K')}{|\vec{R}(lK) + \vec{u}(lK) - \vec{R}(l'K') - \vec{u}(l'K')|} \quad (9)$$

onde  $e^*(lK)$  corresponde a carga elétrica efetiva do átomo  $lK$ .

De acordo com Ewald, a matriz dinâmica associada a ionização é dada por;

$$D^{l.a}(KK'/\vec{K}) = -M^{\frac{1}{2}}e^*Be^*M^{\frac{1}{2}}, \quad (10)$$

onde  $e^*$  é a matriz correspondente à carga elétrica efetiva,  $M$  é a matriz relativa às massas dos átomos da base e  $B$  é uma matriz que depende dos vetores da rede cristalina e da rede recíproca.

Contudo, estes termos são facilmente determinados a partir do conhecimento da estrutura atômica do semiconductor estudado, sendo assim resta um termo sem o qual a matriz dinâmica não é completamente definida, a carga elétrica efetiva. Portanto, a matriz dinâmica que representará a interação coulombiana devido a ionização dos átomos, pode ser descrita simplesmente por:

$$D_c \cong D^{l.a}(e^*) \quad (11)$$

#### 2.4 SIMULAÇÃO DOS MODOS VIBRACIONAIS DO AlGaAs

Considerando dois átomos em uma célula primitiva como no caso do AlAs na estrutura cúbica, cada átomo apresenta 3 modos de vibração, neste caso teremos 6 modos que podem ser separados nos em ramos acústicos e ramos ópticos.

Os ramos acústicos apresentam uma relação linear entre a frequência e o vetor de onda para longos comprimentos de onda, essas frequências tendem a zero para um elevado comprimento de onda ( $k = 2\pi/\lambda$ ).

Os ramos ópticos não apresentam o mesmo comportamento dos ramos acústicos, não há uma relação linear entre a frequência e o vetor de onda. Os ramos ópticos apresentam características próximas de um comportamento linear horizontal e sua energia é da ordem do espectro visível. Os ramos ópticos são caracterizados por movimentos nos quais os átomos da rede estão em oposição de fase, por exemplo, um átomo se move para cima enquanto seu vizinho se move para baixo, isso é ocorre porque os vetores de polarização apontam em direções diferentes e esse comportamento é observado em toda rede cristalina devido a periodicidade da célula primitiva.

Dentre os ramos acústicos e ópticos, existe outra divisão que define os modos de vibração. Os modos são classificados como longitudinal acústico (LA), longitudinal óptico (LO), transversal acústico (TA) e transversal óptico (TO). Os modos



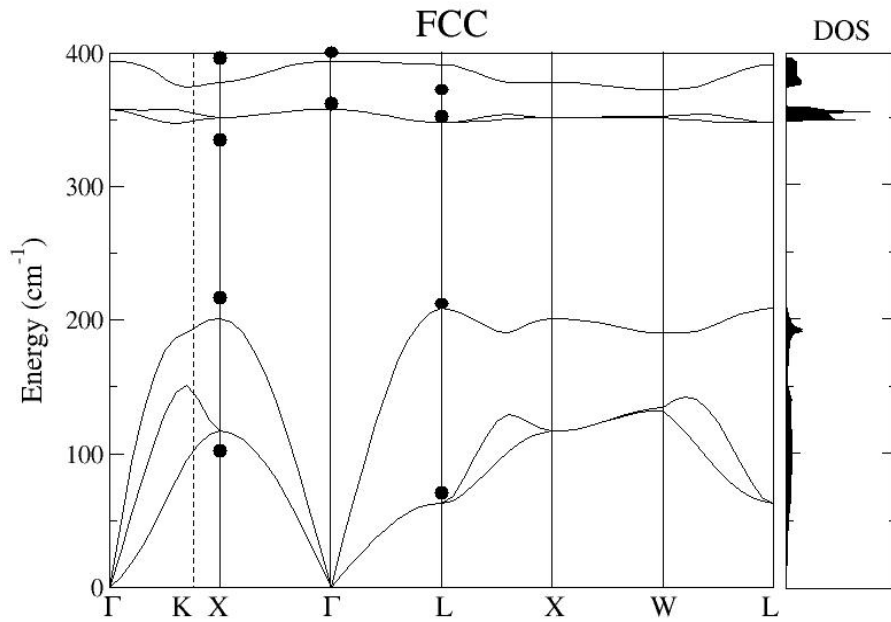
longitudinais basicamente vibram na direção de propagação, já os modos transversais apresentam vibração perpendicular à direção do movimento. Simplificando, podemos dizer que os modos longitudinais se comportam como ondas sonoras, e os modos transversais tem um comportamento similar às ondas eletromagnéticas, sendo perpendiculares à direção de propagação.

Com relação ao espectro vibracional do AlAs e GaAs é possível verificar que eles apresentam um comportamento similar para os ramos acústicos (Figuras 1 e 2), porém, seus níveis de energia e seu *gap* vibracional são diferentes. Observamos que os materiais apresentam 1 modo (LO) no ponto  $\Gamma$  e 2 modos (TO) degenerados no ponto  $\Gamma$  (gama) para cada material (Figuras 1 e 2). Essa degenerescência significa que os modos transversais ópticos (TO) têm os mesmos níveis de energia, então há uma sobreposição de energia no ponto.

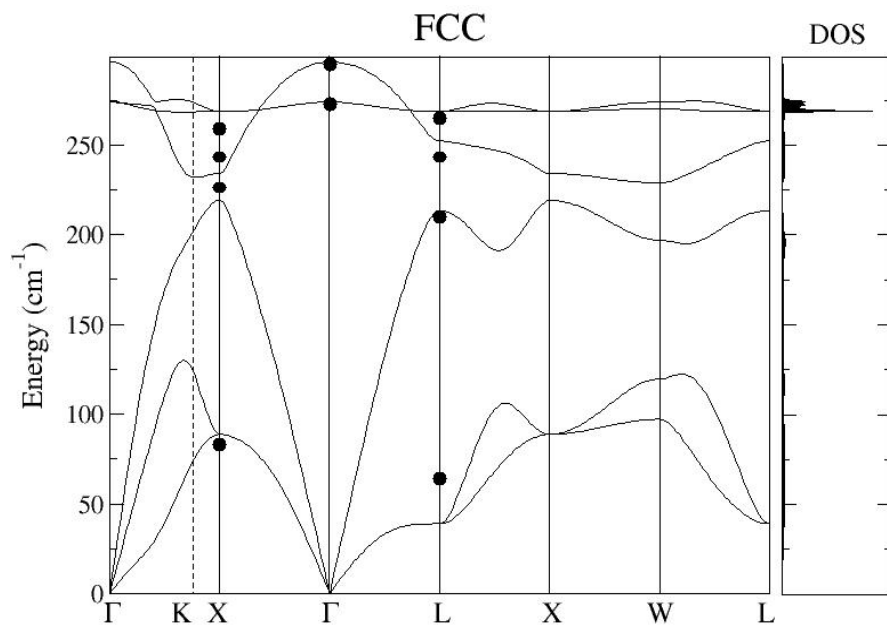
Por meio dos dados teóricos e experimentais obtidos na literatura para alguns pontos de alta simetria, destacados pelos círculos nas Figuras 1 e 2, conseguimos determinar as melhores constantes de força que reproduziam esses resultados. O comportamento da curva de dispersão obtida está bem próximo do disponível na literatura.

No gráfico do material AlAs é possível notar que os ramos acústicos estão bem distanciados dos ramos ópticos, esta distancia observada no gráfico é decorrente do *gap* de energia que é bem alto. Nesta figura conseguimos observar um elevado número de estados vibracionais ligados ao modo TO ocasionando um pico de densidade no gráfico da densidade de estado vibracionais (DOS). Quando comparamos TO do AlAs com o TO do GaAs, é possível notar que os materiais apresentam o comportamento bem parecido, contudo, o GaAs apresenta um pequeno *gap* de energia entre os modos acústicos e ópticos quando comparado ao AlAs. Apesar da similaridade, esses materiais apresentam densidades de estados vibracionais bem diferentes, o AlAs tem seu nível de energia maior que o do GaAs, essa diferença pode ser notada ao observar as Figuras 1 e 2.

Os modos LO nos dois gráficos não apresentam a mesma linearidade que os modos TO, porém, no caso do AlAs essa variação é pequena, com isso é possível notar que no gráfico da densidade de estado do AlAs essa característica esta mais presente.



**Figura 1:** Curva de dispersão de fônons e densidade de estados vibracionais (DOS) do material AlAs na estrutura zinblende da rede cúbica de face centrada. [8]

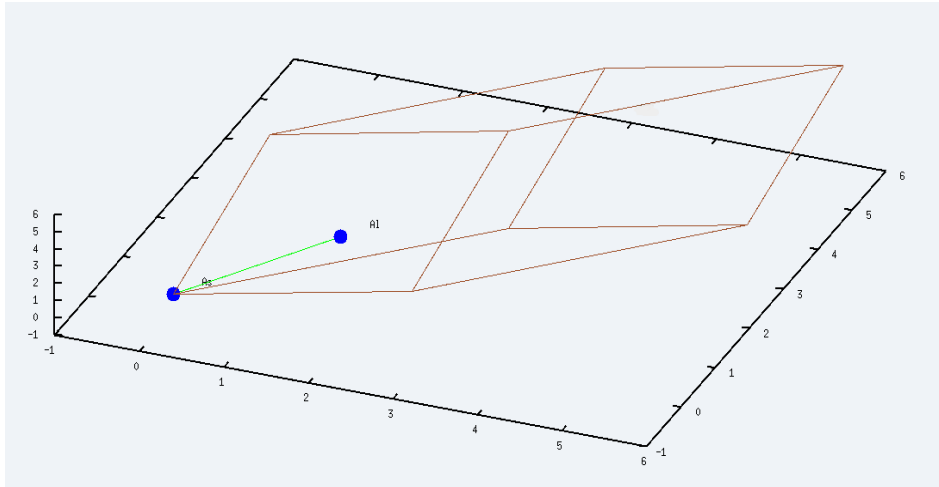


**Figura 2:** Curva de dispersão de fônons e densidade de estado vibracionais (DOS) do material GaAs na estrutura zinblende da rede cúbica de face centrada. [8]

## RESULTADO E DISCUSSÃO

No material binário que trabalhamos (AlAs e GaAs) o Arsênio(As) é eletro negativamente mais carregado que o Al e Ga, neste caso ele tem maior capacidade de receber

elétrons para completar seu octeto, desta forma, o Arsênio atua como ânion e o Alumínio e o Gálio atuam como cátion. Na Figura 3, é apresentada a célula primitiva como seus átomos da base (AlAs), cuja estrutura zincblend é descrita por uma rede cúbica de face centrada.

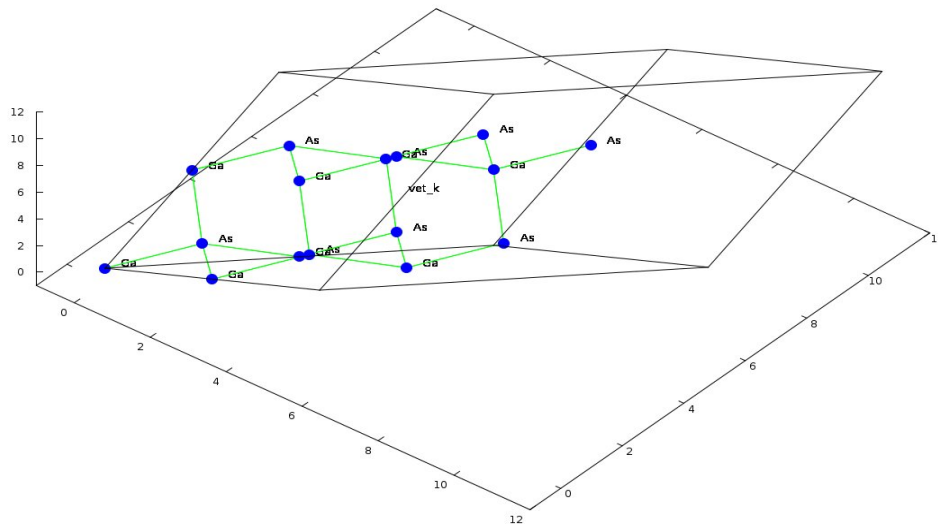


**Figura 3:** Célula Primitiva de rede cúbica de face centrada AlAs estrutura zincblend.[8]

Apenas com célula unitária composta por dois átomos na base, não é possível descrever a liga, para descrever a liga devemos aumentar a célula, contudo mantendo a estrutura, conseqüentemente ao aumentar a célula, mantendo a estrutura, aumentamos a quantidade de cátions e ânions.

A Figura 4 mostra uma supercélula contendo 16 átomos, 8 cátions e 8 ânions. O elevado número de cátions permite simular uma liga ternária. A liga calculada é descrita por  $Al_xGa_{1-x}As$ , onde  $x$  representa a concentração de átomos que foram substituídos, ou seja, quando  $x=0$ , temos um material binário neste caso GaAs pois não teremos substituição de material, quando  $x= 1$  teremos AlAs, pois não teremos material proveniente de Ga. Em concentrações intermediárias o átomo de Ga é substituído pelo átomo de Al, portanto, na célula com 16 átomos o Ga foi substituído um a um, possibilitando de simular a liga.

Como a célula se repete infinitamente no cristal, realizamos os cálculos para a célula com 16 átomos para as concentrações presentes na Tabela 1.



**Figura 4:** Estrutura Zincblend com 16 átomos, sendo os átomos da célula primitiva GaAs.[8]

A partir das constantes de força Utilizamos a lei de Vegard que assume um comportamento linear, para calcular a variação da concentração do material, aplicamos a lei de Vegard aos parâmetros demonstrados.

Na Tabela 1, a primeira coluna (80) corresponde a 8 átomos de Al e 0 átomos de Ga, representando o AlAs. A última coluna (08) corresponde a 0 átomos de Al e 8 átomos de Ga, representando o GaAs. Realizando a substituição do Al por Ga, encontramos 7 configurações intermediárias entre o AlAs e o GaAs.

Aplicamos a lei de Vegard ao parâmetro de rede ( $a$ , Å), à carga efetiva do material (coulomb), à  $\alpha$  constante de força de estiramento ( $\text{eV}/\text{Å}^2$ ) e à  $\beta$  constante de força angular ( $\text{eV}/\text{Å}^2$ ). Na Tabela 1 os índices 11 correspondem a ligações com os primeiros vizinhos (interações cátion-ânion) e os índices 12 e 22 correspondem a ligações com os segundos vizinhos (interações ânion-ânion ou cátion-cátion). Para não representar uma liga ternária, mas não uma liga binária intermediária, a lei de Vegard não foi aplicada às massas.

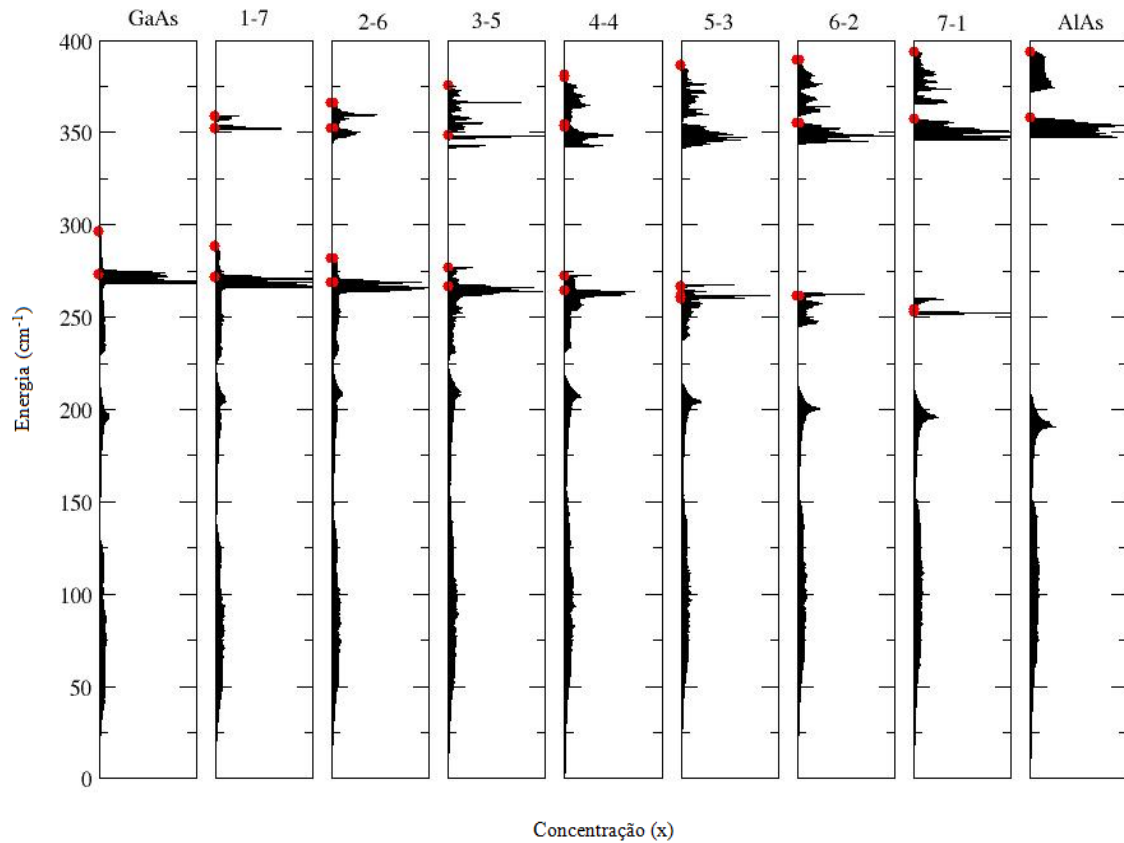
A partir dos parâmetros intermediários foi possível calcular a curva de dispersão do AlGaAs para cada concentração, juntamente com as respectivas densidades de estados vibracionais (DOS), em negrito na Figura 5.

**Tabela 1:** Parâmetros utilizados para determinação dos espectros de fônons e densidade de estados.[8]

AlGaAs	8 0	7 1	6 2	5 3	4 4	3 5	2 6	1 7	0 8
	AlAs								GaAs
A	5,6460	5,6469	5,6478	5,6486	5,6495	5,6504	5,6513	5,6521	5,6530
Carga	0,7000	0,6938	0,6875	0,6813	0,6750	0,6688	0,6625	0,6563	0,6500
$\alpha_{11}$	6,7500	6,8313	6,9125	6,9938	7,0750	7,1563	7,2375	7,3188	7,4000
$\beta_{11}$	0,3750	0,3594	0,3438	0,3281	0,3125	0,2969	0,2813	0,2656	0,2500
$\alpha_{12}$	0,5620	0,5605	0,5590	0,5575	0,5560	0,5545	0,5530	0,5515	0,5500
$\beta_{12}$	-0,1250	-0,1594	-0,1938	-0,2281	-0,2625	-0,2969	-0,3313	-0,3656	-0,4000
$\alpha_{22}$	0,1880	0,2020	0,2160	0,2300	0,2440	0,2580	0,2720	0,2860	0,3000
$\beta_{22}$	-0,1250	-0,0844	-0,0438	-0,0031	0,0375	0,0781	0,1188	0,1594	0,2000

O comportamento vibracional dos modos LO e TO são basicamente simples, o LO apresenta um movimento dos vetores de polarização na mesma direção do vetor de onda  $k$ , enquanto os modos TO eles estão vibrando na transversal em relação ao vetor de onda. Partindo deste princípio e dos resultados do cálculo da curva de dispersão, e analisando o comportamento vibracional da liga AlGaAs no ponto gama para diferentes concentrações, obtivemos pontos LO e TO que estão destacados na Figura 5 como pontos em vermelho.

Neste caso em específico há dois modos LO e dois modos TO indicando um comportamento de fônon *two-mode*.

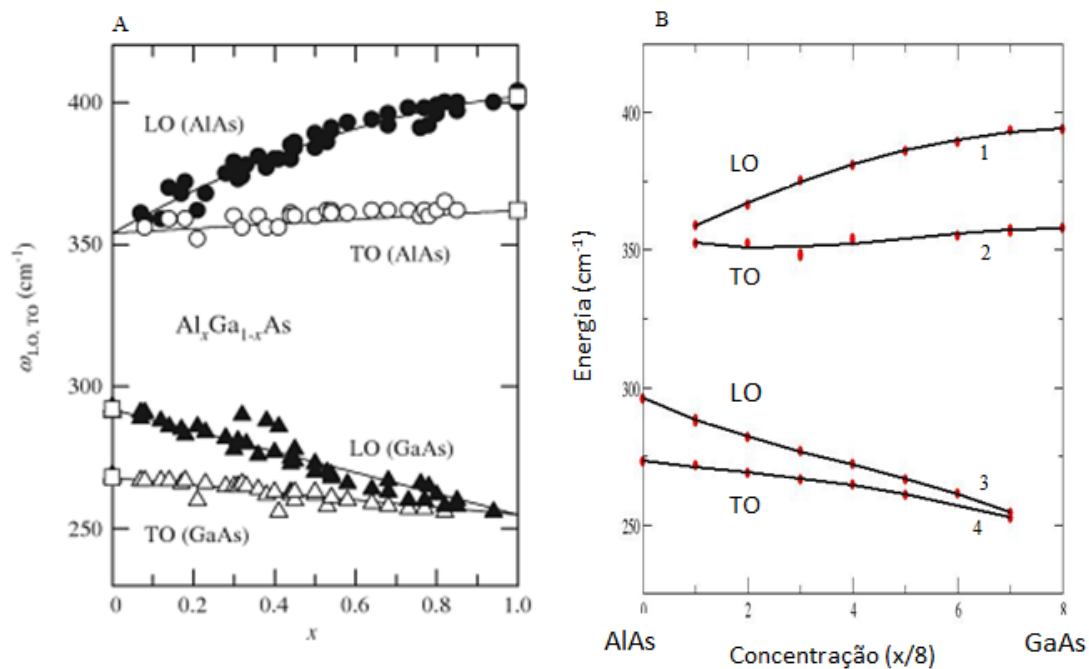


**Figura 5:** Gráficos da densidade de estado da liga ternaria AlGaAs.[8]

Na Figura 5 verifica-se que ao substituir um átomo de Ga por um átomo de Al, há o aparecimento de uma densidade de estados na região acima de  $350 \text{ cm}^{-1}$ , indicando que as vibrações nesta região estão associadas ao Al. O aumento no número de substituições pelo átomo de Al promove um aumento da densidade de estados nesta faixa de energia, tendendo à densidade dos AlAs.

Na Figura 5 a densidade de estados referente a região ramos acústicos apresenta pouca alteração com a variação da concentração indicando que esta região pode estar mais associada ao As.

A Figura 6 [9] apresenta dois gráficos um experimental (A) e o teórico (B) para o comportamento dos fônons TO e LO em gama. Os pontos presentes na Figura 6 B, são os mesmos da Figura 5, no entanto as linhas foram obtidas por meio de uma regressão quadrática. A comparação entre os gráficos mostra que os nossos resultados apresentam comportamentos muito próximos do resultado experimental.



**Figura 6:** A - Gráfico Experimental da densidade de estado da liga AlGaAs. [9] B - Gráfico da densidade de estado obtido com a regressão quadrática. [8]

O ajuste obtido na Figura 6 A, designado pela linha contínua, foi obtida por meio da aplicação do método MREI, nela vemos que o método gera um comportamento para os extremos  $x = 0$  e  $x=1$ . Porém, o gráfico indica uma convergência dos dados antes destas concentrações, fato que é reproduzido por nossos resultados.

## CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O método parametrizado (VFF) utilizado por nós se mostrou muito eficiente, pois obtivemos resultados muito próximos aos resultados experimentais. Este método é interessante pela sua praticidade e pela estabilidade nos resultados, os parâmetros que utilizamos estão bem postos na literatura, esses parâmetros permitiram de modo simples e eficiente reproduzir a dinâmica das ligas, prever os espectros de fônons e a densidade de estado do material.

Quando comparamos o método MREI com o método parametrizado VFF e Ewald que utilizamos, observamos que o método MREI deixa a desejar em alguns aspectos. O método MREI não permite prever o comportamento da curva de dispersão dos fônons, na realidade este método está limitado apenas aos pontos de alta simetria no ponto  $\Gamma$ . No caso dos métodos VFF e Ewald conseguimos analisar todos os pontos da curva de dispersão dentro da zona de Brillouin, este método permite uma análise mais apurada do comportamento do material, pois, uma vez que conseguimos analisar todos os pontos podemos observar alterações em qualquer ponto, proporcionando assim investigar outros fatores não só em gama.

Com os resultados que obtivemos podemos ressaltar que este método pode ser aplicado a outros materiais, desde que esses materiais estejam em função dos parâmetros que utilizamos. Como exemplo temos o caso do AlGaN que ainda não se sabe muito sobre suas características e seu comportamento atípico. Neste caso é um material que apresenta uma característica interessante e controversa, resultados na literatura confrontam entre si, pois alguns acreditam que ele se comporta com one-mode enquanto outros defendem a ideia que seu comportamento é de two-mode. Nosso método como promessa futura, pode ser aplicado para a verificação dessa característica interessante.

## REFERÊNCIAS

- [1] Charles Kittel; Introdução à Física do Estado Sólido; 5ª Edição; Universidade Federal do Rio de Janeiro; (1978).
- [2] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin; Solid State Physics, Harcourt Brace College Publishers, New York (1976).
- [3] Sadao Adachi; Properties of Aluminium Gallium Arsenide; The Institution of Electrical Engineers, London, United Kingdom (1993)
- [4] Adriano Manoel dos Santos; Tese Doutorado: Propriedades Vibracionais dos Nitretos do Grupo 3 e de suas Ligas; Universidade de São Paulo; (2004).
- [5] G. P. Srivastava, The Physics of Phonons, Adam Hilger, Philadelphia (1990)
- [6] R. M. Feenstra, R. J. Hauenstein, and T. C. McGill, Phys. Rev. B 28, 5793 (1983)



- [7] K. Kunc and O. H. Nielsen, *Computer Physics Communications* 181 (1979).
- [8] Adriano Manoel dos Santos; Projeto de Pesquisa; Interações de Longo e Curto Alcance nos Processos Vibracionais de Estruturas Cristalinas; (2010)
- [9] Sadao Adachi; *Properties of Semiconductor Alloys Group-IV, III-V and II-VI semiconductors* University Gumma, Gumma, Japan (2009).