



ENEPEX

ENCONTRO DE ENSINO,
PESQUISA E EXTENSÃO

8° ENEPE UFGD • 5° EPEX UEMS

CARACTERIZAÇÃO TEÓRICA DO COMPORTAMENTO DOS FÔNONS EM GAMA DO INGAAS CÚBICO

Brenda Camila Rodrigues Prates¹; Adriano Manoel dos Santos².

UEMS, Caixa Postal 351, 79804-970, Dourados-MS, Email: breprates@gmail.com
PIBIC/UEMS/CNPq¹. Bolsista de Produtividade em Pesquisa do CNPq².

RESUMO

Os compostos InAs, AlAs e GaAs são binários de estrutura cristalina comumente utilizados como materiais de substrato no crescimento epitaxial de semicondutores, como o índio arseneto de gálio (InGaAs); arseneto de gálio alumínio (AlGaAs); entre outros, para a fabricação de dispositivos optoeletrônicos. Quando comparados com os dispositivos feitos à base de silício, os arsenetos podem apresentar vantagens em suas propriedades eletrônicas. O objetivo deste trabalho é o estudo das propriedades vibracionais de tais compostos, através da utilização da Teoria Clássica do Cristal Harmônico. Tal teoria, juntamente com métodos como o Valence Force Field e a Soma de Ewald permitem a determinação da matriz dinâmica, estabelecendo assim, o comportamento vibracional dos arsenetos binários e das ligas ternárias. Um método semi-empírico é apresentado e comparado com outros métodos conhecidos, como o "Random Element Isodisplacement", como alternativa para obtenção da descrição do comportamento de vibração da liga. Foram analisados e interpretados dados experimentais disponíveis na literatura relativos às propriedades vibracionais para os binários GaAs, InAs e o ternário InGaAs.

Palavras-Chave

MREI, InGaAs, arsenetos.

INTRODUÇÃO

Os compostos InAs, AlAs e GaAs são binários de estrutura cristalina comumente utilizados como materiais de substrato no crescimento epitaxial de semicondutores, como o índio arseneto de gálio (InGaAs); arseneto de gálio alumínio (AlGaAs); entre outros, para a fabricação de dispositivos optoeletrônicos. Quando comparados com os dispositivos feitos à base de silício, os arsenetos podem apresentar vantagens em suas propriedades eletrônicas. Seus elétrons, por exemplo, possuem maior mobilidade e velocidade. Como resultado, tais dispositivos tendem a possuir menos ruídos quando submetidos a altas frequências. Tais propriedades fazem com que tais ligas sejam utilizadas em circuitos integrados de telefones celulares e satélites de comunicação. [1]

Seu amplo bandgap permite também que tais compostos possam ser utilizados na absorção e emissão de luz eficientemente. Sendo aplicados desde o início da década de 60 na construção de diodos lasers. Avanços em pesquisas apontam para eficiência destas ligas em células fotovoltaicas e detectores de radiação x e infravermelha.[2]

Diante disso, observa-se a importância da Física do Estado Sólido no desenvolvimento de estudos de tais compostos e aplicação de métodos que demonstrarão suas propriedades eletrônicas e elétricas, permitindo avanços na fabricação dos dispositivos citados.

O uso da Teoria Clássica do Cristal Harmônico permite a descrição do comportamento vibracional de estruturas cristalinas a partir do conhecimento da chamada matriz dinâmica. Sendo um modelo no qual as ligações são representadas por molas. Porém, para uma descrição mais aprimorada do fenômeno, é necessário descrever a energia potencial de interação em função de interações de longo e curto alcance, que são respectivamente, as ligações eletrônicas e iônicas. [3] Tal teoria, juntamente com métodos como o Valence

Force Field, que representa a interação de longo alcance, e a Soma de Ewald, que representa a interação de curto alcance, permite a determinação da matriz dinâmica, estabelecendo assim, o comportamento vibracional de compostos binários e ligas ternárias. [4]

O aumento da capacidade computacional e a evolução de métodos que agilizam os cálculos numéricos possibilitaram, de maneira geral, um grande avanço no estudo dos semicondutores. Esta evolução resulta numa capacidade de aplicar métodos de exatidão cada vez maior; e ao mesmo tempo fomenta a sinergia entre a teoria e a prática, fornecendo previsões mais precisas, de maneira em que as teorias podem ser validadas por comparação com resultados experimentais.

Os chamados métodos *ab initio* exibem vantagens significativas para o estudo das propriedades eletrônicas e vibracionais de sistemas complexos, pois estes métodos necessitam de poucos parâmetros para serem executados. No entanto, uma das suas desvantagens é o elevado custo computacional, pois exigem uma grande capacidade de memória, tendo em vista que os cálculos rodados são pesados. Já nos métodos parametrizados, uma série de aproximações numéricas e ajustes de parâmetros a dados experimentais são feitos para reduzir o esforço computacional. [5]

Outro método que propõe o estudo de modos vibracionais dos fônons é o REI, que posteriormente foi aperfeiçoado, por Chang e colaboradores, dando origem ao *Modified Randon Element Isodisplacement* (MREI), que leva em conta a polarização do campo elétrico. [3]

O modelo assume que no limite de comprimento de onda na zona central, os ânions e os cátions de espécies semelhantes vibram com a mesma fase e amplitude; e que a força exercida pelos íons é fornecida por uma média estatística da interação deste com seus vizinhos.

O método é baseado na Mecânica Clássica e usa as equações de movimento para obtenção de resultados. A partir dos efeitos de campos elétricos locais, que dependem da estrutura da rede, podem-se estabelecer regras que permitem concluir quando uma liga apresentará comportamentos do tipo *onemode* ou *two-mode*.

Para uma liga ternária, como no caso deste estudo, descrita por $A_xB_{1-x}C$, sendo a massa do átomo B (m_B) e a massa do átomo A (m_A), tem-se que: se a massa reduzida (μ) entre os elementos A e C, que compõem a liga, for maior que

massa do elemento B; ou se μ entre os elementos B e C for menor que a massa do átomo A; então, os modos ópticos deverão apresentar um comportamento do tipo *two-mode*. Em casos onde alguma destas relações não é válida, os ramos ópticos possuirão um comportamento do tipo *one-mode*. [3]

Apesar da facilidade na obtenção de conclusões acerca dos comportamentos das ligas, esse método apresenta limitações. Não se consegue gerar curvas de dispersão, por exemplo. Além da desvantagem de apenas levar em consideração as interações recorrentes entre os primeiros vizinhos, não descrevendo assim, o comportamento nas extremidades.

Com a criação de métodos alternativos ao método MREI, pode-se descrever o comportamento dos fônons fora do ponto gama. A proposta deste projeto foi o uso de um método mais abrangente, que permitisse uma análise mais aprofundada da dinâmica de vibração.

O modelo proposto permitiu a verificação dos pontos de alta simetria, teórica e experimentalmente; e juntamente com o Valence Force Field e a Soma de Ewald, pode-se determinar as constantes elástica e carga efetiva, respectivamente. A partir das constantes encontradas e da aplicação da Lei de Vegard, foi possível estudar o comportamento vibracional da liga ternária para diferentes tipos de concentrações, assim como obter os gráficos apresentados.

A seguir, explana-se de maneira breve o conceito deste modelo, apresentando os termos nas equações estabelecidas e os resultados dos modos de vibrações a partir do método proposto.

2.0 Teoria

2.1 Matriz Dinâmica e Métodos de estudo

Para o cálculo das energias e dos modos vibracionais da rede cristalina faz-se necessário a apresentação da matriz dinâmica e dos modelos de interação. Assim como os métodos necessários para o cálculo da densidade de estados.

A partir do desenvolvimento teórico matemático da matriz dinâmica de uma rede cristalina, tem-se: [4]

$$(D - I\omega^2)W = 0 \quad (1)$$

onde:

$$D_{ij}(KK'|\vec{k}) = \sum_{l''} \frac{\phi_{ij}^0(0K, l''K') e^{i\vec{k}[\vec{R}(l''K') - \vec{R}(0K)]}}{\sqrt{M_K M_{K'}}}, \quad (2)$$

A Equação (1) é apresentada na forma matricial, onde os termos são: D a matriz dinâmica; I a matriz identidade; ω a frequência dos fônons (auto-valor) e W o chamado vetor polarização (auto-vetor).

Outro fator importante para a determinação do comportamento vibracional da rede, e, portanto, sua curva de dispersão, é conhecimento dos termos que compõem a *Equação (2)*, conhecida na literatura como matriz dinâmica. Tem-se que: K e K' são dados pela posição dos átomos na rede; M_K e $M_{K'}$ representam as massas de cada um dos átomos; l é a célula escolhida; $(\phi_{ij}^0(lK, l'K'))$, é o tensor constante de força atômica; i e j são as coordenadas cartesianas.

Sendo assim, necessita-se da posição dos átomos na rede ($R(lK)$), o tensor de força e o valor das massas dos átomos (Mk). Conhecendo-se as redes diretas e da base dos átomos, determinam-se a posição de um átomo em uma célula e a posição dos átomos vizinhos.

Observa-se que a construção da matriz dinâmica independe da escolha da célula l tomada como base para cálculo, devido à sua simetria translacional.

Conhecendo os termos que compõe o tensor constante de força atômica $(\phi_{ij}^0(lK, l'K'))$, e a posição dos átomos na rede cristalina, os elementos da matriz dinâmica ficam completamente determinados. Com o uso de tais elementos e da equação (1) é possível determinar as energias dos fônons associados a cada vetor de onda (\vec{k}), em qualquer direção dentro da primeira zona de Brillouin.

A partir do desenvolvimento matemático e do então entendimento para a determinação da matriz dinâmica de uma rede cristalina, pode-se explicar

sobre os métodos que permitem o cálculo do tensor constante de força e consequentemente das frequências de vibração.

➤ *Método Valence Force Field*

Este método é utilizado no tratamento das interações eletrônicas, pois sua aplicação pode ser estendida ao estudo da dinâmica de rede de estruturas cristalinas. As forças responsáveis pelas interações atômicas são geralmente denominadas de forças de curto alcance, que são derivadas dos elétrons de valência, tendo assim, um curto raio de ação. Neste modelo as ligações entre os átomos podem ser representadas por meio de molas e, consequentemente, a energia elástica pode ser expressa em termos de deslocamentos internos (\vec{u}) dos átomos que originam variações nos comprimentos e ângulos das ligações, conhecidas como coordenadas de valência.

O modelo descreve a energia potencial vibracional em termos de duas constantes de força, ou seja, de dois parâmetros: [4,6]

$$U = \frac{1}{2} \sum_{lK} \sum_{l'K' \neq lK} [\alpha(lK, l'K') |(\vec{u}(lK) - \vec{u}(l'K')) \cdot \vec{e}(lK, l'K')|^2 + \beta(lK, l'K') |(\vec{u}(lK) - \vec{u}(l'K')) \cdot \vec{e}(lK, l'K')|^2] \quad (3)$$

Onde:

$$\vec{e}(lK, l'K') = \frac{\vec{R}(lK) - \vec{R}(l'K')}{|\vec{R}(lK) - \vec{R}(l'K')|} \quad (4)$$

representa o versor que indica a direção entre as posições dos átomos lK e $l'K'$ (versor direcional). Os parâmetros $\alpha(lK, l'K')$ e $\beta(lK, l'K')$ presentes na energia são chamados, respectivamente, constante de força de estiramento e constante angular.

Na equação (3) o termo da somatória que contem a constante de força α , a ligação entre os vetores deslocamentos e o versor direcional é dada por um produto escalar, enquanto no termo que contém a constante de força β , a ligação é dada por um produto vetorial. A inclusão de outros parâmetros no modelo permite simular a interação para os segundos vizinhos, possibilitando assim, uma descrição mais realista das propriedades vibracionais dos compostos.

O referido tensor constante de força, calculado a partir da derivada segunda da energia em função da variação da posição, será obtido por meio de uma expressão que dependerá de α e β .

Assim, na representação das interações de curto alcance as constantes de força para as ligações, com os primeiros e segundos vizinhos, são dadas por: α_1 e β_1 , α_2 e β_2 ; respectivamente.

Considerando que os demais termos podem ser obtidos por parâmetros empíricos, o cálculo da matriz dinâmica quando relacionada à interação de curto alcance (c.a.), expressa por (1), será escrita como em função das constantes de força:

$$D^{c.a.} \equiv D^{c.a.}(\alpha_1, \beta_1; \alpha_2, \beta_2; \alpha_3, \beta_3; \dots) \quad (5)$$

Sendo α_1 e β_1 as constantes de força de ligação com os primeiros vizinhos, α_2 e β_2 as ligações com os segundos vizinhos e assim por diante.

➤ *Método do Íon Rígido*

Já as interações iônicas implicam em um novo termo na energia potencial, a energia potencial iônica. O método utilizado para tratar essas interações considera que as cargas iônicas podem ser aproximadas por cargas pontuais centradas no núcleo dos átomos.

De acordo com Ewald, a matriz dinâmica, quando associada à ionicidade pode ser descrita por: [4,7]

$$D^{l.a.}(KK'|\vec{k}) = -M^{\frac{1}{2}}e^*Be^*M^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

onde e^* é a matriz correspondente à carga elétrica efetiva e M é a matriz relativa às massas dos átomos da base. A matriz B é obtida a partir do conhecimento da rede cristalina e da rede recíproca.

Sendo assim, a matriz dinâmica que representará a interação coulombiana devido à ionização dos átomos, será descrita por:

$$D_c \equiv D^{l.a.}(e^*) \quad (7)$$

Portanto, a matriz dinâmica geral é definida pela soma da matriz correspondente à interação de curto e longo alcance:

$$D = D^{c.a.}(\alpha_1, \beta_1; \alpha_2, \beta_2; \alpha_3, \beta_3; \dots) + D^{l.a.}(e^*) \quad (8)$$

Os parâmetros a serem determinados são α , β e e^* . Assim para determinação da curva de dispersão de um material iônico, necessita-se o conhecimento sobre fônons referentes a certos pontos da rede recíproca.

Como já foi apresentada, a construção da matriz dinâmica depende da determinação dos valores da constante de força e carga elétrica efetiva. Só assim podem-se calcular as energias e os modos associados a cada fônon.

2.3 Identificação do comportamento vibracional

Cada átomo da base (p) apresenta três graus de liberdade (x, y, z), desta forma o cristal apresenta como um todo $3Np$ graus de liberdade (modos de vibração), onde N é o número de células. Desta forma a relação de dispersão ω contra k possui dois tipos de ramos, conhecidos como: óptico e acústico. Sendo o primeiro com $(3p - 3)N$ ramos e o segundo, igual a $3N$ ramos. [8,9]

Os ramos acústicos apresentam uma relação linear entre a frequência e o vetor de onda por longos comprimentos de onda, essas frequências tendem a zero com comprimento de onda maior $\left(k = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$. Ou seja, se o comprimento de onda tende ao infinito, isto corresponde a um deslocamento no cristal, conseqüentemente sua energia tende a zero no ponto Γ . Nestes ramos os ânions e cátions da liga vibram na mesma direção. [8,9]

Já os ramos ópticos, que são assim denominados pois suas frequências de vibração são próximas do visível, são aqueles cujo comportamento é horizontal e praticamente linear no ponto Γ . E ainda, cujos cátions e ânions da liga vibram em direções opostas. [8,9]

Dentro desta diferenciação de ramos existe ainda uma subdivisão, nos quais podem ser classificados como: transversais, aqueles em que os fônons

vibram perpendicularmente ao vetor de onda; e longitudinais, quando os fônons vibram paralelamente ao vetor de onda.

Deste modo, os comportamentos vibracionais esperados, e posteriormente observados neste estudo, para o espectro de fônons dentro da primeira zona de Brillouin, podem ser: longitudinais ópticos (LO) e acústicos (LA); e transversais ópticos (TO) e acústicos (TA).

3.0 Discussões/ Resultados

3.1 Super-célula

De acordo com a aproximação harmônica, para determinar o comportamento vibracional dos átomos de um cristal perfeito não é necessário utilizar nos cálculos todos os átomos dispostos na rede, já que todas as propriedades físicas do cristal podem ser descritas a partir de uma célula unitária que, devido a simetria translacional da rede pode representar o cristal como um todo.

Desta forma, ao mudar um determinado átomo da base modifica-se toda a estrutura do cristal. Sendo assim, quando o número de átomos da base em uma célula não é o suficiente para descrever uma liga, torna-se necessário a construção de uma super-célula no intuito de ajudar na estimativa das propriedades físicas das estruturas cristalina dos compostos estudados. De modo que se analise a menor estrutura que se repete na rede e que, conseqüentemente, permita um cálculo mais rápido.

Neste estudo, os dois átomos mostrados na *Figura 1*, que representam o GaAs, não são suficientes para se descrever a liga $In_xGa_{1-x}As$. Logo, aumentamos o número de átomos da base para dezesseis (*Figura 2*), de tal forma que sua estrutura e tipo rede foram mantidos. A partir desse novo modelo pode-se então montar uma liga de $In_xGa_{1-x}As$, para concentrações $0 < x < 1$.

A liga ternária foi obtida com sucessivas trocas do Ga na base, *Figura 2*, por átomos de In até a completa transformação da célula no InAs. Assim, pode-

se simular alguns tipos particulares de concentrações, sendo essas, múltiplas de $1/8$, já que existe um número limite de átomos.

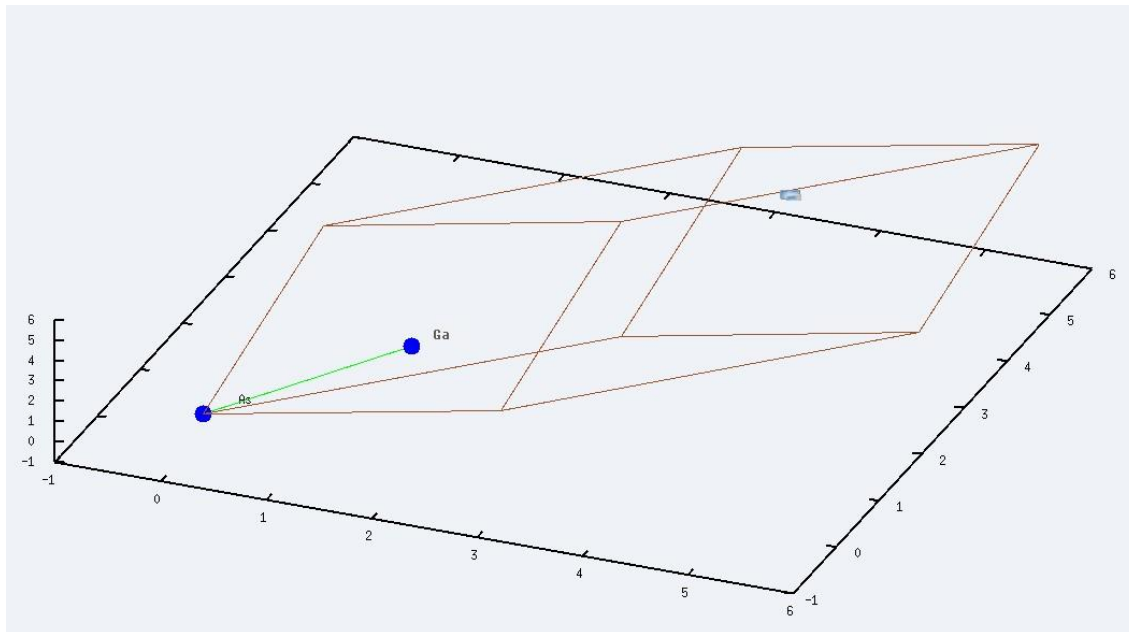


Figura 1 - Ligação entre dois átomos, Ga e As, numa rede cúbica de face centrada e estrutura zinblende, representando o cristal GaAs. [10]

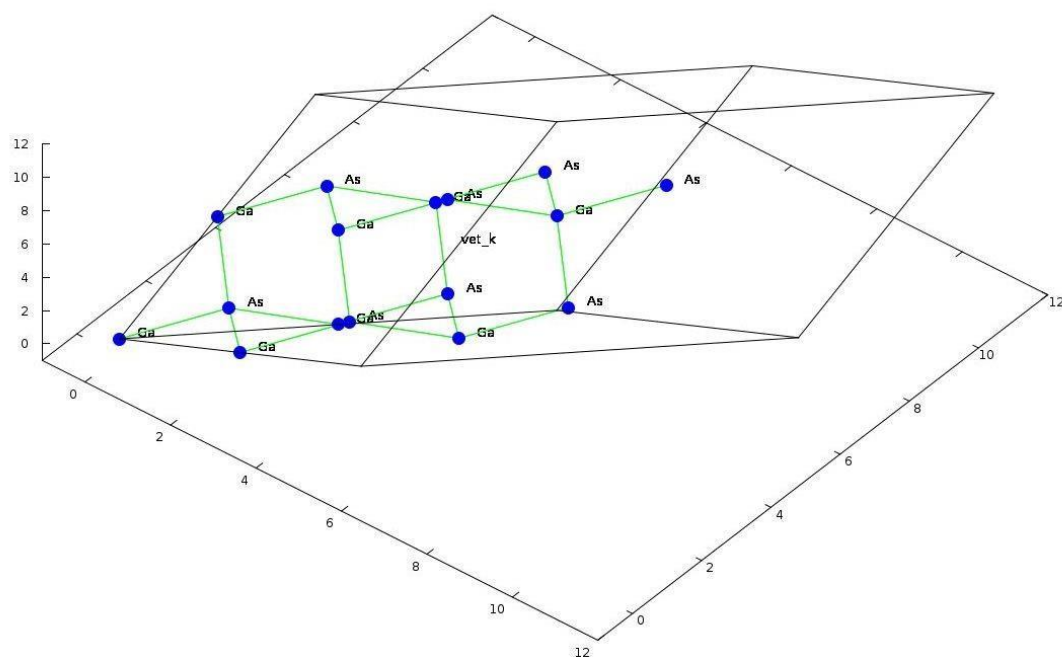


Figura 2 – Ampliação da rede apresentada na Figura 1. Célula com 16 átomos, representando a estrutura zinblende do GaAs, numa rede cúbica de face centrada. Célula montada para o cálculo da curva da densidade de estado das ligas.

3.1.2 Lei de Vegard

Uma das vantagens no crescimento das estruturas ternárias compostas por arsenetos, reside na pequena diferença nos parâmetros de rede e dos coeficientes de expansão térmica dos binários que os compõem. A lei de Vegard, de maneira geral, interpola os parâmetros de rede de ternários a partir dos parâmetros de rede dos binários constituintes. [2,3]

No caso de soluções bem definidas, ocorre com frequência que a célula unitária sofra uma contração ou uma expansão com a mudança de sua composição. A variação do tamanho da célula unitária, muitas vezes obedece a uma relação linear. Embora a postulação dessa lei seja a partir de evidências empíricas, vários casos de desvios positivos e negativos foram documentados. No entanto, suas bases teóricas não foram exploradas de forma crítica.

No método proposto neste estudo, tal lei foi aplicada não só nos parâmetros de rede (no caso de sua utilização no MREI), como também foi usada na determinação das constantes de forças; sendo ambas informações necessárias para se obter as curvas de dispersão da liga para as possíveis concentrações. Portanto, na aplicação da lei de Vegard assumimos que os parâmetros podem variar de forma linear, permitindo a descrição do processo vibracional na liga InGaAs.

3.1.2 Parâmetros das Ligas

A partir de resultados teóricos e experimentais, designados pelos pontos nas Figuras 3 e 4, foi possível, a partir do nosso modelo de interação, determinar as constantes de força e carga elétrica efetiva que melhor reproduzissem o comportamento vibracional do GaAs e do InAs.

A seguir as Figuras 3 e 4 mostram a representação gráfica do espectro vibracional dos compostos binários GaAs e InAs, respectivamente, calculados com os parâmetros definidos a partir da *Tabela 1*.

Tabela 1: Constante de força e cargas elétricas efetivas calculadas a partir de ajustes obtidos através de resultados teóricos e experimentais, da literatura. As constantes de força são dadas em $eV/\text{Å}^2$ e a carga elétrica efetiva em $1,6 \times 10^{-19}C$. [10]

GaAs				
$\alpha_1 = 10,50$	$\beta_1 = -0,35$	$\alpha_2 = 1,30$	$\beta_2 = 0,00$	$e^* = 0,775$
InAs				
$\alpha_1 = 10,50$	$\beta_1 = -0,35$	$\alpha_2 = 0,70$	$\beta_2 = 0,00$	$e^* = -0,775$

Comparando-se as Figuras 3 e 4, nota-se que o arseneto de gálio e o arseneto de índio, dentro da primeira zona de Brillouin, apresentam características muito próximas tanto na curva de dispersão dos fônons, quanto na densidade de estados (DOS). Observa-se também que o comportamento dos ramos acústicos e ópticos apresentados pelas estruturas são bastantes similares, de modo que as curvas de dispersão entre elas são bem parecidas; contudo, a energia vibracional no GaAs é maior que a energia do InAs.

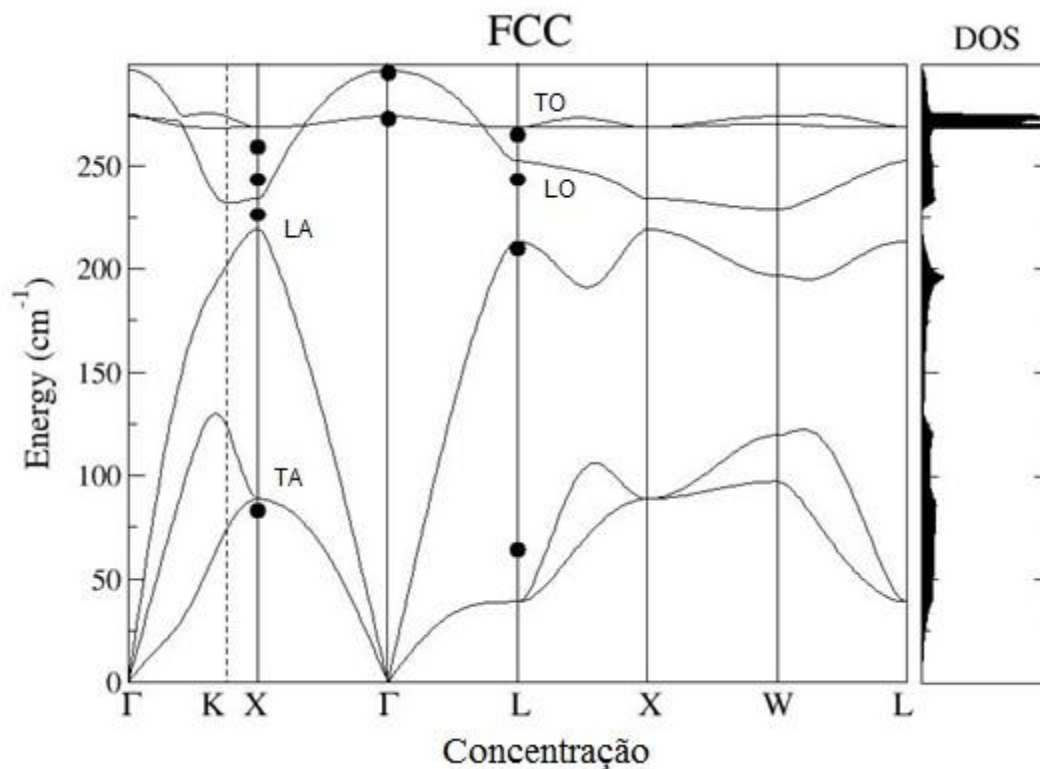


Figura 3 - Curva de dispersão de fônons e densidade de estados vibracionais do binário GaAs, com seus respectivos ramos identificados. [10]

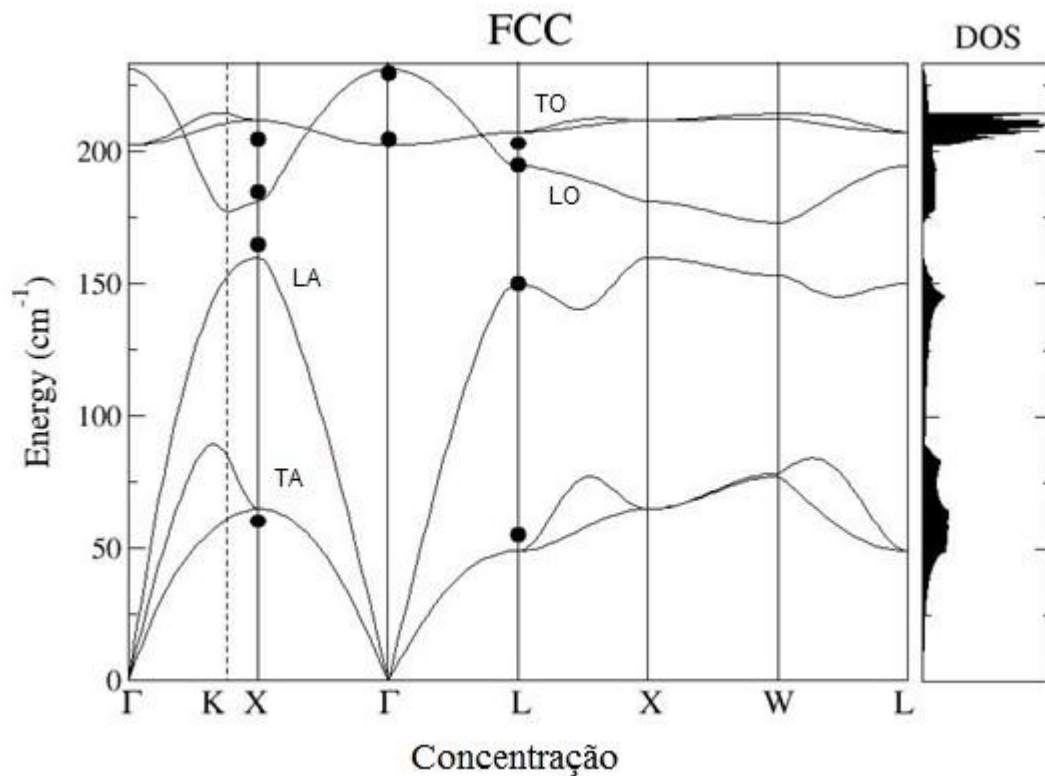


Figura 4 - Curva de dispersão de fônons e densidade de estados vibracionais do binário InAs, com seus respectivos ramos identificados. [10]

Para a obtenção do comportamento vibracional da liga, primeiramente foi efetuada a montagem da super-célula, célula com 16 átomos (Figura 2). A partir desta super-célula foi possível obter a liga ternária $In_xGa_{1-x}As$ por meio da substituição dos cátions Ga e In na rede. A partir de nosso modelo semiempírico, juntamente com os dados das constantes de forças intermediárias e carga efetiva calculadas pela lei de Vegard foi possível obter os valores das energias (autovalores) e seus correspondentes vetores de polarização (autovetores). Com essas duas informações, observou-se o comportamento dos fônons, selecionando e identificando os modos TO, LO, TA e LA, obtidos em Gama. Associando o TO a um movimento vibracional onde os cátions e ânions se deslocam paralelamente entre si, porém em sentidos opostos, e perpendiculares ao vetor de onda, e associando o LO a um movimento onde os cátions e ânions era paralela entre si, porém em sentidos opostos, e paralelas ao vetor de onda. Os pontos os pontos foram selecionados e destacados na Figura 5, apresenta o

gráfico com a densidade de estados para respectivas concentrações da liga, mostrada na imagem abaixo:

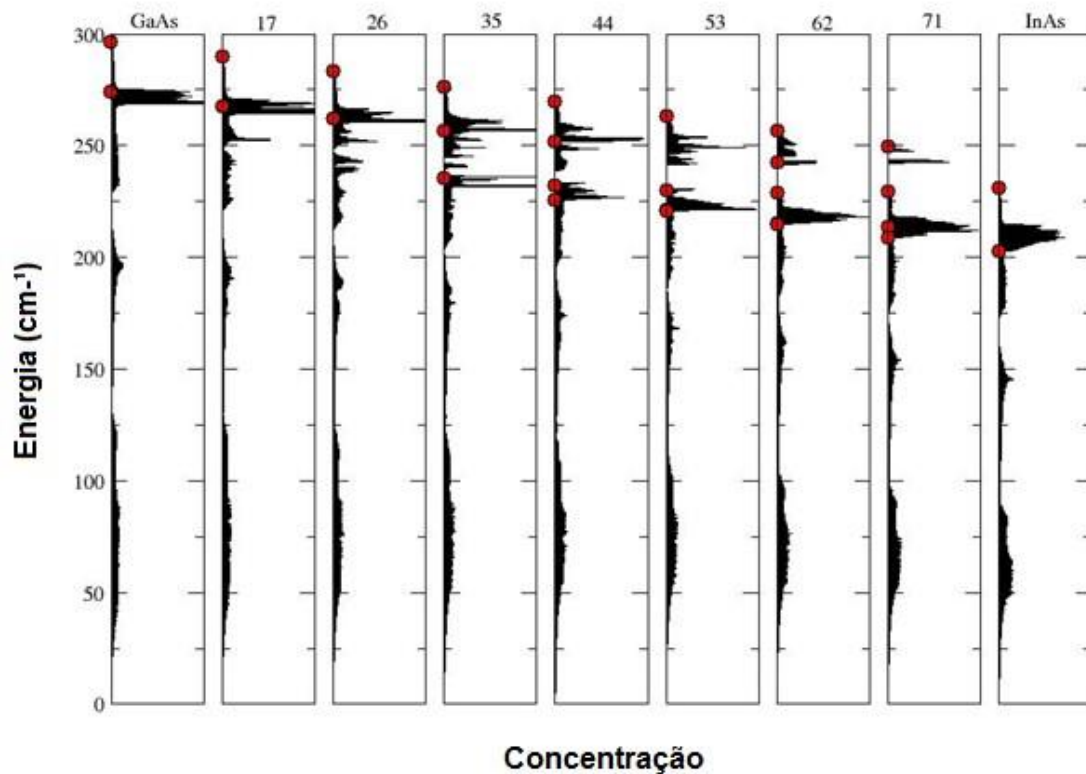


Figura 5 – Resultado do cálculo para a densidade dos estados considerando a variação das concentrações dos átomos de Ga e In em uma supercélula com 16 átomos. Nos extremos do gráfico estão as densidades de estados do GaAs e do InAs. Os pontos em vermelho indicam os fônons LO e TO obtidos com o cálculo.

A Figura 5 apresenta o comportamento da densidade de estados da liga InGaAs para diferentes concentrações, variando do GaAs até o InAs. Os pontos em vermelho destacam os comportamentos dos fônons LO e TO em função dessas concentrações. Verifica-se também que a presença de um Ga, quando se analisa a concentração no sentido do InAs para GaAs, gera uma mudança significativa na densidade de estado, como na representação 71 da figura acima. Origina-se um valor de energia acima da densidade de estado do InAs, denominado modo localizado.

A partir do gráfico na Figura 5 foi feito um ajuste linear para melhor visualização e análise dos pontos observados em vermelho, gerando assim o gráfico mostrado na Figura 6. Desta maneira pôde-se fazer a identificação dos

fônons tipo LO e TO. As linhas que passam pelos pontos representam o melhor ajuste do comportamento desses fônons.

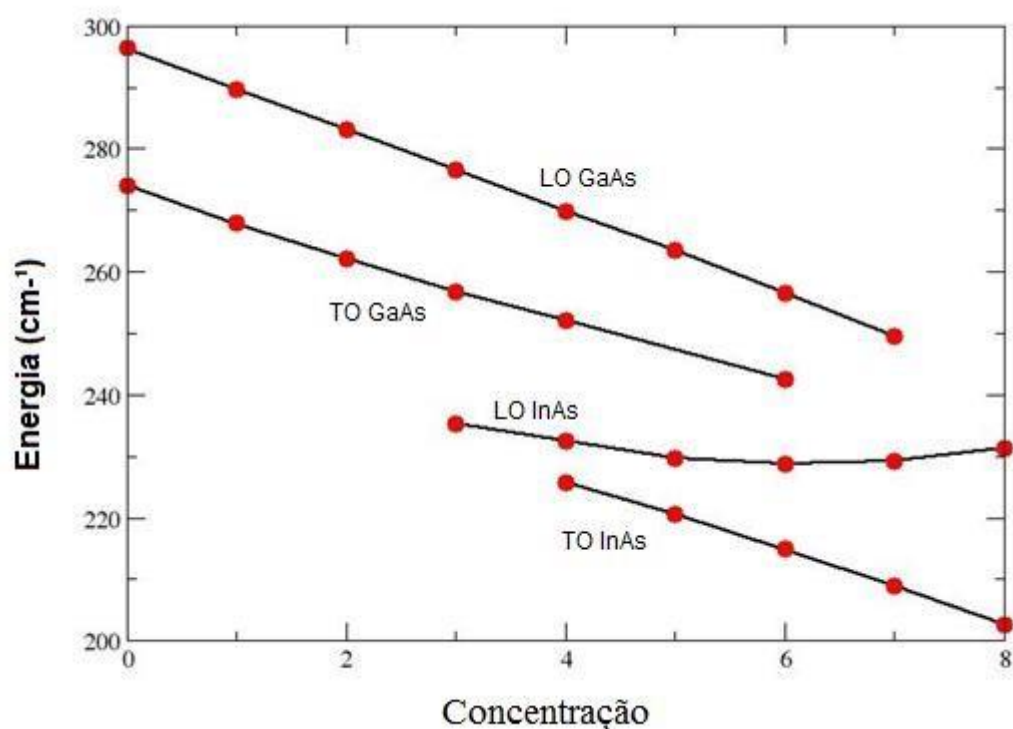


Figura 6 - Regressão linear aplicada aos modos vibracionais dos fônons da liga. Densidade dos estados variando em função da concentração de átomos. Os pontos em vermelho são os mesmos presentes na Figura 5.

Comparando com resultados teóricos, representados por pontos em preto na *Figura 7*, com os experimentais obtidos, observa-se a boa concordância entre eles. [10] Observa-se, que no ponto gama há uma divergência de valores, que não prejudicam os cálculos, que tornam os gráficos ligeiramente diferentes, mas que não alteram a tendência dos resultados.

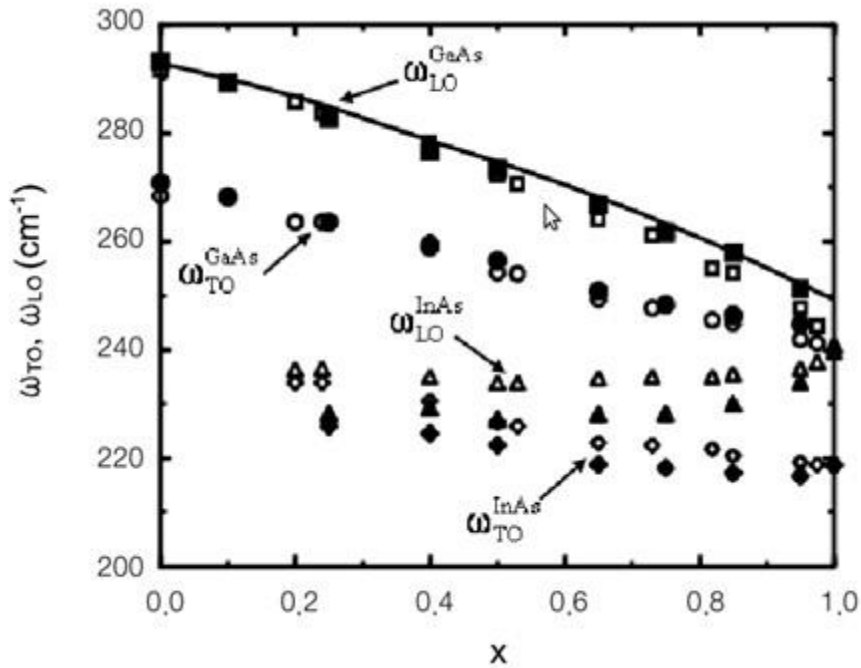


Figura 7 – Dados experimentais da regressão linear aplicada aos modos vibracionais dos fônons das ligas. Densidade dos estados variando em função da concentração de átomos. [11]

4.0 Conclusão

A forma para a energia potencial vibracional proposta se difere do MREI, por exemplo, pois considera a interação de um átomo não só com os primeiros, mas também com seus segundos vizinhos. Outra diferença entre o método apresentado e o MREI, é que o MREI não tem necessariamente um vínculo com a descrição exata da dinâmica vibracional, sendo seu objetivo a descrição dos fônons em gama. Já o nosso modelo semi-empírico é capaz de descrever os fônons para quaisquer pontos dentro da primeira zona de Brillouin.

E ainda, o método proposto contradiz o MREI, que considera a hipótese de um mesmo deslocamento para átomos de mesmas espécies, quando se analisa os auto-vetores dos átomos na base. Ou seja, o MREI afirma que os átomos de mesma espécie apresentam movimentos vibracionais igual, e o método que propusemos mostra que isso não acontece.

A partir do modelo de interação proposto, que considera a presença de uma carga elétrica e de interações de curto alcance, pode-se reproduzir, em geral, os espectros de fônons do GaAs e InAs com uma boa concordância.

Porém, ressalta-se novamente aqui que os resultados obtidos na *Figura 6* diferem-se ligeiramente dos resultados obtidos na *Figura 7*. Isso se deve ao fato de que para as simulações do InAs, foram escolhidos valores teóricos obtidos na literatura para os ramos LO e TO no ponto Γ . Essa pequena diferença poderá ser reparada futuramente com melhores cálculos, já que este não se deu por problemas no método, e sim na escolha dos pontos teóricos; ainda assim, os resultados continuam sendo bastantes satisfatórios.

O bom acordo com os resultados indica que em gama, os fônons do InGaAs apresentam um comportamento do tipo *two-mode*. Sendo assim, pode-se dizer que o modelo proposto também pode ser aplicado não apenas nos compostos estudados, mas também na dinâmica de outros compostos binários e ternários.

REFERÊNCIAS

- [1] SADA O ADACHI; Properties of Semiconductor Alloys Group-IV, III-V and IIVI semiconductors University Gumma, Gumma, Japan (2009).
- [2] YACOBI, B.G.; Semiconductor Materials - An Introduction to Basic Principles.
- [3] SRIVASTAVA, G. P., The Physics of Phonons, Adam Hilger, 1990.
- [4] SANTOS, A. M. Tese de Doutorado “Propriedades Vibracionais dos Nitretos do Grupo III e de suas Ligas”, USP, São Paulo, 2004.
- [5] O. Pagès, A. V. Postnikov, M. Kassem, A. Chafi, A. Nassour, and S. Doyen, Physical Review B, Phys. Rev. B 77, 125208, 2008.

[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] KITTEL, C. Introduction to Solid State Physics, 7a ed., John Wiley & Sons Inc., 1996.

[9] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin; Solid State Physics, Harcourt Brace College Publishers, New York (1976).

[10] SANTOS, A. M.; Projeto de Pesquisa - Interações de curto e longo alcance nos processos vibracionais de estruturas cristalinas. 2010

[11] Eunji Sim, Minwoo Han, Joost Beckers, and Simon de Leeuw, Bull. Korean Chem. Soc. 2009, Vol. 30, No. 4

H.M. T.UT.UNC.UA, G.P. SRIVASTAVAB,*, S. DUMANA – “Lattice dynamics of the zinc-blende and wurtzite phases of nitrides”, 2002.

Optical phonons of hexagonal $Al_xGa_{1-x}N$: Simulation and experiment, JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, 2001