

Transientes Ultra-rápidos de Transporte no Nitreto de Gálio

Clóves G. Rodrigues*, Roberto Luzzi†, Áurea. R. Vasconcellos†

*Núcleo de Pesquisa em Física, Departamento de Física, Universidade Católica de Goiás,
CP 86, 74605-010 Goiânia, Goiás, Brasil

†Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, Brasil

Resumo

Utilizando uma Teoria Cinética Quântica Não Linear, obtida a partir de uma formulação mecânico-estatística, o Método do Operador Estatístico de Não Equilíbrio na forma de Zubarev, obtêm-se as equações que governam a evolução do estado de não equilíbrio de um semiconductor polar intrínseco de gap direto altamente fotoexcitado (plasma fotoinjectado) submetido a um campo elétrico constante. Particularmente, o semiconductor analisado foi o Nitreto de Gálio na forma *zincblende*. São obtidas as equações de evolução temporal para: o momento dos portadores, para a energia dos portadores, a energia dos fônons ópticos longitudinais e transversais.

1 Introdução

O objetivo fundamental da Mecânica Estatística de sistemas longe do equilíbrio é determinar as propriedades termodinâmicas e a evolução temporal de quantidades macroscópicas em termos das leis dinâmicas que governam o movimento das partículas que formam o sistema. Os fenômenos de transporte em sistemas fora do equilíbrio termodinâmico constituem um tema relevante em áreas tão distintas quanto a Física da Matéria Condensada, Físico-Química, Biologia, Engenharia e outras. Todos os sistemas de muitos corpos destas diferentes áreas exibem comportamentos que, a nível macroscópico, acredita-se poderem ser descritos por equações de movimento de algumas variáveis macroscópicas (uma contração do número de variáveis do sistema).

Uma área de testes para a Mecânica Estatística de Não Equilíbrio tem sido o estudo da evolução temporal das excitações elementares de *Plasmas em Semicondutores Altamente Excitados* (PSAE) [1-3]. Um plasma em um semiconductor é um fluido de elétrons e buracos gerados por iluminação ou dopagem, sofrendo influência direta da rede; no caso de fotoinjeção temos um plasma duplo (elétrons e buracos movimentando-se no “background” da rede), e no caso dopado um plasma simples (tipo n de elétrons ou p de buracos).

Propriedades de transporte em semicondutores têm sido vastamente estudadas através de métodos experimentais (técnica de microondas, espectroscopia óptica, etc.) e também por modelos teóricos (soluções aproximadas da equação de transporte de Boltzmann, método de Monte Carlo, etc.) [4,5].

A investigação desses fenômenos ultra-rápidos em semicondutores é de grande interesse, tanto do ponto de vista teórico, pois, envolve a descrição de processos de não equilíbrio (e estão acompanhados por uma vasta produção experimental de notável qualidade), quanto prático uma vez

que tem se tornado indispensável a utilização tecnológica de dispositivos que operem nessas condições ultra-rápidas. Hoje existem transistores que apresentam tempos de trânsito eletrônico que podem ser inferiores a um picossegundo [6]. Para o desenvolvimento de dispositivos de alta velocidade torna-se necessário, então, conhecer em detalhes as propriedades dinâmicas dos elétrons em semicondutores, na escala de tempo de picossegundos (10^{12} s) e de femtossegundos (10^{15} s).

Medidas de propriedades relacionadas a elétrons fora do equilíbrio em semicondutores na escala de pico e femtossegundos constituem um grande desafio ao experimentador. O uso de instrumentação eletrônica de alta velocidade falha nestas escalas de tempo, pois, o melhor instrumento existente deste tipo opera à base de componentes semicondutores e estes apresentam limitações em relação a muitos efeitos físicos que se desejam observar. Assim, a solução é usar uma ferramenta de medida alternativa, com resolução temporal superior: *pulsos de laser ultra-curtos* [7-9] e detecção óptica. Do ponto de vista teórico o estudo dessas situações não apresenta menos dificuldade.

Neste trabalho estudamos a evolução das propriedades de transporte de portadores em um plasma semiconductor duplo partindo de um estado inicial altamente fora de equilíbrio térmico. Para esta finalidade fez-se uso do *Método do Operador Estatístico de Não Equilíbrio* na forma de Zubarev [10,11], que permite a construção de uma Teoria de Transporte Quântica Não Linear, apropriada à descrição do estado macroscópico de sistemas físicos arbitrariamente fora de equilíbrio termodinâmico. Das aproximações teóricas existentes para a dinâmica dos processos de relaxação de sistemas de muitos corpos longe do equilíbrio, o Método do Operador Estatístico de Não Equilíbrio (MOENE) tem se mostrado bastante eficaz no tratamento de sistemas dissipativos para uma grande variedade de problemas físicos.

Atualmente existe um grande interesse em semicondutores de *gap* largo pois heteroestruturas destes materiais podem emitir luz no azul, o que tem grande interesse para aplicações tecnológicas no armazenamento óptico de dados, produção de *displays* com as três cores básicas, lâmpadas para sinais de trânsito, etc. Entre estes materiais podemos destacar os nitretos III-V (GaN, AlN, InN e seus compostos ternários $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$, etc.), compostos de zinco (ZnS, ZnSe, ZnTe, etc. e compostos ternários com Mn, Cd, etc.). Como estes materiais têm recebido mais atenção somente nos últimos cinco anos, não há abundância de trabalhos publicados sobre eles e mesmo dados sobre alguns parâmetros fundamentais [6].

Os nitretos III-V, que são os mais estudados, existem em duas fases, *wurtzite* e *zincblende*. A fase *wurtzite* é a mais comumente crescida, mas considerável progresso tem sido obtido no crescimento de cristais na fase *zincblende*.

Uma das grandes dificuldades do estudo do transporte em semicondutores com campo elétrico aplicado é que há falta de resultados experimentais disponíveis para o regime transiente já que é muito difícil medir fenômenos ultra-rápidos de transporte. Este fato torna difícil a comparação de resultados teóricos com os medidos experimentalmente, daí se reveste de grande importância que se possa obter propriedades ópticas (que são relativamente fáceis de medir) a partir de dados dos transientes de transporte.

2 Método do Operador Estatístico de Não Equilíbrio

Enquanto a Mecânica Estatística das situações em equilíbrio é uma disciplina bem estabelecida, o mesmo não ocorre para as situações de não equilíbrio. Na natureza nem sempre é possível tratar com sistemas em equilíbrio, isto é, com sistemas cujas propriedades macroscópicas são constantes no tempo e não apresentam fluxos de grandezas físicas (energia, massa, etc...) através de seus contornos. Faz-se então necessária, a formulação de uma estatística de não equilíbrio que forneça subsídios teóricos à termodinâmica dos processos irreversíveis, isto é, aqueles que se desenvolvem em sistemas não equilibrados. Um grande número de tratamentos tem sido propostos sem que, até o momento, uma formulação geral tenha sido alcançada [12]. Existem dois problemas básicos: o primeiro é como conciliar a irreversibilidade do comportamento macroscópico com as leis microscópicas da mecânica, que, como se sabe, são reversíveis e o segundo é como obter equações de evolução e transporte generalizadas que descrevem o comportamento do sistema considerado. Essas equações que relacionam a variação do comportamento temporal médio de grandezas físicas observáveis com o

movimento das partículas que o constituem, são equações integro-diferenciais não lineares com amplas aplicações, desde sistemas físico-químicos a biológicos, e sua obtenção permanece um campo de estudo ainda aberto.

A função da mecânica estatística de sistemas fora do equilíbrio é determinar as propriedades termodinâmicas e a evolução temporal dos observáveis macroscópicos de tais sistemas a partir de leis dinâmicas que governam o movimento das partículas constituintes. Seus objetivos básicos são: obter equações de transporte e compreender sua estrutura, entender como se desenvolve a aproximação ao equilíbrio, estudar as propriedades de estados estacionários, calcular os valores instantâneos e a evolução no tempo de quantidades físicas que especifiquem o estado macroscópico do sistema. Vejamos como tratar esses problemas seguindo o método proposto por Zubarev.

Dado um sistema físico particular afastado do equilíbrio, estamos interessados no comportamento temporal e espacial de certas quantidades $\{Q_1(\vec{r}, t), Q_2(\vec{r}, t), \dots, Q_n(\vec{r}, t)\}$ as quais chamaremos macrovariáveis, embora elas nem sempre descrevam quantidades macroscópicas no sentido usual. Estas macrovariáveis podem ser, por exemplo, número de partículas, energia, magnetização, fluxos de partículas, fluxos de energia, etc. O objetivo central é obter as equações para estas quantidades. Este conjunto de macrovariáveis tem associado um conjunto de operadores Hermitianos $\{\hat{P}_1(\vec{r}), \hat{P}_2(\vec{r}), \dots, \hat{P}_n(\vec{r})\}$ que, na representação de Schrödinger, não dependem do tempo mas podem depender da posição, isto é, são as densidades locais das grandezas \hat{P}_j . Estes operadores podem ser Hamiltonianos, operadores densidade espacial de partículas, operadores número de partículas, etc.. Chamaremos a estas quantidades *variáveis dinâmicas de base*. A relação entre as macrovariáveis e as variáveis dinâmicas de base está dada na forma usual por:

$$Q_j(\vec{r}, t) = \text{Tr}\{\hat{P}_j(\vec{r})\hat{\rho}(t)\} \quad (1)$$

com $j=1, 2, \dots, n$, onde $\hat{\rho}(t)$ designa o Operador Estatístico de Não equilíbrio definido sobre o espaço de Hilbert \mathbb{H} dos estados quânticos do sistema e $\text{Tr}\{\hat{R}\}$ é o traço do operador \hat{R} em \mathbb{H} . No limite clássico, $\hat{\rho}(t)$ é uma função real definida no espaço de fase Γ do sistema e $\text{Tr}\{\hat{R}\}$ deve ser interpretado como uma integral da função \hat{R} sobre Γ .

Um caminho associado ao MOENE, o qual mostra estar proximamente conectado com a termodinâmica fenomenológica irreversível [13], é baseado na separação do Hamiltoniano total do sistema em duas partes:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_0 + \hat{\rho}_1 \quad (2)$$

onde $\hat{\rho}_0$ é chamado parte relevante (ou secular) composta das energia cinéticas das partículas do sistema e a parte das interações suficientemente fortes relacionadas com os efeitos de relaxação rápidos [14,15], isto é, com tempos de relaxação muito menores que o tempo característico Δt do experimento (usualmente a resolução temporal do instrumento de medida). Por outro lado $\hat{\rho}_1$ contém o resto do Hamiltoniano do sistema, ou seja, as interações que produzem efeitos de relaxação lentos, isto é, com tempos de relaxação suficientemente longos ($> \Delta t$). Este procedimento de separação é fundamental e está baseado no princípio de Bogoliubov sobre os tempos de decaimento de correlações [16-18], o que permite definir uma hierarquia de tempos de relaxação no sistema dissipativo sob consideração.

Uma das questões fundamentais da teoria é a escolha apropriada das variáveis de base [16-19]. Evidentemente o conjunto $\{Q_j(\vec{r}, t)\}$ deve conter, em particular, todas as quantidades que estamos interessados em descrever. Não obstante não existe um critério geral que permita obter o conjunto completo de variáveis de base para descrever adequadamente um determinado problema. Existe, porém, um critério auxiliar na escolha destas variáveis; este critério, chamado condição de fechamento de Zubarev-Peletninskii consiste em que, dado $\hat{\rho}_0$, as variáveis microdinâmicas de base, os operadores \hat{P}_j devem satisfazer [15,16]:

$$[\hat{\rho}_0, \hat{P}_j(\vec{r})] = \sum_{k=1}^n \Omega_{jk} P_k(\vec{r}) \quad (3)$$

com $j=1, 2, \dots, n$, onde Ω_{kl} são em geral números reais, ou eventualmente, funções da posição \vec{r} , ou ainda, operadores diferenciais. Esta condição estabelece que para uma adequada descrição do sistema devemos considerar todas as variáveis de base que satisfazem as n relações dadas pela equação (3). De alguma forma oferece uma condição de necessidade (mas não de suficiência) para a escolha das macrovariáveis, isto é, a definição do espaço de estados macroscópicos (termodinâmico) do sistema, dadas pela equação (1).

Uma vez escolhidas as variáveis de base devemos obter uma expressão para o operador estatístico $\hat{\rho}(t)$. Os detalhes do procedimento para a construção deste operador podem ser encontrados na extensa bibliografia sobre o tema [12,10,11] e não nos deteremos aqui nesta questão; é suficiente dizer que a construção deste operador está

baseada no critério de Jaynes [20-22] (por sua vez com base nas idéias de Shannon sobre a teoria matemática da informação) de maximização da entropia informacional de Gibbs [23], isto é, $S(t) = -Tr\{\hat{\rho}(t) \ln \hat{\rho}(t)\}$, com os vínculos que impõe o conhecimento parcial que se tem sobre o sistema (informação ao nível macroscópico imposta pelas condições num dado experimento), a todo instante t' , no intervalo $t_0 \leq t' \leq t$, entre o instante inicial de preparação do sistema, t_0 , e o instante final, t , no qual se faz a medida de um dado experimento.

Chamamos a atenção ao importante fato de que o mesmo princípio variacional, quando aplicado a sistemas em equilíbrio com reservatórios, proporciona as bem conhecidas distribuições de probabilidade de Gibbs, neste caso, de equilíbrio. Também comentamos que o operador ou distribuição de não equilíbrio $\hat{\rho}(t)$, que o formalismo proporciona quando o sistema é desacoplado de todas as perturbações externas que o afastam do equilíbrio e é deixado somente em contato com um dado conjunto de reservatórios, tende assintoticamente no tempo para a correspondente distribuição de Gibbs em equilíbrio.

O Operador Estatístico de Não Equilíbrio $\hat{\rho}(t)$, na versão devida a D. N. Zubarev (a ser consistentemente usado por nós), é dado por [10,11]:

$$\hat{\rho}_\varepsilon(t) = \exp \left\{ \ln \hat{\rho}(t, 0) - \int_{-\infty}^t dt' e^{\varepsilon(t'-t)} \frac{d}{dt'} \ln \hat{\rho}(t', t'-t) \right\} \quad (4)$$

onde $\hat{\rho}(t, 0)$ é um operador auxiliar que tem a forma:

$$\hat{\rho}(t, 0) = \exp \left(-\phi(t) - \sum_{j=1}^n \int d^3r F_j(\vec{r}, t) \hat{P}_j(\vec{r}) \right) \quad (5)$$

e:

$$\hat{\rho}(t', t'-t) = \exp \left\{ -\frac{1}{i\hbar} (t'-t) \hat{H} \right\} \hat{\rho}(t', 0) \exp \left\{ \frac{1}{i\hbar} (t'-t) \hat{H} \right\}.$$

O parâmetro ε que aparece na equação (4) é uma quantidade infinitesimal positiva que vai para zero ($\varepsilon \rightarrow +0$) após os cálculos dos traços serem efetuados. Este processo de limite está relacionado com a quebra de simetria temporal na equação de Liouville, o que permite selecionar só as soluções retardadas garantindo, desta forma, a irreversibilidade das equações de evolução e, portanto, uma correta descrição do processo dissipativo, que é, insistimos, uma hipótese *ad hoc*. Chamamos a atenção ao fato de que este procedimento em MaxEnt-MOENE introduz irreversibilidade a partir das condições iniciais e como dito *ad hoc*. Na equação (5), $\phi(t)$ e o conjunto $\{F_j(\vec{r}, t)\}$ são os multiplicadores de Lagrange que o método de maximização da entropia de Gibbs introduz.

Em particular, $\phi(t)$ garante a normalização de $\hat{\rho}(t)$, isto é, $Tr\{\hat{\rho}(t)\} = 1$, para todo t , ou seja:

$$\phi(t) = \ln Tr \left\{ \exp \left(- \sum_{j=1}^n \int d^3r F_j(\vec{r}, t) \hat{P}_j(\vec{r}) \right) \right\} \quad (6)$$

De (4) podemos mostrar que o operador estatístico pode ser separado em dois termos:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}(t) + \rho^*(t) \quad (7)$$

onde o operador auxiliar $\hat{\rho}(t)$ dá o valor instantâneo no tempo das macrovariáveis e não contém os efeitos de relaxação. Por outro lado, $\rho^*(t)$ é o responsável pela descrição da evolução irreversível do sistema [24] e portanto está incluído no cálculo da derivada temporal de $Q_j(\vec{r}, t)$. Derivando no tempo a equação (1) obtemos as equações de evolução para as macrovariáveis $Q_j(\vec{r}, t)$:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}(t) + \rho^*(t) \quad (7)$$

$$\frac{d}{dt} Q_j(\vec{r}, t) = \frac{1}{i\hbar} Tr \{ [\hat{P}_j(\vec{r}), \hat{\rho}_\epsilon(t)] \} \quad (8)$$

isto é, são as equações mecânico quânticas de Heisenberg para as quantidades $\hat{P}_j(\vec{r})$ mediadas sobre o ensemble de não equilíbrio caracterizado por $\hat{\rho}_\epsilon(t)$.

Usando as equações (2), (3) e (7) podemos escrever:

$$\frac{d}{dt} Q_j(\vec{r}, t) = J_j^{(0)}(\vec{r}, t) + J_j^{(1)}(\vec{r}, t) + \mathfrak{S}(\vec{r}, t) \quad (9)$$

onde:

$$J_j^{(0)}(\vec{r}, t) = \frac{1}{i\hbar} Tr \{ [\hat{P}_j(\vec{r}), \hat{\rho}_0] \hat{\rho}(t) \} \quad (10)$$

$$J_j^{(1)}(\vec{r}, t) = \frac{1}{i\hbar} Tr \{ [\hat{P}_j(\vec{r}), \hat{\rho}_1] \hat{\rho}(t) \} \quad (11)$$

$$\mathfrak{S}(\vec{r}, t) = \frac{1}{i\hbar} Tr \{ [\hat{P}_j(\vec{r}), \hat{\rho}_1] \rho^*(t) \} \quad (12)$$

Os termos $J_j^{(0)}(\vec{r}, t)$ e $J_j^{(1)}(\vec{r}, t)$ estão associados ao operador auxiliar $\hat{\rho}(t)$ que, como dito anteriormente, determina o valor instantâneo das macrovariáveis. O termo $\mathfrak{S}(\vec{r}, t)$ está relacionado com $\rho^*(t)$ e é o responsável pela

evolução irreversível do sistema [25]. Uma teoria perturbativa completa que permite calcular o termo \mathfrak{S}_j na ordem de interação $\hat{\rho}_1$ desejada foi obtida por Lauck et al. [26]. Formalmente este termo pode ser escrito na forma:

$$\mathfrak{S}_j(\vec{r}, t) = \sum_{n=2}^{\infty} J_j^{(s)}(\vec{r}, t) \quad (13)$$

onde o índice (s) indica a ordem das interações presentes em cada termo (pensando em termos de um gás de moléculas corresponderia à contribuição resultante da colisão de s partículas em uma teoria cinética tradicional). Aqui vamos apresentar só os resultados do limite Markoviano (interação fraca) que consiste num desenvolvimento até a segunda ordem nas interações [26], que está dado pelo termo $J_j^{(2)}$, ou seja:

$$\mathfrak{S}_j(\vec{r}, t) \cong J_j^{(2)}(\vec{r}, t) = -\frac{1}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} Tr \{ ([\hat{\rho}_1(t'), +[\hat{\rho}_1, \hat{P}_j] + i\hbar \sum_m \hat{P}_m \frac{\partial J_j^{(1)}}{\partial \langle \hat{P}_m | t \rangle}] \hat{\rho}(t)) \}. \quad (14)$$

Esta aproximação será usada ao longo do presente trabalho. Ela descreve muito satisfatoriamente vários resultados experimentais na área de sistemas afastados do equilíbrio como certos aspectos no caso de polímeros, semicondutores e sistemas biológicos. Em (14) a dependência temporal explícita em $\hat{\rho}_1$ é dada por:

$$\hat{\rho}_1(t') = \exp \{ -t' \hat{\rho}_0 / i\hbar \} \hat{\rho}_1 \exp \{ t' \hat{\rho}_0 / i\hbar \} \quad (15)$$

Assim, conhecendo as equações de transporte para as macrovariáveis de base podemos obter as equações de evolução para os multiplicadores de Lagrange, os quais, têm o papel de variáveis termodinâmicas intensivas e descrevem completamente o estado termodinâmico de não equilíbrio do sistema, assim como o fazem as macrovariáveis $Q_j(\vec{r}, t)$.

2.1 Plasma Fotoinjetado em Semicondutor

O estudo dos fenômenos de transporte em Plasmas Fotoinjetados em Semicondutores Altamente Excitados (PSAE) constitui uma aplicação nova e particularmente interessante da Mecânica Estatística de Não Equilíbrio na física dos semicondutores. Diferente do problema usual quando elétrons (ou buracos) e fônons estão inicialmente em um estado de equilíbrio termodinâmico, o PSAE está

desde o início em um estado altamente fora de equilíbrio termodinâmico, e com a presença de ambos tipos de portadores. Disto decorre uma interessante competição entre a relaxação do excesso de energia inicial dos diferentes subsistemas, e a manutenção ou mesmo elevação da energia devido ao campo elétrico aplicado.

Neste trabalho fizemos um estudo do PSAE fotogerado em um semiconductor (intrínseco, polar e de gap direto) através de um pulso intenso de radiação (laser). A luz estimula transições eletrônicas da banda de valência para a banda de condução, e produz uma distribuição de elétrons energéticos na banda de condução e buracos na banda de valência, altamente excitados [27]. Como o momento do fóton incidente é relativamente pequeno em relação ao momento dos portadores, essas transições são essencialmente verticais, com mudanças desprezíveis de momento. Uma concentração n (suposta homogênea) de pares de elétron-buraco é então criada, possuindo um excesso de energia $\hbar\Omega_L - E_G$ por par, onde E_G é o gap de energia do semiconductor e Ω_L é a frequência do laser aplicado. Este semiconductor se mantém em contato com um reservatório que está a uma temperatura T_R .

No primeiro estágio da relaxação, os portadores quentes se encontram num estado altamente fora de equilíbrio. A duração temporal deste primeiro estágio depende principalmente da concentração de portadores foto injetados e do tipo de semiconductor. Num exemplo típico, para concentrações iniciais $n_0 \geq 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, os portadores quentes no Arseneto de Gálio só irão se termalizar internamente em tempos superiores a 500 femtossegundos. Principalmente através da interação coulombiana e do espalhamento com os fônons ópticos longitudinais, os portadores quentes chegam ao início do segundo estágio da relaxação, no qual podem ser caracterizados por uma pseudotemperatura T_C^* . Esta pseudotemperatura T_C^* é maior que a temperatura T_R do reservatório em que o semiconductor se mantém em contato. A interação dos portadores com os diferentes subsistemas de fônons geram populações não equilibradas destes últimos.

No modelo aqui apresentado são consideradas as interações piezoelétrica, polar e não polar óptica e deformação acústica entre os portadores foto injetados, já termalizados a uma pseudotemperatura $T_C^*(t)$, e os fônons. Consideramos nestas interações os fônons ópticos longitudinais e transversais caracterizados por pseudotemperaturas $T_{LO}^*(t)$ e $T_{TO}^*(t)$, respectivamente. Devido à pequena excitação que a pseudotemperatura dos fônons acústicos sofre nos semicondutores polares, ela poderá ser tomada como constante e igual a temperatura do reservatório [28]. A partir do instante em que os portadores se termalizam a uma pseudotemperatura $T_C^*(0)$, um campo

elétrico constante \vec{E} é aplicado ao PSAE, fornecendo energia e momento aos portadores, que por sua vez ao interagirem com os fônons, determinam a evolução dinâmica das diferentes pseudotemperaturas e momentos dos subsistemas. Chamamos a atenção para o fato de que como não se define “temperatura” para sistemas fora do equilíbrio utilizamos a expressão “pseudotemperatura” a qual seria uma espécie de excesso de energia cinética medida em unidades de temperatura.

Neste trabalho trataremos da evolução temporal do sistema no segundo estágio, imediatamente após os portadores se termalizarem a uma pseudotemperatura $T_C^*(0)$.

A discussão do MOENE apresentada na Seção II será agora ilustrada. Para isso, tomaremos o Hamiltoniano representativo do sistema acima descrito na seguinte forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (16)$$

\hat{H}_0 refere-se aos subsistemas livres de portadores e fônons, sendo constituído por dois termos:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_C + \hat{H}_P \quad (17)$$

com \hat{H}_C relacionado aos portadores e \hat{H}_P aos fônons. \hat{H}_1 refere-se às interações internas de relaxação lenta e às interações externas:

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_{CE} + \hat{H}_{CP} + \hat{H}_{AN} \quad (18)$$

onde \hat{H}_{CE} é o Hamiltoniano da interação dos portadores com o campo elétrico, \hat{H}_{CP} é o Hamiltoniano da interação dos portadores com os fônons e \hat{H}_{AN} é o Hamiltoniano da interação anarmônica entre os modos de fônons. Limitando-se a períodos de tempo em que os processos de recombinação sejam desprezíveis (tipicamente menores que nanossegundos), omitiu-se em (18) o Hamiltoniano associado à recombinação de portadores. Não levaremos em conta também a estrutura de multivales da banda de condução dos semicondutores, limitando-se somente a um vale central cujo mínimo ocorre no mesmo ponto no espaço- k do máximo da banda de valência. A não consideração da estrutura de multivales é válida uma vez que utilizemos campos baixos (inferiores a 110 KV/cm no GaN), pois, para valores acima disto o campo elétrico aplicado começa a provocar transições dos portadores para outros vales. Na banda de valência nos limitaremos apenas a buracos mais pesados.

Desprezando-se qualquer anisotropia na massa dos portadores, o Hamiltoniano para o subsistema livre dos mesmos é [29]:

$$\hat{\} _C = \sum_{\vec{k},a} \{ \vec{k},a c_{\vec{k},a}^\dagger c_{\vec{k},a} \} \quad (19)$$

sendo $c_{\vec{k},a}^\dagger$ o operador de criação de portadores e $c_{\vec{k},a}$ o operador de aniquilação de portadores em estados de Bloch caracterizados pelo vetor de onda \vec{k} , com $a=e$ referindo-se a elétrons e $a=h$ a buracos. Na aproximação de massa efetiva:

$$\{ \vec{k},a = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_a} \quad (20)$$

onde m_e é a massa efetiva do elétron e m_h a massa efetiva do buraco.

Para o Hamiltoniano dos fônons livres teremos [30]:

$$\hat{\} _P = \sum_{\vec{q},\eta} \hbar \omega_{\vec{q},\eta} (b_{\vec{q},\eta}^\dagger b_{\vec{q},\eta} + 1/2) \quad (21)$$

onde $b_{\vec{q},\eta}^\dagger$ é operador de criação e $b_{\vec{q},\eta}$ é operador de aniquilação de fônons do tipo η (com $\eta=LO$ para fônons ópticos longitudinais e $\eta=TO$ para fônons ópticos transversais) com vetor de onda \vec{q} ; $\hbar \omega_{\vec{q},\eta}$ é a energia associada ao fônon do tipo η .

O Hamiltoniano $\hat{\} _{CE}$ associado à interação entre o campo elétrico \vec{E} aplicado e os portadores é dado por:

$$\hat{\} _{CE} = - \sum_{i,a} e_a \vec{E} \cdot \vec{r}_{ia} \quad (22)$$

onde $e_e = -e$, $e_h = e$, sendo e o valor do módulo da carga do elétron no vácuo, enquanto \vec{r}_{ie} determina a posição do elétron e \vec{r}_{ih} a posição do buraco.

O Hamiltoniano $\hat{\} _{CP}$ associado à interação entre os portadores e os fônons é dado por [31]:

$$\hat{\} _{CP} = \sum_{\substack{\vec{q},\vec{k} \\ a,\eta,\ell}} M_{a,\eta}^\ell(\vec{q}) b_{\vec{q},\eta} c_{\vec{k}+\vec{q},a}^\dagger c_{\vec{k},a} + M_{a,\eta}^{\ell*}(\vec{q}) b_{\vec{q},\eta}^\dagger c_{\vec{k},a}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{q},a}, \quad (23)$$

onde $M_{a,\eta}^\ell(\vec{q})$ é o elemento da matriz de interação entre o tipo a de portador e o tipo η de fônon para o tipo de espalhamento ℓ (aqui consideraremos os espalhamentos Polar Óptico, Deformação Óptico, Deformação Acústico e Piezoelétrico). A estrela no elemento de matriz no

segundo termo de (23) representa o complexo conjugado do mesmo.

Apesar da interação Coulombiana não estar explícita na equação (19) ou através da blindagem da interação portador-fônon na equação (23), dela decorre a hipótese de uma temperatura única para a distribuição dos portadores.

2.2 Equações de Transporte para o Plasma Semicondutor Altamente Excitado

O primeiro passo para a utilização do Método do Operador Estatístico de Não Equilíbrio para descrever o estado macroscópico do sistema caracterizado na seção anterior, é a escolha do conjunto apropriado de variáveis dinâmicas $\{\hat{P}_j\}$ cujos valores médios tomados em relação ao ensemble de não equilíbrio, são as macrovariáveis extensivas capazes de descrever o estado do sistema.

O conjunto de variáveis intensivas $\{F_j(t)\}$, termodinamicamente conjugadas ao conjunto de variáveis dinâmicas $\{\hat{P}_j\}$ é:

$$\begin{aligned} \{\hat{P}_j\} &= \{ \hat{\} _C, \hat{\} _{LO}, \hat{\} _{TO}, \hat{P}_e, \hat{P}_h, \hat{N}_e, \hat{N}_h \} \\ &\Updownarrow \\ \{F_j(t)\} &= \{ \beta_C(t), \beta_{LO}(t), \beta_{TO}(t), -\beta_C \bar{v}_e(t), \\ &\quad -\beta_C \bar{v}_h(t), -\beta_C \mu_e^*(t), -\beta_C \mu_h^*(t) \} \end{aligned} \quad (24)$$

O conjunto de variáveis dinâmicas $\{\hat{P}_j\}$ mais apropriado para a descrição do sistema em questão consiste da energia dos portadores $\hat{\} _C$, da energia dos fônons ópticos longitudinais $\hat{\} _{LO}$, da energia dos fônons ópticos transversais $\hat{\} _{TO}$, do momento dos elétrons \hat{P}_e , e do momento dos buracos \hat{P}_h :

$$\hat{P}_a = \sum_k \hbar k c_{\vec{k},a}^\dagger c_{\vec{k},a} \quad (25)$$

do número total de elétrons, \hat{N}_e e do número total de buracos \hat{N}_h :

$$\hat{N}_a = \sum_k c_{\vec{k},a}^\dagger c_{\vec{k},a} \quad (26)$$

O conjunto de variáveis intensivas $\{F_j(t)\}$, termodinamicamente conjugadas ao conjunto de variáveis dinâmicas $\{\hat{P}_j\}$ acima escolhido, serão interpretadas como:

- o recíproco da pseudotemperatura dos portadores: $\beta_C(t) = [k_B T_C^*(t)]^{-1}$,
- o recíproco da pseudotemperatura dos fônons ópticoslongitudinais: $\beta_{LO}(t) = [k_B T_{LO}^*(t)]^{-1}$,
- o recíproco da pseudotemperatura dos fônons ópticos transversais: $\beta_{TO}(t) = [k_B T_{TO}^*(t)]^{-1}$,
- as variáveis $-\beta_C(t)\vec{v}_e(t)$ e $-\beta_C(t)\vec{v}_h(t)$, onde $\vec{v}_e(t)$ é a velocidade de arraste dos elétrons e $\vec{v}_h(t)$ a velocidade de arraste dos buracos,
- as variáveis $-\beta_C(t)\mu_e^*(t)$ e $-\beta_C(t)\mu_h^*(t)$, onde $\mu_e^*(t)$ é o potencial químico efetivo de elétrons e $\mu_h^*(t)$ o potencial químico efetivo de buracos.

Aqui utilizamos k_B para simbolizar a constante de Boltzmann. Em resumo, inicialmente o conjunto básico de macrovariáveis a ser usado (no que é relevante para o subsistema de portadores) é composto pela energia e concentração, as quais são quantidades fundamentais para algumas descrições termodinâmicas. Como um campo elétrico é aplicado, os portadores adquirem um movimento de arraste na direção do campo, e então o momento linear para elétrons e buracos são incorporados ao conjunto básico.

Com este conjunto de variáveis intensivas e de variáveis dinâmicas, a equação (5) para o operador auxiliar assume a forma:

$$\begin{aligned} \bar{\rho}(t) = & \exp\{-\phi(t) - \beta_C(t)\} \hat{c} - \beta_{LO}(t)\} \hat{L}_O - \beta_{TO}(t)\} \hat{T}_O + \\ & + \beta_C(t)\vec{v}_e(t) \cdot \hat{P}_e + \beta_C(t)\vec{v}_h(t) \cdot \hat{P}_h - \\ & - \beta_C(t)\mu_e^*(t)\hat{N}_e - \beta_C(t)\mu_h^*(t)\hat{N}_h \}. \end{aligned} \quad (27)$$

Utilizando a equação (27) e as equações de (9) a (12) podemos descrever a evolução temporal das variáveis dinâmicas para o sistema fora de equilíbrio. Calculando todos os comutadores e as integrais, obtemos para as diferentes interações entre os portadores e fônons:

$$\frac{d}{dt} E_C(t) = \sum_a \frac{e_a \vec{E}}{m_a} \cdot \vec{p}_a(t) - |J_{E_a}^{(2)}(t)| \quad (28)$$

$$\frac{d}{dt} E_{LO}(t) = |J_{E_{LO}}^{(2)}(t)| + J_{LO,A}^{(2)}(t) \quad (29)$$

$$\frac{d}{dt} E_{TO}(t) = |J_{E_{TO}}^{(2)}(t)| + J_{TO,A}^{(2)}(t) \quad (30)$$

$$\frac{d}{dt} \vec{p}_e(t) = -nVe\vec{E} + \vec{J}_{p_e}^{(2)}(t) \quad (31)$$

$$\frac{d}{dt} \vec{p}_h(t) = nVe\vec{E} + \vec{J}_{p_h}^{(2)}(t) \quad (32)$$

sendo que nestas equações fizemos uso da seguinte notação: $E_C(t) = Tr\{\hat{c} \hat{P}_e(t)\}$, $E_{LO}(t) = Tr\{\hat{L}_O \hat{P}_e(t)\}$, $E_{TO}(t) = Tr\{\hat{T}_O \hat{P}_e(t)\}$, $\vec{p}_a(t) = Tr\{\hat{P}_a \hat{P}_e(t)\}$.

A solução destas equações, dadas as condições iniciais, determinará a evolução temporal dos parâmetros de transporte do PSAE submetido ao campo elétrico \vec{E} aplicado. Em todas elas o primeiro termo da expansão do operador estatístico, $J_j^{(0)}$ (confira equação (10)), é nulo, ou seja, não existe contribuição proveniente deste termo.

O primeiro termo da equação (28) para a evolução temporal da energia dos portadores (proveniente de $J_j^{(1)}$) é a taxa de variação de energia dos portadores devido ao campo elétrico \vec{E} aplicado. O segundo termo (proveniente de $J_j^{(2)}$) é a taxa de variação da energia dos portadores devido à sua interação com os fônons, sendo as diferentes contribuições dadas por:

$$\begin{aligned} J_{E_c}^{(2)}(t) = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \ell, \eta} (\{_{\vec{k}+\vec{q}, a} - \{_{\vec{k}, a} | M_{a,\eta}^\ell(\vec{q})|^2 \delta(\{_{\vec{k}+\vec{q}, a} - \{_{\vec{k}, a} - \\ & - \hbar\omega_{\vec{q}, \eta}) [v_{\vec{q}, \eta}(t) f_{\vec{k}, a}(t) (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}, a}(t)) - \\ & f_{\vec{k}+\vec{q}, a}(t) (1 + v_{\vec{q}, \eta}(t)) (1 - f_{\vec{k}, a}(t))] , \end{aligned} \quad (33)$$

onde a soma em ℓ é feita sobre os diferentes tipos de espalhamento dos fônons e:

$$v_{\vec{q}, \eta}(t) = \frac{1}{\exp\{\beta_\eta(t)\hbar\omega_{\vec{q}, \eta}\} - 1} \quad (34)$$

é a função de distribuição para fônons do tipo η obtida através do MOENE, enquanto que:

$$f_{\vec{k}, a}(t) = \frac{1}{\exp\{\beta_C(t)(\{_{\vec{k}, a} - \hbar\vec{k} \cdot \vec{v}_a(t) - \mu_a^*(t)\}) + 1}$$

é a função de distribuição para os portadores do tipo a também obtida através do MOENE, que nas usuais condições experimentais (altas temperaturas) pode ser aproximada pela expressão:

$$f_{\vec{k}, a}(t) = 4n(\pi\alpha(t))^{3/2} \exp\{-\alpha(t)(\vec{k} - m_a \vec{v}_a(t) / \hbar)^2\} \quad (35)$$

onde $\alpha(t) = \hbar^2 \beta_C(t) / 2m_a$.

Nas equações (29) e (30) para a evolução temporal da energia dos fônons do tipo *LO* e *TO*, o primeiro termo do lado direito (proveniente de $J_j^{(2)}$) é a taxa de variação da energia dos fônons ópticos (longitudinais e transversais, respectivamente) devido à sua interação com os portadores, sendo dada pela expressão (33). O segundo termo é a taxa de transferência de energia dos fônons ópticos (longitudinais ou transversais) para os fônons acústicos, introduzido através da aproximação do tempo de relaxação, sendo dada por:

$$J_{\eta,AN}^{(2)} = \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q},\eta} \frac{v_{\vec{q},\eta}(t) - v_{\vec{q},\eta}^A}{\tau_{\eta,AN}}, \quad (36)$$

com $\eta = LO, TO$

onde $\tau_{\eta,AN}$ é um tempo de relaxação fenomenológico associado aos fônons ópticos longitudinais e transversais, sendo que estes são parâmetros ajustáveis nas equações de evolução, mas cuja ordem de grandeza pode ser obtida através de espalhamento Raman, e:

$$v_{\vec{q},\eta}^A = \frac{1}{\exp\{\hbar \omega_{\vec{q},\eta} / (k_B T_A^*)\} - 1}, \quad (37)$$

com $\eta = LO, TO$

sendo $T_A^* = T_R$.

Embora o termo de interação anarmônica entre os fônons, $\hat{\chi}_{AN}$, que aparece no Hamiltoniano da equação (18) possa ser tratado explicitamente, a ausência de expressões simples para as matrizes de interação torna inviável seu tratamento analítico e por isto as interações entre os fônons foram introduzidas nas equações de transporte na forma de tempos de relaxação associados a cada tipo de fônons.

Nas equações (31) e (32) para a evolução temporal do momento dos elétrons (buracos) na direção do campo elétrico \vec{E} aplicado, o primeiro termo do lado direito (proveniente de $J_j^{(1)}$) é a taxa de variação de momento dos elétrons (buracos) devido ao campo elétrico aplicado e o segundo termo (proveniente de $J_j^{(2)}$) é a taxa de variação de momento dos elétrons (buracos) devido aos processos de espalhamento com os fônons, sendo dada por:

$$J_{p_a}^{(2)}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \ell, \eta} \hbar \vec{q} |M_{a,\eta}^\ell(\vec{q})|^2 \delta(\{\vec{k} + \vec{q}, a\} - \{\vec{k}, a\} - \hbar \omega_{\vec{q},\eta}) \times$$

$$\times [v_{\vec{q},\eta}(t) f_{\vec{k},a}(t) (1 - f_{\vec{k} + \vec{q},a}(t)) -$$

$$- f_{\vec{k} + \vec{q},a}(t) (1 + v_{\vec{q},\eta}(t)) (1 - f_{\vec{k},a}(t))]. \quad (38)$$

A função $\delta(\{\vec{k} + \vec{q}, a\} - \{\vec{k}, a\} - \hbar \omega_{\vec{q},\eta})$ que aparece nas equações (33) e (38) representa, nada mais nada menos, que os processos de absorção e emissão de fônons, onde a energia e o momento são conservados.

Notamos que a equação para a variação temporal do número total de portadores é nula. Este resultado se deve ao fato de não termos considerado a recombinação de elétrons com buracos, ou seja, admitimos que estamos numa escala de tempo tal que o número de elétrons e buracos seja quase constante.

As macrovariáveis dinâmicas se relacionam aos parâmetros termodinâmicos através das expressões:

$$Tr\{\hat{P}_a \hat{p}_\varepsilon(t)\} = \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} f_{\vec{k},a}(t) = n V m_a \vec{V}_a(t) \quad (39)$$

$$Tr\{\hat{c} \hat{p}_\varepsilon(t)\} = \sum_{\vec{k}} \{ \vec{k}, a \} f_{\vec{k},a}(t) = \frac{3nV}{\beta_C(t)} + \sum_a \frac{n V m_a v_a^2(t)}{2} \quad (40)$$

$$Tr\{\hat{\chi}_{LO} \hat{p}_\varepsilon(t)\} = \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q},LO} v_{\vec{q},LO}(t) = \frac{V}{V_{cel}} \hbar \omega_{LO} v_{LO}(t) \quad (41)$$

$$Tr\{\hat{\chi}_{TO} \hat{p}_\varepsilon(t)\} = \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q},TO} v_{\vec{q},TO}(t) = \frac{2V}{V_{cel}} \hbar \omega_{TO} v_{TO}(t) \quad (42)$$

onde V_{cel} é o volume da célula unitária.

3 Resultados e Discussão

Até o presente momento todas as equações obtidas nas seções anteriores são válidas para semicondutores intrínsecos polares e de *gap* direto. Para a verificação numérica dos resultados obtidos analiticamente iremos considerar o caso específico do plasma fotocriado no semicondutor polar de *gap* direto do Nitreto de Gálio (GaN), na forma *zincblende*, nas condições das Tabelas 1 e 2.

Tabela 1 - Condições iniciais típicas correspondentes a uma situação experimental de espectroscopia óptica de resolução temporal ultra-rápida [27]

Parâmetro	Valor
Temperatura inicial dos portadores	$T_C^*(0)$ 4640 K
Temperatura inicial dos fônons ópticos	$T_{LO,TO}^*(0)$ 300 K
Temperatura reservatório térmico	T_R 300 K
Densidade de portadores fotoinjjetados	n $2,6 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

A escolha deste material semiconductor, o GaN, se deve à natureza de seu *gap* direto e às suas várias aplicações tecnológicas. Tais características tornam o GaN ideal para detecção e emissão óptica operando na porção do comprimento de onda do espectro eletromagnético, na faixa que se estende do azul ao ultravioleta. Já tem sido demonstrada a possibilidade de diodos emissores de luz e lasers usando heteroestruturas InGaN/GaN e AlGaIn/GaN. Outras interessantes propriedades deste material são sua alta mobilidade eletrônica e alta condutividade térmica. Entre algumas aplicações do GaN podemos citar: a alta definição de imagem em painéis de tela plana, aplicação em altas frequências e dispositivos operando em elevadas temperaturas, detector e emissor de ultravioleta. Como um resultado de sua forte radiação o GaN é conveniente também em aplicações espaciais. O Nitreto de Gálio é um dos mais promissores materiais do grupo III-Nitreto para dispositivos semicondutores, o que faz dele, então, um material interessante para estudo de propriedades de transporte [6].

Tabela 2 - Parâmetros característicos do Nitreto de Gálio

Parâmetro		Valor
Massa efetiva do elétron ^a	m_e	$0,19 m_0$
Massa efetiva do buraco ^a	m_h	$0,86 m_0$
Energia de Gap (300 K) ^b	E_G	$3,4 eV$
Energia dos fônons ópticos longitudinais ^c	$\hbar\omega_{LO}$	$92 meV$
Constante dielétrica óptica ^d	ϵ_∞	$5,35$
Constante dielétrica estática ^d	ϵ_0	$9,5$
Constante de rede ^e	a	$4,5 \text{ \AA}$
Velocidade média do som ^f	v_s	$4,68 \times 10^5 \text{ cm/s}$
Densidade ^g	ρ	$6,095 \text{ g/cm}^3$
Energia dos fônons ópticos transversais ^e	$\hbar\omega_{TO}$	$69 meV$
Constante de Deformação Acústico (e) ^h	E_{1e}	$10,1 eV$
Constante de Deformação Acústico (h) ^{f,i}	E_{1h}	$4,02 eV$
Constante de Deformação Óptica ^{i,j}	D	$1,04 \times 10^9 eV/cm$
Constante Piezoelétrica ^k	h_{PZ}	$0,56 C/m^2$

^aK. Kim et al., Physical Review B **56** (12), 7363 (1997); ^bT. L. Lei et al., Appl. Phys. Lett. **59** (8), 944 (1991); ^cA. S. Barker et al., Physical Review B **7** (2), 743 (1973); ^dS. Strite et al., J. Vac. Sci. Technol. **B 10**, 1237 (1992); ^eK. Miwa et al., Physical Review B **48** (11), 7897 (1993); ^fM. E. Sherwin et al., J. Appl. Phys. **69** (12), 8423 (1991); ^gH. Hahn et al., Z. Allg. Anorg. Chem. **244**, 111 (1940); ^hP. Perlin et al., Physical Review B **45**, 13307 (1992); ⁱJ. D. Wiley, Solid State Commun. **8**, 1865 (1970); ^jI. H. Oguzman et al., J. Appl. Phys. **80** (8), 4429 (1996); ^kM. E.

Sherwin et al., J. Appl. Phys. **69** (12), 8423 (1991); ^kM. A. Littlejohn et al., Applied Physics Letters **26** (11), 625 (1975).

Uma maneira de se obter um plasma duplo num semiconductor é aplicando um pulso óptico de frequência maior que o *gap* da banda, gerando uma distribuição de portadores quentes pela absorção banda-banda [27]. Um segundo pulso óptico menos intenso (pulso de prova) é então usado para verificar uma mudança ocorrida durante o tempo transcorrido. Neste experimento o semiconductor utilizado foi o Arseneto de Gálio.

Propomos então um experimento semelhante ao realizado por Shank para o Nitreto de Gálio na forma *zincblende*. Podemos propor uma fonte laser de tal maneira que ela possa produzir uma geração de portadores com uma temperatura inicial de $4640 K$. Na Tabela I são mostradas as condições iniciais correspondentes a esta situação baseada no experimento de Shank.

A Figura 1 mostra a evolução temporal da pseudotemperatura dos portadores $T_C^*(t)$ para vários valores do campo elétrico aplicado. Os portadores sofrem um processo contínuo de esfriamento, relaxando todo o seu excesso inicial de energia para a rede em tempos inferiores a $0,6 ps$, ao final do qual sua pseudotemperatura estacionária é maior que a da rede (isto somente quando há um campo elétrico aplicado). Notamos que quanto maior o campo elétrico aplicado, maior é a temperatura estacionária final atingida. No caso de um campo elétrico nulo, $0 kV/cm$, a pseudotemperatura dos portadores, $T_C^*(t)$, atinge no estado estacionário final a temperatura da rede de $300 Kelvin$ [2].

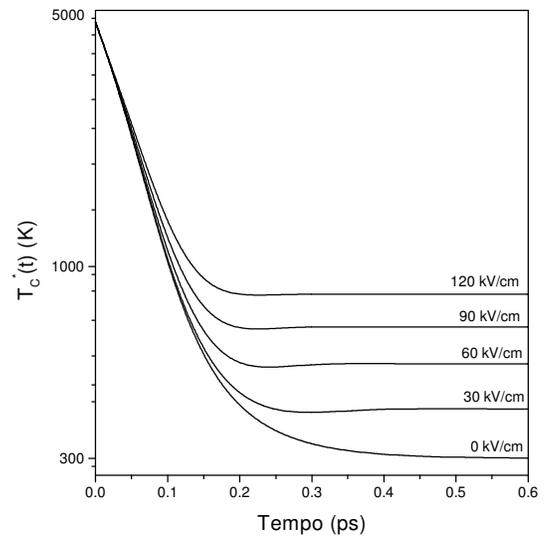


Figura 1 - Evolução temporal da pseudotemperatura dos portadores para diferentes campos elétricos aplicados.

As Figuras 2 e 3 mostram, respectivamente, a evolução temporal do módulo da velocidade de deslocamento dos elétrons, $v_e(t)$, e dos buracos, $v_h(t)$, para diferentes valores do campo elétrico aplicado.

Destacamos que embora a velocidade de deslocamento dos buracos tenha praticamente o mesmo comportamento daquela dos elétrons, ela é aproximadamente uma ordem de grandeza menor que a velocidade dos elétrons. Este fato é em razão dos buracos serem mais massivos que os elétrons, ou seja, os buracos sofrem uma aceleração menor pelo campo elétrico aplicado que os elétrons. Notamos também que quanto maior o campo elétrico aplicado, mais rapidamente o sistema atinge o estado estacionário.

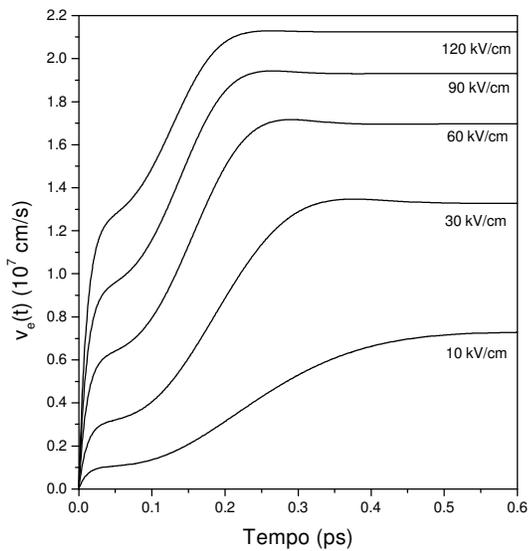


Figura 2 - Evolução temporal da velocidade de deslocamento dos elétrons para diferentes campos elétricos aplicados.

As Figuras 4 e 5 mostram, respectivamente, a evolução temporal da pseudotemperatura dos fônons ópticos longitudinais $T_{LO}^*(t)$, e transversais $T_{TO}^*(t)$, respectivamente, para diferentes valores de campo elétrico aplicado. Por elas se comprova que a taxa de variação da pseudotemperatura dos portadores é muito maior do que da pseudotemperatura dos fônons LO e TO (vide Fig. 1).

Os fônons ópticos sofrem inicialmente um rápido aquecimento proveniente da energia térmica recebida dos portadores e depois se resfriam para o meio (reservatório ou banho). Este rápido aumento inicial na pseudotemperatura dos fônons se deve ao forte acoplamento do espalhamento portador-fônon e a natureza polar do semicondutor. Notamos ainda que a taxa de variação da pseudotemperatura do subsistema de fônons ópticos cresce com a intensidade do campo aplicado e que a variação na temperatura dos fônons LO é muito maior que

a dos fônons TO. Para um campo elétrico nulo os fônons se resfriam para 300 Kelvin [2].

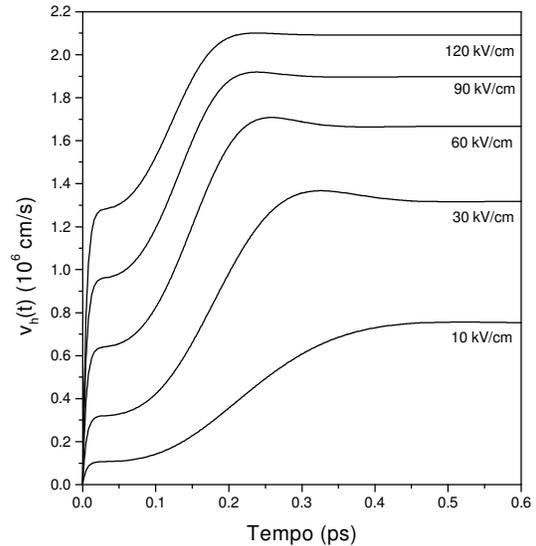


Figura 3 - Evolução temporal da velocidade de deslocamento dos buracos para diferentes campos elétricos aplicados.

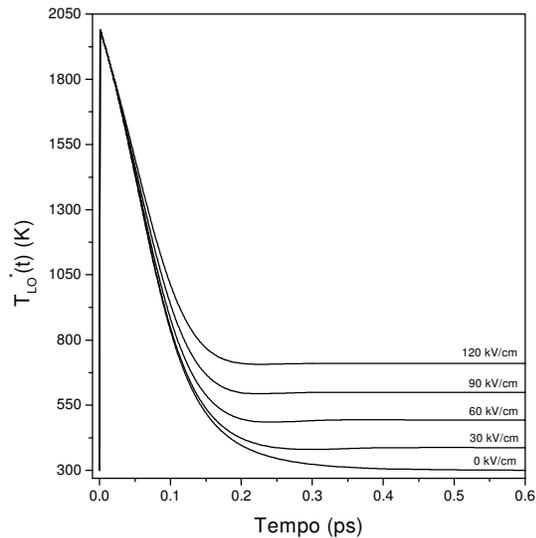


Figura 4 - Evolução temporal da pseudotemperatura dos fônons longitudinais ópticos para diferentes campos elétricos aplicados.

Resumindo, mostramos um estudo feito sobre os transientes ultra-rápidos de transporte em um Plasma Semicondutor Altamente Excitado (PSAE). Para o nosso propósito recorreremos a uma potente teoria de transporte quântica não linear proveniente do Método do Operador Estatístico de Não Equilíbrio (MOENE) na forma devida a Zubarev. Foi deduzido um conjunto acoplado de equações

integro-diferenciais de transporte generalizadas não lineares para um conjunto básico de variáveis termodinâmicas de não equilíbrio, supostas apropriadas para a descrição do estado macroscópico do PSAE. Relembramos que a escolha de um conjunto básico de variáveis para a descrição do estado macroscópico do sistema é uma das dificuldades fundamentais associadas com a termodinâmica de não equilíbrio [33] e a mecânica estatística [12].

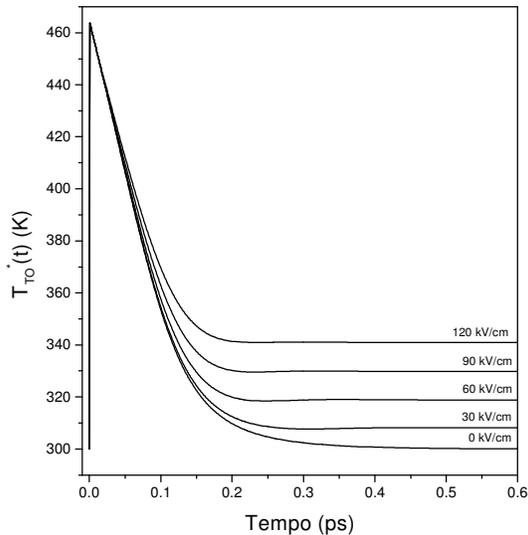


Figura 5 - Evolução temporal da pseudotemperatura dos fônons transversais ópticos para diferentes campos elétricos aplicados.

4 Referências

- [1] A. R. Vasconcellos, A. C. Algarte, R. Luzzi, Phys. Rev. B **52**, 13936 (1996).
- [2] C. G. Rodrigues, V. N. Freire, J. P. Costa, A. R. Vasconcellos, and R. Luzzi, Phys. Stat. Sol. (b) **216** (1), 35 (1999).
- [3] C. G. Rodrigues, V. N. Freire, R. Luzzi, A. R. Vasconcellos, Appl. Phys. Lett., **76** (14), 1893 April (2000).
- [4] E. M. Conwell, *High-Field Transport in Semiconductors-Sol. State Phys.*, Suppl. 9 (Academic, New York, 1967).
- [5] J. G. Ruch, IEEE Transactions on Electron Devices ED-19 (5), 652 (1972); C. Jacoboni and L. Reggiani, Adv. in Phys. **28** (4), 493 (1979).
- [6] S. J. Pearson, Ed., articles in *GaN and Related Materials*, in the series Optoelectronic Properties of Semiconductors and Superlattices (Gordon and Breach, New York, 1997).
- [7] D. H. Auston, Phys. Today **43** (2), 46-54 (1990).
- [8] C. J. Joshi, Phys. Today **48** (1), 36-43 (1995).
- [9] C. H. B. Cruz, H. L. Fragnito, *Fenômenos Ultrarápidos: Geração de Pulsos Laser Ultracurtos e Aplicações*, Notas de Física No. 3 (Instituto de Física Gleb Wataghin, Unicamp, 1992).
- [10] D. N. Zubarev, *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics* (Consultants Bureau New York, 1974).
- [11] D. Zubarev, V. Morozov and G. Röpke, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes* (Akademie Verlag, Berlin, 1996).
- [12] R. Zwanzig, Ann. Rev. Phys. Chem. **16**, 67 (1965); Kinam (Mexico), Vol. 3, (1981); H. J. Raveché, *Perspectives in Statistical Physics* (North Holland, Amsterdam, 1981).
- [13] A. R. Vasconcellos, R. Luzzi and L. S. Garcia Colin, Physical Review A **43**, 6622 (1991); A. R. Vasconcellos, R. Luzzi and L. S. Garcia Colin, J. Non-Equilib. Thermodyn. Phys. **43**, 6633 (1991).
- [14] A. I. Akhiezer and S. V. Peletinskii, *Methods of Statistical Physics* (Pergamon, Oxford, 1981).
- [15] S. V. Peletinskii, A. A. Yatsenko, Soviet-Phys., JETP **26**, 773 (1968).
- [16] N. N. Bogoliubov, *Studies in Statistical Mechanics I* (North Holland, Amsterdam, (1962).
- [17] G. E. Uhlenbeck, *Lectures in Statistical Mechanics* (Am. Math. Soc., Providence, RI, 1963).
- [18] L. L. Bulshvili and M. D. Sviadadze, Physica **59**, 697 (1972).
- [19] V. P. Khalatnikov, Tor. Mat. Fiz. **35**, 127 (1978).
- [20] E. T. Jaynes, *Jaynes Papers on Probability, Statistics, and Statistical Physics*, R. D. Rosenkrantz (Dordrecht, Reidel, 1983).
- [21] R. D. Levine and M. Tribus, *The Maximum Entropy Formalism*, (MIT Press, Cambridge, MA, 1978).
- [22] H. Haken, *Complex Systems: Operational Approaches* (Springer, Berlin, 1985); G. T. Moore and M. O. Scully, *Frontiers of Nonequilibrium Statistical Physics* (Plenum, New York, 1968); T. W. Grandy, *Foundations of Statistical Mechanics*, Vols. 1 e 2 (Dordrecht, Reidel, 1987).
- [23] E. T. Jaynes, *Maximum Entropy and Bayesian Methods* (Dordrecht, Kluwer, 1989); Grandy and L. H. Schick, *Maximum Entropy and Bayesian Methods* (Dordrecht, Kluwer, 1990).
- [24] M. A. Tenan, A. R. Vasconcellos and R. Luzzi, Fortschr. Phys./Prog. Phys. **45**, 1 (1997).
- [25] A. C. Algarte, A. R. Vasconcellos, R. Luzzi and A. J. Sampaio, Revista Brasileira de Física **15**, 42 (1986).
- [26] L. Lauck, A. R. Vasconcellos and R. Luzzi, Physica A **168**, 789 (1990).
- [27] C. V. Shank, D. H. Auston, E. P. Ippen and O. Teschke, Solid State Communications **26**, 567 (1978); R. J. Seymour, M. R. Junnarkar, R. R. Alfano, Sol. State Comm. **41** (9), 657 (1982); D. von der Linde and R. Lambrich, Phys. Rev. Lett. **42** (16), 1090 (1978).
- [28] C. G. Rodrigues, Tese de doutorado, IFGW-UNICAMP (2000).
- [29] P. L. Taylor, *A Quantum Approach to the Solid State* (Prentice-Hall, 1970).
- [30] A. S. Davydov, *Quantum Mechanics* (Addison Wesley Readings, MA, 1968).
- [31] O. Madelung, *Introduction to Solid-State Theory* (Springer, Berlin, 1996).
- [32] J. M. Ziman, *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids* (Clarendon, Oxford, 1960).
- [33] J. Casas-Vazquez, D. Jou, and G. Lebon, *Recent Developments in Nonequilibrium Thermodynamics*, (Springer, Berlin, 1984).