



**UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE**

**FACULDADE DE CIÊNCIAS**

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

**ENERGIAS RENOVÁVEIS**

**INVESTIGAÇÃO DA REDISTRIBUIÇÃO DOS ELECTRÕES ENTRE  $\Delta_1$ - E  
 $\Delta_2$ -VALES ENERGÉTICOS DO GERMÂNIO NAS CONDIÇÕES DA  
DEFORMAÇÃO ELÁSTICA UNIAxIAL ORIENTADA  
ARBITRARIAMENTE NO PLANO (110)**

DOCENTE: PROF. DOUTOR CUAMBA B.C

AUTOR: CUAMBA, ARMINDO SAMUEL

Maputo, Novembro de 2008



**UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE**

**FACULDADE DE CIÊNCIAS**

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

**TRABALHO DE LICENCIATURA**

**INVESTIGAÇÃO DA REDISTRIBUIÇÃO DOS ELECTRÕES ENTRE  $L_1$ -E  
 $\Delta_1$ -VALES ENERGÉTICOS DO GERMÂNIO NAS CONDIÇÕES DA  
DEFORMAÇÃO ELÁSTICA UNIAxIAL ORIENTADA  
ARBITRARIAMENTE NO PLANO (110)**

**AUTOR: CUAMBA, ARMINDO SAMUEL**

**Maputo, Novembro de 2008**



**UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE**

**FACULDADE DE CIÊNCIAS**

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

**TRABALHO DE LICENCIATURA**

**INVESTIGAÇÃO DA REDISTRIBUIÇÃO DOS ELECTRÕES ENTRE  $L_1$ - E  
 $\Delta_1$ -VALES ENERGÉTICOS DO GERMÂNIO NAS CONDIÇÕES DA  
DEFORMAÇÃO ELÁSTICA UNIAxIAL ORIENTADA  
ARBITRARIAMENTE NO PLANO  $(1\bar{1}0)$**

**SUPERVISOR: PROF. DOUTOR CHERNYSH V.V**

**AUTOR: CUAMBA, ARMINDO SAMUEL**

**Maputo, Novembro de 2008**

## DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho à todos aqueles que me apoiaram durante a minha formação e à todos que contribuem na investigação dos diferentes fenómenos naturais.

## AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar quero agradecer à DEUS, pela força que me dá para trabalhar.

Agradeço ao meu Supervisor Prof. Dr. Volodmyr Chernysh pelos valiosos pontos de vista durante a realização deste trabalho, à todos os professores do Departamento de Física pela sua contribuição na minha formação. Agradeço também aos meus pais e aos meus irmãos que me ajudaram em todos os momentos da minha formação.

## DECLARAÇÃO DE HONRA

Declaro por minha honra que este trabalho é resultado da minha investigação e todas as fontes usadas estão devidamente mencionadas no texto e nas referências bibliográficas.

Maputo, Novembro 2008.

Armindo Samuel Cuamba

(Armindo Samuel Cuamba )

## LISTA DE FIGURAS

Fig.1. Esquema energético da banda de condução do Germânio.....	3
Fig.2. Numeração dos vales energéticos em $L_1 - \Delta_1$ -modelo do Germânio.....	5
Fig.3. Esquema do programa de cálculo dos potenciais de deformação e números de preenchimento.....	24
Fig.4. Potenciais de deformação $T = 78K, \beta = 0^0$ .....	30
Fig.5. Potenciais de deformação. $T = 78K, \beta = 5^0$ .....	30
Fig.6. Potenciais de deformação $T = 78K, \beta = 10^0$ .....	30
Fig.7. Potenciais de deformação $T = 78K, \beta = 54.7365^0$ .....	30
Fig.8. Potenciais de deformação $T = 78K, \beta = 90^0$ .....	30
Fig.9. Potenciais de deformação $T = 293K, \beta = 0^0$ .....	30
Fig.10. Potenciais de deformação $T = 293K, \beta = 5^0$ .....	31
Fig.11. Potenciais de deformação $T = 293K, \beta = 10^0$ .....	31
Fig.12. Potenciais de deformação $T = 293K, \beta = 90^0$ .....	31
Fig.13. Potenciais de deformação $T = 293K, \beta = 54.7365^0$ .....	31
Fig.14. Potenciais de deformação $T = 78K, P = 15 \cdot 10^3 \text{ kgf/cm}^2$ .....	31

Fig.15. Potenciais de deformação $T = 78K$ . $P = 25 \cdot 10^3 \text{ kgf/cm}^2$ .....	31
Fig.16. Números de preenchimento $T = 78K$ , $\beta = 0^0$ .....	32
Fig.17. Números de preenchimento $T = 78K$ , $\beta = 5^0$ .....	32
Fig.18. Números de preenchimento $T = 78K$ , $\beta = 10^0$ .....	32
Fig.19 Números de preenchimento $T = 78K$ , $\beta = 54.7365^0$ .....	32
Fig.20. Números de preenchimento $T = 78K$ , $\beta = 90^0$ .....	32
Fig.21. Números de preenchimento $T = 293K$ , $\beta = 0^0$ .....	32
Fig.22. Números de preenchimento $T = 293K$ , $\beta = 5^c$ .....	33
Fig.23. Números de preenchimento $T = 293K$ , $\beta = 10^0$ .....	33
Fig.24. Números de preenchimento $T = 293K$ , $\beta = 54.7365^0$ .....	33
Fig.25. Números de preenchimento $T = 293K$ , $\beta = 90^0$ .....	33



## UNIDADES E SÍMBOLOS DE ALGUMAS GRANDEZAS

Parâmetro	Símbolo	Unidade
1. Constante de Boltzmann	$k$	$[eV/K]$
2. Constante reduzida de Plank	$\hbar$	$[j \cdot s]$
3. Constantes dos potenciais de deformação	$C_1^{I,II}, C_2^{I,II}$	$[eV], [erg]$
4. Distância energética entre os vales	$\Delta E_0$	$[eV]$
5. Massa do electrão livre	$m_0$	$[g]$
6. Potenciais de deformação	$E_{L_i}, E_{\Delta_i}$	$[eV]$
7. Potencial químico	$\mu$	$[eV]$
8. Pressão (tensão deformadora)	$P$	$[kgf/cm^2]$
9. Temperatura absoluta	$T$	$[K]$
10. Tensor dos módulos elásticos	$S_{11}, S_{12}, S_{44}$	$[cm^2/kgf]$

## RESUMO

No presente trabalho estão apresentados resultados da investigação teórica da redistribuição dos electrões entre os vales energéticos do germânio nas condições da deformação elástica uniaxial orientada arbitrariamente no plano cristalográfico  $(1\bar{1}0)$ .

Usou-se a teoria dos potenciais de deformação dos cristais cúbicos para calculá-los nestas condições de deformação e depois foram deduzidas as expressões analíticas para os números de preenchimento para cada vale respectivamente.

O cálculo dos potenciais de deformação permitiu a investigação do deslocamento dos vales energéticos. Das expressões analíticas gerais obtidas neste trabalho para os casos particulares seguem os resultados obtidos por outros autores.

Os resultados dos cálculos numéricos efectuados pelo programa desenhado permitiram investigar a cinética do deslocamento dos vales e a redistribuição dos electrões entre eles e foram considerados e analisados alguns casos particulares da orientação do esforço deformador.

Foi comprovada a dependência fraca dos potenciais de deformação da temperatura.

A redistribuição dos electrões foi investigada sob as temperaturas do nitrogénio líquido e sob as do ambiente.

Os resultados apresentados podem ser usados para o cálculo dos diferentes efeitos ligados com o transporte de carga, para determinação de certos parâmetros característicos dos monocristais em estudo e para modelação do comportamento dos semicondutores mais complicados.

**ÍNDICE****PÁGINAS**

DEDICATÓRIA.....	i
AGRADECIMENTOS.....	ii
DECLARAÇÃO DE HONRA.....	iii
LISTA DE FIGURAS.....	iv
UNIDADES E SÍMBOLOS DE ALGUMAS GRANDEZAS.....	vi
RESUMO.....	vii
<b>I - INTRODUÇÃO.....</b>	<b>2</b>
<b>II - REDISTRIBUIÇÃO DOS PORTADORES DE CARGA ENTRE OS VALES ENERGÉTICOS E A SUA CONSEQUÊNCIA.....</b>	<b>3</b>
<b>III. <math>L_1 - \Delta_1</math> MODELO DO GERMÂNIO.....</b>	<b>4</b>
<b>IV – FUNÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO E NÚMEROS DE PREENCHIMENTO..</b>	<b>6</b>
<b>V – CÁLCULO DOS POTENCIAIS DE DEFORMAÇÃO.....</b>	<b>11</b>
<b>VI - POTENCIAIS DE DEFORMAÇÃO. CASOS PARTICULARES.....</b>	<b>17</b>
<b>VII - NÚMEROS DE PREENCHIMENTO.....</b>	<b>19</b>
<b>VIII – CINÉTICA DE DESLOCAMENTO DOS VALES ENERGÉTICOS.</b>	<b>24</b>
<b>IX - REDISTRIBUIÇÃO DOS ELECTRÕES ENTRE OS VALES ENERGÉTICOS. ANÁLISE DOS RESULTADOS NUMÉRICOS.....</b>	<b>28</b>
<b>X-CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....</b>	<b>33</b>
<b>XI - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>34</b>
<b>ANEXOS.....</b>	<b>37</b>

## 1 - INTRODUÇÃO

A investigação dos fenómenos de transporte de carga representa por si o interesse científico e prático. O interesse científico significa, que a investigação dos fenómenos de transporte permite determinar massas eficazes dos portadores de carga, características do espectro energético dos portadores e peculiaridades dos mecanismos do espalhamento dos portadores de carga.

O interesse prático significa que na base de muitos efeitos criam-se os dispositivos electrónicos (por exemplo, indicadores de Hall, fotoresistores e etc).

Em muitos casos os dispositivos electrónicos funcionam em condições extremas (altas temperaturas, fortes campos eléctricos e magnéticos, significativos campos das tensões externas). É por isso que se torna importante a investigação dos materiais em condições extremas. É de salientar, que estas investigações tanto experimentais como teóricas indicam o caminho da busca dos novos materiais artificiais mais eficazes para diferentes aplicações práticas, em particular na transformação da energia térmica, incluindo à radiação solar, para a energia eléctrica.

As necessidades práticas estimularam o início das investigações das propriedades dos diferentes materiais nas condições extremas, em particular nas condições da deformação elástica deles. Nestas investigações em 1954 Smith [1] descobriu a variação grande da resistividade dos monocristais do Ge e Si na presença das deformações elásticas uniaxiais dos monocristais indicados. Mais tarde, em 1955 Herring [2] explicou teoricamente este fenómeno que adquiriu o nome da piezoresistência Herring-Smith. Segundo [2], a deformação elástica uniaxial (DEU) dum monocristal de Si ou Ge provoca o deslocamento não idêntico dos vales na escala da energia e, conseqüentemente, a redistribuição dos electrões entre estes vales energéticos.

O Germânio foi escolhido como objecto de estudo por um lado por causa da sua ampla utilização na indústria electrónica não só como monocristal para a fabricação dos dispositivos e partes dos dispositivos mas, também, na qualidade dum material aditivo na preparação de heteroestruturas complicadas e diferentes ligas semicondutoras. Por outro lado, para o Germânio são bem estabelecidas a série dos parâmetros importantes para realizar os cálculos numéricos e modelar as propriedades dos semicondutores e ligas semicondutoras mais complicadas.

## II - REDISTRIBUIÇÃO DOS PORTADORES DE CARGA ENTRE OS VALES ENERGÉTICOS E A SUA CONSEQUÊNCIA

Como se sabe, a estrutura energética da banda de condução do germânio consiste em quatro vales equivalentes situados nos pontos  $L_1$  ao longo das direcções  $\langle 111 \rangle$ , um vale isoenergético situado no ponto  $\Gamma_2$  no centro da banda de Brillouin e seis vales equivalentes situados nos pontos  $\Delta_1$  ao longo das direcções  $\langle 100 \rangle$ . Os  $\Gamma_2$ - e  $\Delta_1$ -vales estão distantes a 0.14 eV e 0.18 eV respectivamente em relação aos  $L_1$ -vales ( $L_1$ -vales estão localizados na vizinhança dos mínimos absolutos da banda de condução).

Esquema energético da banda de condução está mostrada na fig.1 [21].

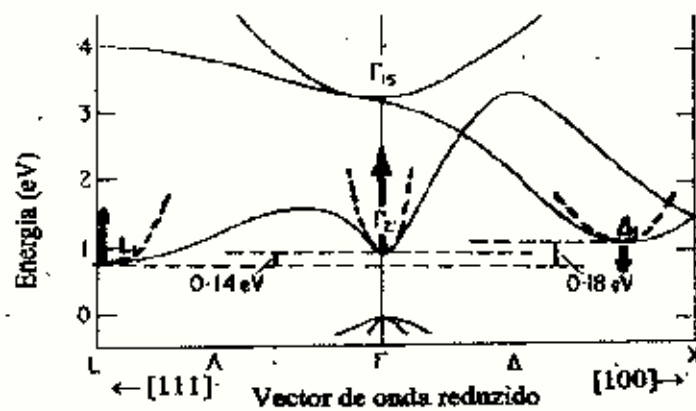


Fig.1

Fig.1. Esquema energético da banda de condução do Germânio.

Nas condições habituais (temperaturas não são muito altas, campos eléctricos não são fortes, deformações dos cristais não são muito grandes) praticamente todos os electrões estão localizados em  $L_1$ -vales ( $L_1$ -modelo do Germânio). DEU orientada não simetricamente em relação aos vales energéticos provoca o deslocamento de alguns vales em relação aos outros e, pois, a redistribuição dos electrões entre os  $L_1$ -vales.

É assim que surge a piezoresistência de Herring-Smith.

Desde momento da descoberta e explicação da piezoresistência de Herring-Smith foram realizadas a quantidade numerosa das investigações teóricas e experimentais, que não só comprovaram as ideias de Herring, mas permitiram estabelecer algumas relações importantes para a Física e Tecnologia dos materiais semicondutores [3 – 9].

Em particular, foram investigadas as propriedades dos monocristais do n-Ge elasticamente deformado para os casos da orientação da tensão deformadora ao longo dos eixos cristalográficos diferentes e, também foi considerada, a situação quando a tensão deformadora está orientada arbitrariamente no plano  $(\bar{1}\bar{1}0)$ . Em todas as investigações deste género a tensão deformadora  $P$  não foi grande, i.e.  $P < 10^4 \text{ kgf/cm}^2$ , o que significa, que considerou-se só a redistribuição dos electrões entre  $L_1$ -vales [5 – 7].

### III. $L_1$ - $\Delta_1$ MODELO DO GERMÂNIO

Investigação das propriedades electrofísicas do n-Ge na presença dos campos eléctricos grandes indicou que nos processos de transporte de carga começam desempenhar o papel importante, também, os vales relativamente afastados em relação aos  $L_1$ -vales, i.e.  $\Gamma_2$  e  $\Delta_1$ -vales.

Para esclarecer o papel e características dos vales situados acima dos  $L_1$ -vales foram realizadas as investigações especiais [10 – 14]. Os resultados destas investigações foram as seguintes.

O vale  $\Gamma_2$  possui a superfície isoenergética esférica, massa eficaz dos electrões nele é  $m_{\Gamma_2}^* = 0.037m_0$  e a densidade dos estados é pequena, além disso nos cristais deformados este vale sobe rápido na escala energética e é por isso que praticamente é vazia.

Portanto ficam para a consideração  $L_1$ - e  $\Delta_1$ -vales. Assim surge o  $L_1$ - $\Delta_1$ -modelo do Germânio. Numeração dos  $L_1$ - e  $\Delta_1$ -vales do Germânio está mostrada na fig.2. Anotemos que, como é evidente os resultados experimentalmente observados não dependem da numeração dos vales.

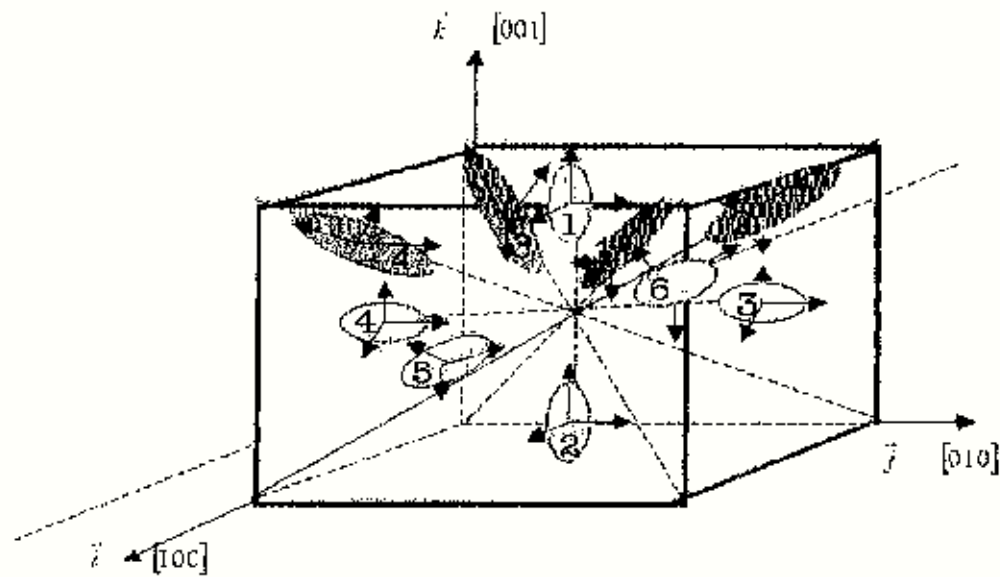


Fig.2. Numeração dos vales energéticos em  $L_1 - \Delta_1$  modelo do Germânio.

É necessário sublinhar, que haviam muitas tentativas para determinar as características principais dos  $\Delta_1$ -vales [10-21], o que resultou os valores bem dispersos não só das massas eficazes mas também dos outros parâmetros destes vales (constantes dos potenciais de deformação, algumas características do espalhamento dos electrões entre os vales equivalentes e os não equivalentes). Foram realizadas as experiências quando a tensão deformadora está orientada no plano  $(1\bar{1}0)$  e esta tensão é relativamente grande ( $P = 0 \div 3,0 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$ ). Nestas condições sob as pressões  $P > 15 \cdot 10^3 \text{ kgf/cm}^2$  começam a desempenhar o papel principal os  $\Delta_1$ -vales. Neste caso surge a redistribuição dos electrões entre os  $L_1$ - e  $\Delta_1$ -vales, o que, por seu turno, provoca o surgimento do novo mecanismo da piezoresistência, diferente da piezoresistência de Herring-Smith [1,2,13,14]. As peculiaridades da redistribuição dos electrões entre  $L_1$ - e  $\Delta_1$ -vales no caso da tensão deformadora orientada arbitrariamente no plano  $(1\bar{1}0)$  estão investigadas no presente trabalho.

#### IV – FUNÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO E NÚMEROS DE PREENCHIMENTO

Em geral a distribuição dos electrões obedece a estatística de Fermi-Dirac, para o gás de electrões degenerado, a função da distribuição para os electrões num vale isoenergético “s” tem a forma [3,4]:

$$f_i^{(s)} = \left( e^{\frac{\epsilon_i - \mu_0}{kT}} + 1 \right)^{-1}, \quad (1)$$

onde  $\mu_0$  é o potencial químico do cristal não deformado, k é a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta.

Considerando os cristais suficientemente puros, i.e. a concentração dos electrões não é grande ( $n_0 < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ), então o sistema dos electrões não é degenerado mesmo à temperatura do ambiente.

Sublinhemos que neste caso devido ao multiplicador  $e^{\frac{\epsilon_i - \mu_0}{kT}} \gg 1$  a função da distribuição de Fermi-Dirac transforma-se para a função da distribuição de Maxwell-Boltzmann dado de modo:

$$f_i^{(s)} = e^{\frac{\mu_0 - \epsilon_i}{kT}}, \quad (2)$$

A aplicação das tensões elásticas para o cristal provoca a variação da energia dos electrões. Essa variação da energia dos electrões se descreve por tais chamados potenciais de deformação. Potencial de deformação é a energia potencial adicional que o electrão tem no cristal deformado. O potencial químico dos electrões também varia no cristal deformado. Deste modo a função equilibrada da distribuição dos electrões toma a forma:

$$f_i^{(s)} = e^{\frac{\mu - E_s - \epsilon_i}{kT}}, \quad (3)$$

onde  $E_s$  é o potencial de deformação para um vale “s” e  $\mu$  é o potencial químico do cristal deformado. Partindo de expressão (3) podemos escrever a função da distribuição dos electrões em  $L_1$  - vales no cristal deformado de modo:

$$f_{L_1}^{(j)} = e^{\frac{\mu - E_{L_1}^{(j)} - \epsilon_i}{kT}}, \quad (4)$$

onde j é o índice que indica o número de  $L_1$ -vale e percorre os seguintes valores 1,2,3,4.



Levando em conta que os  $L_1$  - vales estão na origem do referencial e os  $\Delta_1$  -vales encontram-se a uma distância energética  $\Delta E_c = 0.18$  eV acima dos  $L_1$  - vales na escala energética, a função da distribuição dos electrões para os  $\Delta_1$  -vales deve conter o factor  $\Delta E_c$ , e (3) modifica-se para a forma:

$$f_{\vec{k}}^{(s)} = e^{-\frac{\mu - E_{L_1}^{(s)} - E_c - \Delta E_c}{kT}} \quad (5)$$

Nesta expressão  $k$  indica o número de  $\Delta_1$  -vale, que percorre os valores (1,2), (3,4), (5,6).

Senão conhecida a função da distribuição equilibrada para cada vale no cristal deformado e o não deformado podemos calcular o número dos electrões [3,4,15,19 - 22] para os dois casos pela expressão:

$$N_s = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\tau_k} f_{\vec{k}}^{(s)} d\tau_k \quad d\tau_k = dk_1 dk_2 dk_3 \quad (6)$$

onde  $d\tau_k$  é o elemento do volume no espaço de quase impulsos deformados.

Caso de n-Ge a lei de dispersão quando dada em aproximação da massa eficaz é uma função quadrática de quase vector de onda [3,4,19 - 22] e possui a forma:

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_1^2 + k_2^2}{m_{l1}} + \frac{k_3^2}{m_{l3}} \right) = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_1^2 + k_2^2}{m_l} + \frac{k_3^2}{m_c} \right) = \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{k_i^2}{m_i} \quad (7)$$

Introduzindo os tais chamados impulsos deformados e realizando os cálculos semelhantes às feitas em [3,19 - 22] é fácil obter a expressão geral para o número dos electrões:

$$N_{L_1, \Delta_1}^{(s)} = \frac{2}{(2\pi)^3} \exp\left(\frac{\mu - E_{L_1, \Delta_1}^{(s)}}{kT}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{l1}kT} k_1^2\right) dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{l3}kT} k_2^2\right) dk_2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{lc}kT} k_3^2\right) dk_3 \quad (8)$$

onde "s" indica o número de vale.

A integração da expressão (8) conduz ao resultado:

$$N_{L_1, \Delta_1}^{(s)} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi kT)^{\frac{3}{2}} (m_{l1}^{(s)})^{\frac{3}{2}} \exp(\mu' - E_{L_1, \Delta_1}^{(s)}) \quad (9)$$

onde  $\mu' = \mu/kT$  é o potencial químico reduzido para o cristal deformado,  $E_{L_1, \Delta_1}^{(s)} = E_{L_1, \Delta_1}^{(s)}/kT$  é o potencial de deformação reduzido do vale "s" e o factor  $m_{l1}^{(s)} = (m_{l1}^{(s)} \cdot m_{l3}^{(s)})^{\frac{1}{2}}$  é a massa eficaz da densidade dos estados, para os  $L_1$  - e  $\Delta_1$  -vales.

A expressão (9), é a expressão geral para o cálculo do número dos electrões num cristal deformado. No caso particular a expressão para o número dos electrões dos  $L_1$  - vales de Germânio, toma a forma:

$$N_{L_1}^{(d)} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi kT)^{\frac{3}{2}} \cdot (m_{11}^{(L_1)} m_{33}^{(L_1)})^{\frac{1}{2}} \exp(\mu' - E_L^{(d)}) \quad (10)$$

Na ausência da deformação a expressão para o número dos electrões para um dos  $L_1$  - vales de Germânio é:

$$N_{L_1}^{(n)} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi kT)^{\frac{3}{2}} \cdot (m_{11}^{(L_1)} m_{33}^{(L_1)})^{\frac{1}{2}} \exp(\mu_0') \quad (11)$$

De modo análogo podemos introduzir as expressões para o número dos electrões no cristal deformado e não deformado para um dos  $\Delta_1$  -vales do Germânio pelas seguintes expressões:

$$N_{\Delta_1}^{(d)} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi kT)^{\frac{3}{2}} \cdot (m_{11}^{(\Delta_1)} m_{33}^{(\Delta_1)})^{\frac{1}{2}} \cdot \exp(\mu' - E_{\Delta_1}^{(d)} - \Delta E_0^*) \quad (12)$$

Na ausência de deformação a expressão para o número dos electrões para um dos  $\Delta_1$  -vales é:

$$N_{\Delta_1}^{(n)} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi kT)^{\frac{3}{2}} (m_{11}^{(\Delta_1)} m_{33}^{(\Delta_1)})^{\frac{1}{2}} \exp(\mu_0' - \Delta E_0^*) \quad (13)$$

Sublinhemos neste caso que devido ao multiplicador  $e^{-\frac{N_0}{kT}} \ll 1$  os  $\Delta_1$  -vales são praticamente vazios mesmo sob as temperaturas do ambiente. Este facto justifica o uso do  $L_1$  - modelo do Germânio para menores tensões elásticas ( $P < 10^4 \text{ kgf/cm}^2$ ) [1-9].

O potencial químico na presença das deformações obtém-se a partir da equação da neutralidade para cristal deformado e o não deformado. Considerando que  $N_0$  é o número total dos electrões no cristal e levando em conta que existem quatro equivalentes  $L_1$  vales, e seis equivalentes  $\Delta_1$  -vales, para o cristal não deformado no caso geral a equação da neutralidade tem a forma:

$$4N_L^{(n)} + 6N_{\Delta_1}^{(n)} = N_0 \quad (14)$$

No cristal deformado a equação da neutralidade tem a forma:

$$N_{L_1}^{(d)} + N_{L_2}^{(d)} + N_{L_3}^{(d)} + N_{L_4}^{(d)} + 2N_{\Delta_1}^{(d)} + 2N_{\Delta_2}^{(d)} + 2N_{\Delta_3}^{(d)} = N_0 \quad (15)$$

ou

$$\sum_{i=1}^4 N_{L_i}^{(d)} + 2 \sum_k N_{\Delta_k}^{(d)} = N_0 \quad (15a)$$

Anotemos que o multiplicador "2" na parte direita na última expressão apareceu devido ao facto de que cada dois  $\Delta_1$ -vales estão orientados identicamente em relação aos eixos cristalográficos.

Nas fórmulas para os números dos electrões num vale do cristal deformado e do não deformado entram os potenciais químicos do cristal deformado  $\mu^*$  e do não deformado  $\mu_0^*$ . Para encontrar a relação entre estas grandezas igualamos (14) e (15):

$$4N_{L_1}^{(0)} + 6N_{\Delta_1}^{(0)} - N_{L_1}^{(1)} + N_{L_1}^{(2)} + N_{L_1}^{(3)} + N_{L_1}^{(4)} + 2N_{\Delta_1}^{(0,2)} + 2N_{\Delta_1}^{(0,4)} + 2N_{\Delta_1}^{(0,6)}, \quad (16)$$

ou

$$4N_{L_1}^{(0)} + 6N_{\Delta_1}^{(0)} = \sum_{i=1}^4 n_{L_1}^{(i)} + 2 \sum_k n_{\Delta_1}^{(k)}. \quad (16a)$$

Podemos introduzir o conceito do número de preenchimento para cada vale, definindo este como sendo o número relativo dos electrões contidos num vale isoenergético. Para encontrar este parâmetro sob a forma explícita vamos dividir a equação da neutralidade na presença das deformações (15) por  $N_0$ :

$$\frac{N_{L_1}^{(0)}}{N_c} + \frac{N_{L_1}^{(2)}}{N_o} + \frac{N_{L_1}^{(3)}}{N_o} + \frac{N_{L_1}^{(4)}}{N_o} + 2 \frac{N_{\Delta_1}^{(0,2)}}{N_c} + 2 \frac{N_{\Delta_1}^{(0,4)}}{N_o} + 2 \frac{N_{\Delta_1}^{(0,6)}}{N_o} = 1, \quad (17)$$

ou

$$\sum_{i=1}^4 \frac{N_{L_1}^{(i)}}{N_o} + 2 \sum_k \frac{N_{\Delta_1}^{(k)}}{N_o} = 1. \quad (17a)$$

Introduzindo o número de preenchimento para cada vale pelas expressões:

$$n_{L_1}^{(0)} = \frac{N_{L_1}^{(0)}}{N_o}, \quad n_{L_1}^{(2)} = \frac{N_{L_1}^{(2)}}{N_o}, \quad n_{L_1}^{(3)} = \frac{N_{L_1}^{(3)}}{N_o}, \quad n_{L_1}^{(4)} = \frac{N_{L_1}^{(4)}}{N_o}, \quad n_{\Delta_1}^{(0,2)} = \frac{N_{\Delta_1}^{(0,2)}}{N_c}, \quad n_{\Delta_1}^{(0,4)} = \frac{N_{\Delta_1}^{(0,4)}}{N_o}, \quad n_{\Delta_1}^{(0,6)} = \frac{N_{\Delta_1}^{(0,6)}}{N_o}, \quad (18)$$

e substituindo (18) na expressão (17) obteremos a seguinte relação:

$$n_{L_1}^{(0)} + n_{L_1}^{(2)} + n_{L_1}^{(3)} + n_{L_1}^{(4)} + 2n_{\Delta_1}^{(0,2)} + 2n_{\Delta_1}^{(0,4)} + 2n_{\Delta_1}^{(0,6)} = 1. \quad (19)$$

A substituição às fórmulas dos números dos electrões para cada vale (10-13) na expressão (16) da equação da neutralidade obteremos:

$$\begin{aligned} 4m_N^{(0)} \exp(\mu_0^*) + 6m_N^{(0)} \exp(\mu_0^* - \Delta E_c^*) &= m_N^{(1)} \exp(\mu^* - E_{L_1}^{(1)*}) + m_N^{(2)} \exp(\mu^* - E_{L_1}^{(2)*}) + \\ &+ m_N^{(3)} \exp(\mu^* - E_{L_1}^{(3)*}) + m_N^{(4)} \exp(\mu^* - E_{L_1}^{(4)*}) + 2m_N^{(0,2)} \exp(\mu^* - E_{\Delta_1}^{(0,2)*} - \Delta E_v^*) + \\ &+ 2m_N^{(0,4)} \exp(\mu^* - E_{\Delta_1}^{(0,4)*} - \Delta E_v^*) + 2m_N^{(0,6)} \exp(\mu^* - E_{\Delta_1}^{(0,6)*} - \Delta E_v^*) \end{aligned} \quad (20)$$

Os cálculos evidentes resultam:

$$e^{n_i} = \frac{4m_N^{(L_i)} \frac{3}{2} + 6m_N^{(\Delta_i)} \frac{3}{2} e^{-\Delta \epsilon_i}}{m_N^{(L_i)} \left[ e^{-\epsilon_{L_i}^{(1)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(2)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(3)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(4)}} \right] + 2m_N^{(\Delta_i)} \frac{3}{2} e^{-\Delta \epsilon_i} \left[ e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(1)}} + e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(2)}} + e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(3)}} \right]} e^{n_i} \quad (21)$$

Introduzindo a designação:

$$A = \frac{4m_N^{(L_i)} \frac{3}{2} + 6m_N^{(\Delta_i)} \frac{3}{2} e^{-\Delta \epsilon_i}}{m_N^{(L_i)} \left[ e^{-\epsilon_{L_i}^{(1)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(2)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(3)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(4)}} \right] + 2m_N^{(\Delta_i)} \frac{3}{2} e^{-\Delta \epsilon_i} \left[ e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(1)}} + e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(2)}} + e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(3)}} \right]} \quad (22)$$

a fórmula anterior pode ser escrita na forma compacta:

$$e^{n_i} = A e^{n_i} \quad (23)$$

Substituindo (23) para às fórmulas (10) e (12), obteremos as expressões explícitas para o número dos electrões em cada vale  $L_i$  - e  $\Delta_i$  -vales do cristal deformado:

$$\begin{aligned} N_{L_i}^{(i)} &= \frac{2A}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi kT)^{\frac{3}{2}} \cdot \left( m_N^{(L_i)} \right)^{\frac{3}{2}} \exp(\mu_c^* - E_{L_i}^{(i)}), \\ N_{\Delta_i}^{(i)} &= \frac{2A}{(2\pi\hbar)^3} (2\pi kT)^{\frac{3}{2}} \cdot \left( m_N^{(\Delta_i)} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \exp(\mu_c^* - E_{\Delta_i}^{(i)} - \Delta E_i). \end{aligned} \quad (24)$$

A expressão para o cálculo do número total dos electrões obtém-se substituindo na expressão (14) as fórmulas (11) e (13), o resultado pode ser escrito na forma :

$$N_0 = 2 \frac{(2\pi kT)^{\frac{3}{2}}}{(2\pi\hbar)^3} e^{\mu_c^*} \left[ 4m_N^{(L_i)} \frac{3}{2} + 6m_N^{(\Delta_i)} \frac{3}{2} e^{-\Delta \epsilon_i} \right]. \quad (25)$$

Substituindo (23) às fórmulas explícitas para os números dos electrões nos  $L_i$  - vales e  $\Delta_i$ -vales (24) do cristal deformado, levando em consideração (22) e dividindo o resultado por (25) não é difícil obter as seguintes expressões gerais para os números de preenchimento no caso em que a tensão deformadora é orientado arbitrariamente no cristal:

$$n_{L_i}^{(i)} = \left\{ + e^{-\epsilon_{L_i}^{(1)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(2)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(3)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(4)}} + 2 \left( \frac{m_N^{(\Delta_i)}}{m_N^{(L_i)}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\epsilon_{L_i}^{(1)} - \Delta \epsilon_i} \left[ e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(1)}} + e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(2)}} + e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(3)}} \right] \right\}^{-1}, \quad (26)$$

$$n_{\Delta_i}^{(i)} = \left\{ + e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(1)}} + e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(2)}} + e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(3)}} + 2 \left( \frac{m_N^{(L_i)}}{m_N^{(\Delta_i)}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\epsilon_{\Delta_i}^{(1)} - \Delta \epsilon_i} \left[ e^{-\epsilon_{L_i}^{(1)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(2)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(3)}} \right] \right\}^{-1}, \quad (27)$$

$$n_{L_i}^{(i)} = \left\{ + e^{-\epsilon_{L_i}^{(1)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(2)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(3)}} + e^{-\epsilon_{L_i}^{(4)}} + 2 \left( \frac{m_N^{(\Delta_i)}}{m_N^{(L_i)}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\epsilon_{L_i}^{(1)} - \Delta \epsilon_i} \left[ e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(1)}} + e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(2)}} + e^{-\epsilon_{\Delta_i}^{(3)}} \right] \right\}^{-1}, \quad (28)$$

$$n_{L_1}^{(4)} = \left\{ 1 + e^{\frac{E_{L_1}^{(4)}}{k_B T} - \frac{E_{L_1}^{(3)}}{k_B T}} + e^{\frac{E_{L_1}^{(4)}}{k_B T} - \frac{E_{L_1}^{(2)}}{k_B T}} + e^{\frac{E_{L_1}^{(4)}}{k_B T} - \frac{E_{L_1}^{(1)}}{k_B T}} + 2 \left( \frac{m_{L_1}^{(3)}}{m_{L_1}^{(2)}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_{L_1}^{(3)}}{k_B T} - \Delta E_0} \left[ e^{-\frac{E_{L_1}^{(3)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(2)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(1)}}{k_B T}} \right] \right\}^{-1}, \quad (29)$$

$$n_{\Delta_1}^{(1,2)} = \left[ \left( \frac{m_{\Delta_1}^{L_1}}{m_{\Delta_1}^{L_1}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_{\Delta_1}^{(1,2)}}{k_B T} + \Delta E_0} \left( e^{-\frac{E_{L_1}^{(1)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(2)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(3)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(4)}}{k_B T}} \right) + 2 + 2e^{\frac{E_{\Delta_1}^{(1,2)}}{k_B T}} \left( e^{-\frac{E_{L_1}^{(2,4)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(3,6)}}{k_B T}} \right) \right]^{-1} \quad (30)$$

$$n_{\Delta_1}^{(3,4)} = \left[ \left( \frac{m_{\Delta_1}^{L_1}}{m_{\Delta_1}^{L_1}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_{\Delta_1}^{(3,4)}}{k_B T} + \Delta E_0} \left( e^{-\frac{E_{L_1}^{(1)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(2)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(3)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(4)}}{k_B T}} \right) + 2 + 2e^{\frac{E_{\Delta_1}^{(3,4)}}{k_B T}} \left( e^{-\frac{E_{L_1}^{(1,3)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(5,6)}}{k_B T}} \right) \right]^{-1} \quad (31)$$

$$n_{\Delta_1}^{(5,6)} = \left[ \left( \frac{m_{\Delta_1}^{L_1}}{m_{\Delta_1}^{L_1}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_{\Delta_1}^{(5,6)}}{k_B T} + \Delta E_0} \left( e^{-\frac{E_{L_1}^{(1)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(2)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(3)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(4)}}{k_B T}} \right) + 2 + 2e^{\frac{E_{\Delta_1}^{(5,6)}}{k_B T}} \left( e^{-\frac{E_{L_1}^{(1,3)}}{k_B T}} + e^{-\frac{E_{L_1}^{(5,6)}}{k_B T}} \right) \right]^{-1} \quad (32)$$

Como se vê, os números de preenchimento dependem dos potenciais de deformação  $E_{L_1, \Delta_1}^{(i,j)}$  dos vales isoenergéticos.

## V – CÁLCULO DOS POTENCIAIS DE DEFORMAÇÃO

Os potenciais de deformação dos  $L_1$  - vales e  $\Delta_1$  - vales são dados no referencial ligado com os eixos principais do tensor da massa eficaz para cada vale e permitem prever a cinética do deslocamento dos vales na presença das deformações. Segundo a teoria dos potenciais de deformação para os cristais cúbicos, o potencial de deformação do  $i$ -ésimo vale energético é dado pela seguinte expressão [3,23 - 25]:

$$E_i = C_1 (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) + C_2 \varepsilon_{33} = C_1 S p \varepsilon + C_2 \varepsilon_{33}, \quad (33)$$

Nesta expressão  $C_2$  e  $C_1$  são constantes dos potenciais de deformação e  $\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}$  são as componentes do tensor de deformação no referencial ligado com os eixos principais do tensor da massa eficaz. Sublinhemos que o "spur" do tensor da deformação é invariante em relação a rotação então, segundo a expressão (33) só é necessário calcular o  $\varepsilon_{33}$  no referencial ligado com os eixos principais do tensor da massa eficaz de cada vale.

Quando um corpo sólido é sujeito a uma deformação, há modificação do seu tamanho, por conseguinte, do seu volume, devido ao deslocamento das partículas que o constitui das suas posições de equilíbrio, sem a variação da sua concentração. As deformações podem ser classificadas por elásticas aquelas em que o corpo toma a forma inicial depois de anular a tensão deformadora e irrelásticas que ocorrem com a variação da sua forma depois de anular a tensão deformadora. Neste trabalho estudam-se as deformações elásticas.

Segundo a lei de Hooke as deformações que um cristal sofre são proporcionais as tensões aplicadas [3,26]:

$$\varepsilon_{ik} = \sum_{lm} S_{iklm} U_{lm}, \quad (34)$$

onde  $\varepsilon_{ik}$  é o tensor das deformações,  $U_{lm}$  é o tensor das tensões elásticas dado no referencial laboratorial e  $S_{iklm}$  é o tensor dos módulos elásticos que se determina no referencial cristalográfico.

Sublinhemos que todas as grandezas em (34) devem ser expressas no mesmo referencial.

Direcionámos a tensão uniaxial ao longo do eixo 3 do referencial laboratorial. Neste caso o tensor das tensões elásticas uniaxiais no referencial laboratorial possui a forma [3,26]:

$$U_{lm} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad U_{33} = P, \quad (35)$$

onde  $P$  é tensão deformadora, no caso da compressão do cristal  $P < 0$ . Levando em conta a lei de Hooke (34) a substituição do tensor das tensões elásticas resulta:

$$\varepsilon_{ik}'' = S_{ik33}'' U_{33}, \quad \text{ou} \quad \varepsilon_{ik}' = S_{ik33}' P. \quad (36)$$

O tensor dos módulos elásticos no referencial cristalográfico para um cristal cúbico possui três componentes diferentes de zero devido a simetria do cristal, e tem a forma matricial [26] seguinte:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix}. \quad (37)$$

A forma de passagem do tensor dos módulos elásticos do referencial cristalográfico para o referencial laboratorial é dada por [3]:

$$S_{ijkl}'' = \sum_{r,p,q,s} \tau_{ir} \tau_{jp} \tau_{kq} \tau_{ls} \cdot S_{rpts} \quad (38)$$

onde  $S_{ijkl}''$  é o tensor dos módulos elásticos no referencial laboratorial,  $S_{ijkl}$  é o tensor dos módulos elásticos no referencial cristalográfico  $\tau_{ir}$  são os elementos da matriz de passagem do referencial cristalográfico para laboratorial.

Tomando em conta (36), a expressão (38) simplifica-se:

$$S_{ijkl}'' = \sum_{r,p,q,s} \tau_{ir} \tau_{jp} \tau_{kq} \tau_{ls} \cdot S_{rpts} \quad (39)$$

O desenvolvimento da expressão (39) e passagem a forma matricial para as componentes do tensor dos módulos elásticos (11-1, 22-2, 33-3, 23-4, 13=31-5, 12=21-6) resulta:

$$S_{ijkl}'' = (\tau_{11} \tau_{11} \tau_{31} \tau_{31} + \tau_{12} \tau_{12} \tau_{32} \tau_{32} + \tau_{13} \tau_{13} \tau_{33} \tau_{33}) \cdot S_{111} + \\ (\tau_{12} \tau_{12} \tau_{31} \tau_{31} + \tau_{11} \tau_{11} \tau_{32} \tau_{32} + \tau_{13} \tau_{13} \tau_{31} \tau_{31} + \tau_{12} \tau_{12} \tau_{32} \tau_{32} + \tau_{12} \tau_{12} \tau_{33} \tau_{33}) S_{12} + \\ (2\tau_{11} \tau_{12} \tau_{31} \tau_{32} + 2\tau_{11} \tau_{13} \tau_{31} \tau_{33} + 2\tau_{12} \tau_{13} \tau_{31} \tau_{32} + 2\tau_{12} \tau_{13} \tau_{32} \tau_{33} + 2\tau_{13} \tau_{13} \tau_{31} \tau_{33} + 2\tau_{13} \tau_{13} \tau_{32} \tau_{33}) \cdot S_{44} \quad (40)$$

Levando em conta a matriz de transição do referencial cristalográfico para o laboratorial (Anexo 1):

$$\tau_{ik} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \cos \beta & \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \cos \beta & -\text{sen} \beta \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \text{sen} \beta & \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \text{sen} \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \quad (41)$$

podemos calcular a partir das expressões (40-41) os elementos do tensor dos módulos elásticos no referencial laboratorial.

Os cálculos relativamente volumosos mas não difíceis resultam:

$$\begin{aligned}
 S_{2333}^- &= \frac{1}{3} (\text{sen}^3 \beta \cdot \cos \beta - 3 \text{sen} \beta \cdot \cos^3 \beta) \cdot S_{11} + \frac{1}{2} (-\text{sen}^3 \beta \cdot \cos \beta + 2 \cos^3 \beta \cdot \text{sen} \beta) \cdot S_{12} + \\
 & (2 \cdot \cos^3 \beta \cdot \text{sen} \beta - \text{sen}^3 \beta \cdot \cos \beta) \cdot S_{24} \\
 S_{3233}^- &= \frac{1}{3} (\text{sen}^3 \beta \cos \beta - 3 \text{sen} \beta \cos^3 \beta) S_{11} + \frac{1}{2} (-\text{sen}^3 \beta \cos \beta + 2 \cos^3 \beta \cdot \text{sen} \beta) S_{12} + \\
 & (2 \cos^3 \beta \cdot \text{sen} \beta - \text{sen}^3 \beta \cdot \cos \beta) S_{44} \\
 S_{1132}'' &= \frac{1}{2} \cdot \text{sen}^2 \beta \cdot S_{11} + \frac{1}{2} (\text{sen}^2 \beta + 2 \cdot \cos^2 \beta) \cdot S_{12} - \text{sen}^2 \beta \cdot S_{44} \quad , \\
 S_{1244}'' &= \frac{3}{2} S_{11} \text{sen}^2 \beta \cos^2 \beta + \frac{1}{2} (\text{sen}^2 \beta \cos^2 \beta + 2 \cos^4 \beta + 2 \text{sen}^4 \beta) S_{12} - \\
 & - 3 S_{44} \text{sen}^2 \beta \cos^2 \beta \\
 S_{3332}'' &= \frac{1}{2} (\text{sen}^4 \beta + 2 \cos^4 \beta) S_{11} + \frac{1}{2} (4 \text{sen}^2 \beta \cos^2 \beta + 2 \text{sen}^4 \beta) S_{12} + \\
 & + (\text{sen}^4 \beta + 4 \text{sen}^2 \beta \cos^2 \beta) S_{44} \\
 S_{333}'' = S_{3133}'' &= 0 \qquad \qquad \qquad S_{1233}'' = S_{2133}'' = 0 \quad . \qquad (42)
 \end{aligned}$$

Usando as expressões (36) e (42) obteremos as seguintes expressões para o tensor das deformações no referencial laboratorial:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{23}'' &= \left[ \frac{1}{3} (\text{sen}^3 \beta \cdot \cos \beta - 3 \text{sen} \beta \cdot \cos^3 \beta) \cdot S_{11} + \frac{1}{2} (-\text{sen}^3 \beta \cdot \cos \beta + 2 \cos^3 \beta \cdot \text{sen} \beta) \cdot S_{12} + \right. \\
 & \left. (2 \cdot \cos^3 \beta \cdot \text{sen} \beta - \text{sen}^3 \beta \cdot \cos \beta) \cdot S_{44} \right] \cdot P \\
 \varepsilon_{32}'' &= \left[ \frac{1}{3} \cdot (\text{sen}^3 \beta \cdot \cos \beta - 3 \text{sen} \beta \cdot \cos^3 \beta) \cdot S_{11} - \frac{1}{2} (-\text{sen}^3 \beta \cdot \cos \beta + 2 \cos^3 \beta \cdot \text{sen} \beta) \cdot S_{12} + \right. \\
 & \left. (2 \cdot \cos^3 \beta \cdot \text{sen} \beta - \text{sen}^3 \beta \cdot \cos \beta) \cdot S_{44} \right] \cdot P \\
 \varepsilon_{11}'' &= \left[ \frac{1}{2} \cdot \text{sen}^2 \beta \cdot S_{11} + \frac{1}{2} (\text{sen}^2 \beta + 2 \cdot \cos^2 \beta) \cdot S_{12} - \text{sen}^2 \beta \cdot S_{44} \right] \cdot P \quad , \\
 \varepsilon_{22}'' &= \left[ \frac{3}{2} \cdot \text{sen}^2 \beta \cdot \cos^2 \beta \cdot S_{11} + \frac{1}{2} \cdot (\text{sen}^2 \beta \cos^2 \beta + 2 \cdot \cos^4 \beta + 2 \text{sen}^4 \beta) \cdot S_{12} - \right. \\
 & \left. 3 \cdot \text{sen}^2 \beta \cdot \cos^2 \beta \cdot S_{44} \right] \cdot P \\
 \varepsilon_{33}'' &= \left[ \frac{1}{2} \cdot (\text{sen}^4 \beta + 2 \cdot \cos^4 \beta) \cdot S_{11} + \frac{1}{2} (4 \text{sen}^2 \beta \cos^2 \beta + 2 \text{sen}^4 \beta) \cdot S_{12} + \right. \\
 & \left. (\text{sen}^4 \beta + 4 \cdot \text{sen}^2 \beta \cdot \cos^2 \beta) \cdot S_{44} \right] \cdot P \\
 \varepsilon_{13}'' = \varepsilon_{31}'' &= 0 \qquad \qquad \qquad \varepsilon_{12}'' = \varepsilon_{21}'' = 0 \quad . \qquad (43)
 \end{aligned}$$



Anotemos, que o "spur" é a soma de todos os elementos diagonais de uma matriz dada. O "spur" do tensor da deformação:

$$Spur \dot{\epsilon} = \sum_{i=1}^n \dot{\epsilon}_{ii}^* \text{, ou} \quad Spur \dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_{11}^* + \dot{\epsilon}_{22}^* + \dot{\epsilon}_{33}^* \quad (44)$$

é invariante em relação as transformações de rotação.

Usando (44) não é difícil demonstrar que:

$$Spur \dot{\epsilon} = S_{11} + 2S_{12} \text{,} \quad (44 a)$$

o que coincide para os cristais cúbicos com [26]. Sublinhemos que  $S_{11} > 0$ ,  $S_{12} < 0$ , mas  $S_{11} + 2S_{12} > 0$  para todas as temperaturas [26,27].

Portanto, para o cálculo dos potenciais de deformação em diferentes referenciais será necessário só calcular o componente  $\dot{\epsilon}_{33}^*$  do tensor da deformação.

O cálculo do  $\dot{\epsilon}_{33}^*$  é um passo importante porque este entra na expressão para os potenciais de deformação. Para este fim é necessário só encontrar a componente  $\dot{\epsilon}_{33}^*$  para cada vale usando a expressão:

$$\dot{\epsilon}_{33}^{(n)} = \sum_k \tilde{a}_{3k}^{(n)} \cdot \dot{a}_{3k}^{(r)} \dot{\epsilon}_{kk}^* \text{,} \quad (45)$$

onde n é o número que indica o vale isoenergético,  $\dot{\epsilon}_{kk}^*$  são as componentes do tensor das deformações no referencial laboratorial e  $\tilde{a}_{3k}^{(n)}$  são os elementos das matrizes inversas de transição do referencial laboratorial para referencial "elipsoidal" ligado com os eixos principais do tensor da massa eficaz de cada vale, os cálculos dessas matrizes estão apresentados no Anexo 1.

A forma explícita de (45) é:

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{33}^{(n)} = & \tilde{a}_{31}^{(n)} \dot{a}_{31}^{(n)} \dot{\epsilon}_{11}^* + \tilde{a}_{32}^{(n)} \dot{a}_{32}^{(n)} \dot{\epsilon}_{22}^* + \tilde{a}_{33}^{(n)} \dot{a}_{33}^{(n)} \dot{\epsilon}_{33}^* + \tilde{a}_{31}^{(n)} \dot{a}_{32}^{(n)} \dot{\epsilon}_{12}^* + \tilde{a}_{32}^{(n)} \dot{a}_{31}^{(n)} \dot{\epsilon}_{21}^* + \tilde{a}_{31}^{(n)} \dot{a}_{33}^{(n)} \dot{\epsilon}_{13}^* + \\ & + \tilde{a}_{33}^{(n)} \dot{a}_{31}^{(n)} \dot{\epsilon}_{31}^* + \tilde{a}_{32}^{(n)} \dot{a}_{33}^{(n)} \dot{\epsilon}_{23}^* + \tilde{a}_{33}^{(n)} \dot{a}_{32}^{(n)} \dot{\epsilon}_{32}^* \end{aligned} \quad (46)$$

Devido a simetria do tensor das deformações é válida a relação  $\dot{\epsilon}_{ik} = \dot{\epsilon}_{ki}$ , a expressão para o cálculo de  $\dot{\epsilon}_{33}^*$  modifica-se para a forma:

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{33}^{(n)} = & \tilde{a}_{31}^{(n)} \dot{a}_{31}^{(n)} \dot{\epsilon}_{11}^* + \tilde{a}_{32}^{(n)} \dot{a}_{32}^{(n)} \dot{\epsilon}_{22}^* + \tilde{a}_{33}^{(n)} \dot{a}_{33}^{(n)} \dot{\epsilon}_{33}^* + 2\tilde{a}_{31}^{(n)} \dot{a}_{32}^{(n)} \dot{\epsilon}_{12}^* + 2\tilde{a}_{31}^{(n)} \dot{a}_{33}^{(n)} \dot{\epsilon}_{13}^* + \\ & + 2\tilde{a}_{32}^{(n)} \dot{a}_{33}^{(n)} \dot{\epsilon}_{23}^* \end{aligned} \quad (46 a)$$

Usando as fórmulas explícitas para as matrizes de transição  $\hat{a}_{ij}^{[a]}$  para cada vale (veja o Anexo 1 ), das expressões (43) obtêm-se os seguintes resultados para os  $L_i$ - e  $\Delta_i$ -vales respectivamente:

$$\begin{aligned}
 \epsilon_{33}^{1(a)} &= \left[ \frac{1}{3}(S_{11} + 2S_{12}) + \frac{2}{3}(2\sqrt{2}\text{sen}\beta \cos \beta + \text{sen}^2 \beta) \cdot S_{44} \right] P, \\
 \epsilon_{33}^{2(a)} &= \left[ \frac{1}{3}(S_{11} + 2S_{12}) - \frac{2}{3}\text{sen}^2 \beta \right] P, \\
 \epsilon_{33}^{3(a)} &= \left[ \frac{1}{3}(S_{11} + 2S_{12}) + \frac{2}{3}(-2\sqrt{2}\text{sen}\beta \cos \beta + \text{sen}^2 \beta) \cdot S_{44} \right] P, \\
 \epsilon_{33}^{4(a)} &= \left[ \frac{1}{3}(S_{11} + 2S_{12}) - \frac{2}{3}\text{sen}^2 \beta \right] P, \\
 \epsilon_{13}^{1,2(a)} &= (S_{11} \cos^2 \beta + S_{12} \text{sen}^2 \beta) P, \\
 \epsilon_{33}^{3,4(a)} &= \frac{1}{2} [S_{12} \text{sen}^2 \beta + (1 + \cos^2 \beta) S_{12}] P, \\
 \epsilon_{33}^{5,6(a)} &= \frac{1}{2} [S_{11} \text{sen}^2 \beta + (1 + \cos^2 \beta) S_{12}] P.
 \end{aligned} \tag{47}$$

Levando em conta a fórmula (33) para o cálculo de potenciais de deformação, e substituindo nela valores das componentes do tensor das deformações (47) no referencial ligado com o tensor da massa eficaz para cada vale e o valor do “spur”, obtêm-se expressões para os potenciais de deformação em cada vale.

Potenciais de deformação dos  $L_i$ -vales:

$$\begin{aligned}
 E_{L_i}^{(1)} &= \left[ (S_{11} + 2S_{12}) \left( C_1^4 + \frac{1}{3} C_2^4 \right) + \frac{2}{3} C_2^4 \cdot (2\sqrt{2}\text{sen}\beta \cos \beta + \text{sen}^2 \beta) S_{44} \right] P, \\
 E_{L_i}^{(2)} &= \left[ (S_{11} + 2 \cdot S_{11}) \cdot \left( C_1^4 + \frac{1}{3} \cdot C_2^4 \right) - \frac{2}{3} \cdot C_1^4 \cdot \text{sen}^2 \beta \cdot S_{44} \right] \cdot P, \\
 E_{L_i}^{(3)} &= \left[ (S_{11} + 2 \cdot S_{12}) \cdot \left( C_1^4 + \frac{1}{3} \cdot C_2^4 \right) + \frac{2}{3} \cdot C_2^4 \cdot (-2 \cdot \sqrt{2} \cdot \text{sen}\beta \cdot \cos \beta + \text{sen}^2 \beta) \cdot S_{44} \right] \cdot P, \\
 E_{L_i}^{(4)} &= \left[ (S_{11} + 2S_{12}) \left( C_1^4 + \frac{1}{3} C_2^4 \right) - \frac{2}{3} C_2^4 S_{44} \text{sen}^2 \beta \right] P.
 \end{aligned} \tag{48}$$

Como se vê, os potenciais de deformação dos  $L_1$  - vales estão subdivididos em três grupos a

saber:  $E_{L_1}^{(1)}, E_{L_1}^{(3)}$  e  $E_{L_1}^{(4)} = E_{L_1}^{(2)} = E_{L_1}^{(2,4)}$ .

Potenciais de deformação dos  $\Delta_1$  - vales:

$$\begin{aligned} E_{\Delta_1}^{(1,2)} &= \left[ C_1^{\Delta_1} (S_{11} + 2S_{12}) + C_2^{\Delta_1} (\cos^2 \beta \cdot S_{11} + \sin^2 \beta \cdot S_{12}) \right] P, \\ E_{\Delta_1}^{(3,4)} &= \left\{ C_1^{\Delta_1} (S_{11} + 2S_{12}) + \frac{1}{2} C_2^{\Delta_1} [\sin^2 \beta \cdot S_{11} + (1 + \cos^2 \beta) S_{12}] \right\} P. \end{aligned} \quad (49)$$

Como se vê, os potenciais de deformação dos  $\Delta_1$  - vales estão subdivididos por dois grupos

(  $E_{\Delta_1}^{(1,2)}$  e  $E_{\Delta_1}^{(3,4)} = E_{\Delta_1}^{(3,6)} = E_{\Delta_1}^{(3-6)}$  ).

Portanto os potenciais de deformação de todos os vales estão divididos em cinco grupos a saber, três grupos dos  $L_1$  - vales (  $E_{L_1}^{(1)}, E_{L_1}^{(3)}$  e  $E_{L_1}^{(4)} = E_{L_1}^{(2)} = E_{L_1}^{(2,4)}$  ) e dois grupos de  $\Delta_1$  -vales

(  $E_{\Delta_1}^{(1,2)}$  e  $E_{\Delta_1}^{(3,4)} = E_{\Delta_1}^{(3,6)} = E_{\Delta_1}^{(3-6)}$  ).

## VI - POTENCIAIS DE DEFORMAÇÃO. CASOS PARTICULARES

Consideremos casos particulares que seguem das expressões gerais (48-49).

Admitindo que  $\beta = 0^\circ$ , i.e. o esforço deformador está paralelo ao eixo cristalográfico  $[001]$ , ou condicionalmente,  $P // [001]$  das fórmulas (48-49):

$$\begin{aligned} E_{L_1}^{(1)} = E_{L_1}^{(2)} = E_{L_1}^{(3)} = E_{L_1}^{(4)} &= \left[ (S_{11} + 2S_{12}) \left( C_1^{L_1} + \frac{1}{3} C_2^{L_1} \right) \right] P, \\ E_{\Delta_1}^{(1,2)} &= \left[ C_1^{\Delta_1} (S_{11} + 2S_{12}) + C_2^{\Delta_1} S_{11} \right] P, \\ E_{\Delta_1}^{(3,4)} = E_{\Delta_1}^{(3,6)} &= \left[ C_1^{\Delta_1} (S_{11} + 2S_{12}) + C_2^{\Delta_1} S_{12} \right] P. \end{aligned} \quad (50)$$

As expressões analíticas obtidas mostram, que todos os dez vales energéticos (quatro  $L_1$  -vales e seis  $\Delta_1$  -vales) subdividem-se em um grupo  $L_1$  -vales, com quatro vales com mesmos potenciais de deformação e dois grupos dos  $\Delta_1$  -vales:  $\Delta_1^{(1,2)}$  -vales orientados paralelamente ao eixo da deformação e  $\Delta_1^{(3-6)}$  -vales orientados perpendicularmente ao eixo da deformação. Estes  $L_1$  -vales são orientados identicamente em relação ao eixo da deformação.

É fácil verificar usando dados numéricos que  $E_{L_1}^{(1-4)} > 0$ , por isso com o crescimento do esforço deformador todos os  $L_1$ -vales sobem na escala energética. Quanto aos  $\Delta_1$ -vales,  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales com potenciais de deformação negativos ( $E_{\Delta_1}^{(1,2)} < 0$ ), descem na escala energética, enquanto que os quatro  $\Delta_1^{(3-6)}$ -vales que tem os potenciais de deformação positivos ( $E_{\Delta_1}^{(3-6)} > 0$ ) sobem na escala energética com o crescimento do esforço deformador.

Suponhamos que  $P // [111]$ , i.e. a tensão deformadora é orientada ao longo do diagonal espacial do cubo. Neste caso o ângulo da orientação do esforço deformador satisfaz as relações  $\text{sen}\beta = \sqrt{2/3}$  e  $\text{cos}\beta = \sqrt{1/3}$ . Substituindo ás nos potenciais de deformação (48-49) obteremos:

$$\begin{aligned}
 E_{L_1}^{(1)} &= \left[ (S_{11} + 2S_{12}) \left( C_1^{L_1} + \frac{1}{3} C_2^{L_1} \right) + \frac{4}{3} C_2^{L_1} S_{44} \right] P, \\
 E_{L_1}^{(2-4)} \equiv E_{L_1}^{(2)} = E_{L_1}^{(3)} = E_{L_1}^{(4)} &= \left[ (S_{11} + 2S_{12}) \left( C_1^{L_1} - \frac{1}{3} C_2^{L_1} \right) - \frac{4}{9} C_2^{L_1} S_{44} \right] P, \\
 E_{\Delta_1}^{(1-6)} \equiv E_{\Delta_1}^{(1,2)} = E_{\Delta_1}^{(3,4)} = E_{\Delta_1}^{(5,6)} &= \left( C_1^{\Delta_1} + \frac{1}{3} C_2^{\Delta_1} \right) (S_{11} + 2S_{12}) P. \quad (51)
 \end{aligned}$$

Neste caso o  $L_1^{(1)}$ -vale desce na escala energética porque  $E_{L_1}^{(1)} < 0$  e os  $L_1^{(2-4)}$  sobem, pois  $E_{L_1}^{(2-4)} > 0$ . Enquanto os  $\Delta_1^{(1-6)}$  são orientados identicamente em relação ao eixo deformador, os seus potenciais de deformação são iguais e negativos  $E_{\Delta_1}^{(1-6)} < 0$  e eles descem na escala energética mas com menor velocidade em relação ao  $L_1^{(1)}$ -vale. Portanto a energia menor dos portadores de carga será sempre no  $L_1^{(1)}$ -vale e, como mostraremos mais tarde este vale estará preenchido por electrões. Anotemos que o facto de os  $L_1^{(2-4)}$ -vales possuem os mesmos potenciais de deformação é evidente da consideração geométrica, pois eles estão orientados neste caso identicamente em relação ao eixo deformador.

Seja  $\beta = 90^\circ$ . Neste caso temos quatro grupos de vales energéticos com os seguintes potenciais de deformação:

$$\begin{aligned}
 E_{L_1}^{(1,3)} \equiv E_{L_1}^{(1)} = E_{L_1}^{(3)} &= \left[ (S_{11} + 2S_{12}) \left( C_1^{L_1} + \frac{1}{3} C_2^{L_1} \right) + \frac{2}{3} C_2^{L_1} S_{44} \right] P, \\
 E_{L_1}^{(2,4)} &= \left[ (S_{11} + 2S_{12}) \left( C_1^{L_1} + \frac{1}{3} C_2^{L_1} \right) - \frac{2}{3} C_2^{L_1} S_{44} \right] P, \\
 E_{\Delta_1}^{(1,2)} &= \left[ C_1^{\Delta_1} (S_{11} + 2S_{12}) + C_2^{\Delta_1} S_{12} \right] P, \\
 E_{\Delta_1}^{(3,4)} \equiv E_{\Delta_1}^{(3,4)} = E_{\Delta_1}^{(5,6)} &= C_1^{\Delta_1} (S_{11} + 2S_{12}) P + \frac{1}{2} C_2^{\Delta_1} (S_{11} + 2S_{12}) P. \quad (52)
 \end{aligned}$$

Tomando em conta os valores numéricos das constantes elásticas  $S_{11}, S_{12}, S_{44}$  [3,27] e o facto, que  $P < 0$  para a compressão, é fácil mostrar que, os dois  $L_1^{(1)}$ - e  $L_1^{(3)}$ -vales possuem potenciais de deformação iguais e negativos e por isso que  $E_{L_1}^{(1,3)} \equiv E_{L_1}^{(1)} = E_{L_1}^{(3)}$  descem na escala energética e os restantes  $L_1^{(2,4)}$ - e  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales sobem na escala energética ( $E_{L_1}^{(2,4)} > 0$  e  $E_{\Delta_1}^{(1,2)} > 0$ ).

Os quatro  $\Delta_1^{(3-6)}$ -vales descem na escala energética mas com menor velocidade do que os  $L_1^{(1)}$ - e  $L_1^{(3)}$ -vales. Sublinhemos que o potencial de deformação dos  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales coincide com os potenciais de deformação dos  $\Delta_1^{(3-6)}$ -vales no caso  $\beta=0^\circ$  [19-22] (veja (50)).

## VII - NÚMEROS DE PREENCHIMENTO

Tomando em conta as expressões gerais para o cálculo dos potenciais de deformação no caso geral (48-49) é possível encontrar as expressões dos números de preenchimento a partir de (26-32) para cada vale isoenergético, no caso da orientação arbitrária do esforço deformador. Neste caso segundo (48-49) os potenciais de deformação e consequentemente os vales isoenergéticos subdividem-se em três grupos do  $L_1$  - vales  $E_{L_1}^{(1)}, E_{L_1}^{(3)}$  e  $E_{L_1}^{(4)} = E_{L_1}^{(2)} \equiv E_{L_1}^{(2,4)}$  e os dois grupos dos  $\Delta_1$  - vales  $E_{\Delta_1}^{(1,2)}$  e  $E_{\Delta_1}^{(3,4)} = E_{\Delta_1}^{(5,6)} \equiv E_{\Delta_1}^{(3-6)}$ . Segundo as expressões (26) - (32) para os cálculos dos números de preenchimento, é evidente que os vales com potenciais de deformação iguais terão mesmas expressões para os números de preenchimento.

No cálculo do número de preenchimento para os  $L_1$  - e  $\Delta_1$ - vales usando (26) - (32) teremos termos que vão conter o multiplicador 2 devido a igualdade dos potenciais de deformação  $E_{L_1}^{(4)} = E_L^{(3)} \equiv E_{L_1}^{(2,4)}$  e  $E_{\Delta_1}^{(3,4)} = E_{\Delta_1}^{(2,6)} \equiv E_{\Delta_1}^{(3-6)}$ . Depois das notas feitas os cálculos simples resultam para os números de preenchimento:

$$\begin{aligned}
 n_{L_1}^{(1)} &= \left\{ +2e^{E_{L_1}^{(2,4)} - E_{L_1}^{(1,4)*}} + e^{E_{L_1}^{(1,7)} - E_{L_1}^{(2,7)*}} + 2 \left( \frac{m_{L_1}^{(2,4)}}{m_{L_1}^{(1,4)}} \right)^2 e^{E_{L_1}^{(2,4)} - \Delta E_{L_1}^*} \left[ e^{-E_{L_1}^{(1,2)*}} + 2e^{-E_{L_1}^{(1,4)*}} \right]^{-1} \right\}, \\
 n_{L_1}^{(2,4)} &= \left\{ 2 + e^{E_{L_1}^{(2,4)*} - E_{L_1}^{(1,4)*}} + e^{E_{L_1}^{(1,7)*} - E_{L_1}^{(2,7)*}} + 2 \left( \frac{m_{L_1}^{(2,4)}}{m_{L_1}^{(1,4)}} \right)^2 e^{E_{L_1}^{(2,4)*} - \Delta E_{L_1}^*} \left[ e^{-E_{L_1}^{(1,2)*}} + 2e^{-E_{L_1}^{(1,4)*}} \right]^{-1} \right\}, \\
 n_{L_1}^{(3)} &= \left\{ +e^{E_{L_1}^{(3,3)*} - E_{L_1}^{(0)*}} + 2e^{E_{L_1}^{(1,7)*} - E_{L_1}^{(2,7)*}} + 2 \left( \frac{m_{L_1}^{(3,3)}}{m_{L_1}^{(1,7)}} \right)^2 e^{E_{L_1}^{(3,3)*} - \Delta E_{L_1}^*} \left[ e^{-E_{L_1}^{(1,7)*}} + 2e^{-E_{L_1}^{(1,4)*}} \right]^{-1} \right\}, \\
 n_{\Delta_1}^{(1,3)} &= \left[ \left( \frac{m_{\Delta_1}^{(1,3)}}{m_{\Delta_1}^{(1,3)}} \right)^2 e^{E_{\Delta_1}^{(1,3)*} + \Delta E_{\Delta_1}^*} \left( e^{-E_{\Delta_1}^{(0)*}} + 2e^{-E_{\Delta_1}^{(2,4)*}} + e^{-E_{\Delta_1}^{(3,3)*}} \right) + 2 + 4e^{E_{\Delta_1}^{(1,7)*} - E_{\Delta_1}^{(3-6)*}} \right]^{-1}, \\
 n_{\Delta_1}^{(3-6)} &= \left[ \left( \frac{m_{\Delta_1}^{(1,3)}}{m_{\Delta_1}^{(1,3)}} \right)^2 e^{E_{\Delta_1}^{(1,3)*} + \Delta E_{\Delta_1}^*} \left( e^{-E_{\Delta_1}^{(0)*}} + 2e^{-E_{\Delta_1}^{(2,4)*}} + e^{-E_{\Delta_1}^{(3,3)*}} \right) + 4 + 2e^{E_{\Delta_1}^{(3-6)*} - E_{\Delta_1}^{(1,7)*}} \right]^{-1}. \quad (53)
 \end{aligned}$$

Anotemos mais uma vez que estas fórmulas são válidas para o caso da orientação arbitrária do esforço deformador no plano  $(1\bar{1}0)$  em relação aos eixos cristalográficos. Das fórmulas obtidas segue que no caso do cristal não deformado temos  $n_{L_1}^{(1,4)} = 0$  e  $n_{L_1}^{(1,4)*} = 0.25$ .

No caso da consideração,  $P \ll P_0$ , i.e. quando os  $\Delta_1$ -vales estão relativamente afastados dos  $L_1$  - vales (neste caso é válida a relação  $\Delta E_{\Delta_1} \gg kT$ ), pode-se desprezar a influência dos  $\Delta_1$ -vales e obtermos o tal chamado  $L_1$  modelo do Germânio.

Levando em conta estas observações as expressões gerais para os números de preenchimento, modificamos para a forma:

$$\begin{aligned} n_{L_1}^{(1)} &= \left[ 1 + 2e^{\frac{E_{L_1}^{(1)\beta} - E_{L_1}^{(1)\gamma}}{kT}} + e^{\frac{E_{L_1}^{(1)\delta} - E_{L_1}^{(1)\beta}}{kT}} \right]^{-1}, \\ n_{L_1}^{(2,4)} &= \left[ 2 + e^{\frac{E_{L_1}^{(2,4)\delta} - E_{L_1}^{(2,4)\beta}}{kT}} + e^{\frac{E_{L_1}^{(2,4)\gamma} - E_{L_1}^{(2,4)\beta}}{kT}} \right]^{-1}, \\ n_{L_1}^{(3)} &= \left[ 1 + e^{\frac{E_{L_1}^{(3)\beta} - E_{L_1}^{(3)\gamma}}{kT}} + 2e^{\frac{E_{L_1}^{(3)\delta} - E_{L_1}^{(3)\beta}}{kT}} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (53 \text{ a})$$

Recorrendo as expressões (40) é fácil mostrar que estas fórmulas coincidem com as apresentadas em [5].

Consideremos alguns casos particulares das expressões para os números de preenchimento.

Sendo conhecido do parágrafo anterior o comportamento dos vales energéticos no cristal deformado, segue-se a análise dos casos particulares mais interessantes dos números de preenchimento partindo das expressões gerais (53):

No caso  $\beta = 0^\circ$  os potenciais de deformação dos  $L_1^{(1)}$ -,  $L_1^{(2,4)}$ - e  $L_1^{(3)}$ -vales são iguais i.e. estes vales estão identicamente orientados em relação ao eixo da deformação e os  $\Delta_1$ -vales temos dois grupos de vales com potenciais de deformação diferentes  $\Delta_1^{(1,2)}$ - e  $\Delta_1^{(3-6)}$ -vales. Tomando em conta estas observações as expressões para os números de preenchimento terão a forma:

$$\begin{aligned} n_{L_1}^{(1-4)} &= \left\{ 4 + 2 \left( \frac{m_{L_1}^{(1-4)}}{m_{L_1}^{(1-4)}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_{L_1}^{(1-4)\beta} - E_{L_1}^{(1-4)\gamma}}{kT}} \left[ e^{\frac{E_{L_1}^{(1-4)\delta} - E_{L_1}^{(1-4)\beta}}{kT}} + 2e^{\frac{E_{L_1}^{(1-4)\gamma} - E_{L_1}^{(1-4)\beta}}{kT}} \right] \right\}^{-1}, \\ n_{\Delta_1}^{(1,2)} &= \left[ 4 \left( \frac{m_{\Delta_1}^{(1,2)}}{m_{\Delta_1}^{(1,2)}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_{\Delta_1}^{(1,2)\beta} + \Delta_1 E_{\Delta_1}^{(1,2)\beta} - E_{\Delta_1}^{(1,2)\gamma}}{kT}} + 2 + 4e^{\frac{E_{\Delta_1}^{(1,2)\delta} - E_{\Delta_1}^{(1,2)\beta}}{kT}} \right]^{-1}, \\ n_{\Delta_1}^{(3-6)} &= \left[ 4 \left( \frac{m_{\Delta_1}^{(3-6)}}{m_{\Delta_1}^{(3-6)}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_{\Delta_1}^{(3-6)\beta} + \Delta_1 E_{\Delta_1}^{(3-6)\beta} - E_{\Delta_1}^{(3-6)\gamma}}{kT}} + 4 + 2e^{\frac{E_{\Delta_1}^{(3-6)\delta} - E_{\Delta_1}^{(3-6)\beta}}{kT}} \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (54)$$

o que coincide com [15-20,24,25].

Quando a tensão deformadora  $P < P_0$ , i.e. os  $\Delta_1$ -vales estão relativamente afastados dos  $L_1$ -vales podemos desprezar a influência dos  $\Delta_1$ -vales. Neste caso os portadores de carga estarão distribuídos uniformemente entre os  $L_1$ -vales ( $n_{L_1}^{(1-4)} \approx 1/4$ ,  $n_{\Delta_1}^{(1-6)} \approx 0$ ). Com o crescimento gradual do esforço deformador a distância na escala energética dos  $L_1^{(1-4)}$ - e  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales diminui e o número dos electrões em  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales aumenta, enquanto o em  $L_1^{(1-4)}$ -vales diminui.

Quando  $L_1^{(1-4)}$ - e  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales se tornam energeticamente equivalentes, i.e. eles estão na mesma posição na escala energética, atinge-se o tal chamado ponto de inversão  $P = P_0$  [13-15]. Quando se atinge a pressão de inversão temos mesma quantidade dos electrões distribuídos entre  $L_1^{(1-4)}$ - e  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales,  $n_{L_1}^{(1-4)} = n_{\Delta_1}^{(1,2)} = 1/6$ . Sob as tensões maiores  $P > P_0$  temos  $n_{L_1}^{(1-4)} = 0$ ,  $n_{\Delta_1}^{(1,2)} = 1/2$ ,  $n_{\Delta_1}^{(3-6)} = 0$ .

Consideremos o caso em que o esforço deformador está orientado ao longo do diagonal espacial do cubo  $\sin\beta = \sqrt{2/3}$  e  $\cos\beta = \sqrt{1/3}$ . Neste caso segundo (51) temos dois grupos  $L_1$ -vales  $E_{L_1}^{(1)}$   $E_{L_1}^{(2)} = E_{L_1}^{(3)} = E_{L_1}^{(4)}$  e um grupo dos  $\Delta_1$ -vales  $E_{\Delta_1}^{(1,2)} = E_{\Delta_1}^{(3,4)} = E_{\Delta_1}^{(5,6)}$ .

Das fórmulas (53) obteremos as expressões dos números de preenchimento de modo:

$$\begin{aligned} n_{L_1}^{(1)} &= \left[ 1 + 3e^{E_{L_1}^{(1)} - E_{L_1}^{(2-4)}} + 6 \left( \frac{m_{L_1}^{\Delta_1}}{m_{L_1}^{L_1}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{E_{L_1}^{(1)} - \Delta E_{L_1}^{(1)} - E_{L_1}^{(2-4)}} \right]^{-1}, \\ n_{L_1}^{(2,4)} &= \left[ 3 + e^{E_{L_1}^{(2-4)} - E_{L_1}^{(1)}} + 6 \left( \frac{m_{L_1}^{\Delta_1}}{m_{L_1}^{L_1}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{E_{L_1}^{(2-4)} - \Delta E_{L_1}^{(2-4)} - E_{L_1}^{(1)}} \right]^{-1}, \\ n_{\Delta_1}^{(1-6)} &= \left[ \left( \frac{m_{L_1}^{\Delta_1}}{m_{L_1}^{L_1}} \right)^{\frac{3}{2}} e^{E_{L_1}^{(1-6)} - \Delta E_{L_1}^{(1-6)}} \left( e^{E_{L_1}^{(1)}} - 3e^{-E_{L_1}^{(2-4)}} \right) + 6 \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (55)$$

Como tinha sido indicado antes (veja análise depois de (51)), dois grupos de vales descem na escala energética  $L_1^{(1)}$ - e  $\Delta_1^{(1-6)}$ -vales, mas os portadores de carga estarão distribuídos no  $L_1^{(1)}$ -vale que desce rapidamente em comparação com os  $\Delta_1^{(1-6)}$ -vales, enquanto que os restantes vales sobem rapidamente e por isso não possuem electrões o que significa que neste caso sempre teremos sob as  $P$  relativamente grandes ( $P \geq 5.0 \cdot 10^3 \text{ kgf/cm}^2$ ) os electrões localizados em  $L_1^{(1)}$ -vale. Neste caso realiza-se o modelo do Germânio com um vale.



No caso da tensão deformadora  $P \ll P_0$ , como no caso anterior podemos desprezar a influência dos  $\Delta_1$  - vales e obteremos as fórmulas conhecidas [3,5],

$$n_{L_1}^{(0)} = \left[ 1 + 3e^{\frac{E_{L_1}^{(1,1)}}{kT} - \frac{E_{L_1}^{(2,1)}}{kT}} \right]^{-1} \quad (55 a)$$

Finalmente consideremos o terceiro caso particular  $\beta = 90^\circ$ , que é, também um dos mais interessantes. Recorrendo as expressões dos potenciais de deformação, às fórmulas para os números de preenchimento escrevemos na forma:

$$\begin{aligned} n_{L_1}^{(2,3)} &= \left\{ 2 + 2e^{\frac{E_{L_1}^{(1,2)}}{kT} - \frac{E_{L_1}^{(2,2)}}{kT}} + 2 \left( \frac{m_{N_1}^{\Delta_1}}{m_{N_1}^L} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_{L_1}^{(1,1)}}{kT} - \Delta E_1^*} \left[ e^{-\frac{E_{L_1}^{(1,2)}}{kT}} + 2e^{-\frac{E_{L_1}^{(2,2)}}{kT}} \right] \right\}^{-1}, \\ n_{L_1}^{(2,4)} &= \left\{ 2 + 2e^{\frac{E_{L_1}^{(2,4)}}{kT} - \frac{E_{L_1}^{(1,4)}}{kT}} + 2 \left( \frac{m_{N_1}^{\Delta_1}}{m_{N_1}^L} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_{L_1}^{(1,1)}}{kT} - \Delta E_1^*} \left[ e^{-\frac{E_{L_1}^{(1,2)}}{kT}} + 2e^{-\frac{E_{L_1}^{(2,2)}}{kT}} \right] \right\}^{-1}, \\ n_{\Delta_1}^{(1,2)} &= \left[ \left( \frac{m_{N_1}^{\Delta_1}}{m_{N_1}^L} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_{L_1}^{(1,2)}}{kT} - \Delta E_1^*} \left( 2e^{-\frac{E_{L_1}^{(1,2)}}{kT}} + 2e^{-\frac{E_{L_1}^{(2,2)}}{kT}} \right) + 2 + 4e^{\frac{E_{L_1}^{(1,2)}}{kT} - \frac{E_{L_1}^{(2,2)}}{kT}} \right]^{-1}, \\ n_{\Delta_1}^{(3,6)} &= \left[ \left( \frac{m_{N_1}^{\Delta_1}}{m_{N_1}^L} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_{L_1}^{(1,2)}}{kT} - \Delta E_1^*} \left( 2e^{-\frac{E_{L_1}^{(1,2)}}{kT}} + 2e^{-\frac{E_{L_1}^{(2,2)}}{kT}} \right) + 4 + 2e^{\frac{E_{L_1}^{(1,2)}}{kT} - \frac{E_{L_1}^{(2,2)}}{kT}} \right]^{-1}. \quad (56) \end{aligned}$$

Neste caso temos quatro grupos de vales a saber dois grupos de  $L_1$  - vales:  $L_1^{(1,2)}$  - e  $L_1^{(2,4)}$ -vales e dois grupos dos  $\Delta_1$  - vales:  $\Delta_1^{(1,2)}$  - e  $\Delta_1^{(3,6)}$ -vales dos quais  $\Delta_1^{(1,2)}$  - e  $L_1^{(2,4)}$ -vales sobem na escala energética, conseqüentemente perdem os electrões enquanto que os  $\Delta_1^{(3,6)}$  - e  $L_1^{(1,2)}$ -vales descem na escala energética. Os  $L_1^{(1,1)}$ -vales estão praticamente preenchidos por electrões porque descem rapidamente na escala energética, i.e. estão em baixo de todos os vales na escala energética, enquanto que os  $\Delta_1^{(2,3)}$ -vales descem lentamente. Deste modo realiza-se o modelo do Germânio com dois vales  $L_1^{(1,2)}$  energéticos.

Considerando o caso em que a tensão deformadora  $P \ll P_0$ , como nos casos anteriores, podemos ignorar a influência dos  $\Delta_1$  - vales e obteremos as fórmulas conhecidas [3,5]:

$$n_{r_1}^{(1,3)} = \frac{1}{2} \left[ 1 + e^{\frac{E_1^{(1,3)} - E_1^{(1,3)}}{P}} \right]^{-1},$$

$$n_{r_1}^{(2,4)} = \frac{1}{2} \left[ 1 + e^{\frac{E_1^{(2,4)} - E_1^{(2,4)}}{P}} \right]^{-1}. \quad (57)$$

### VIII – CINÉTICA DE DESLOCAMENTO DOS VALES ENERGÉTICOS

Para facilitar a interpretação dos resultados numéricos dos potenciais de deformação e números de preenchimento foi feito um programa em Pascal que está apresentado no Anexo 2. O programa está subdividido em duas parte, uma é para efectuar os cálculos dos potenciais de deformação em função da tensão deformadora de 0 até  $3 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$  por ciclos do ângulo de  $\beta = 0^\circ$  até  $\beta = 90^\circ$  e a segunda parte é do cálculo dos respectivos números de preenchimento. O esquema do programa está apresentado abaixo.

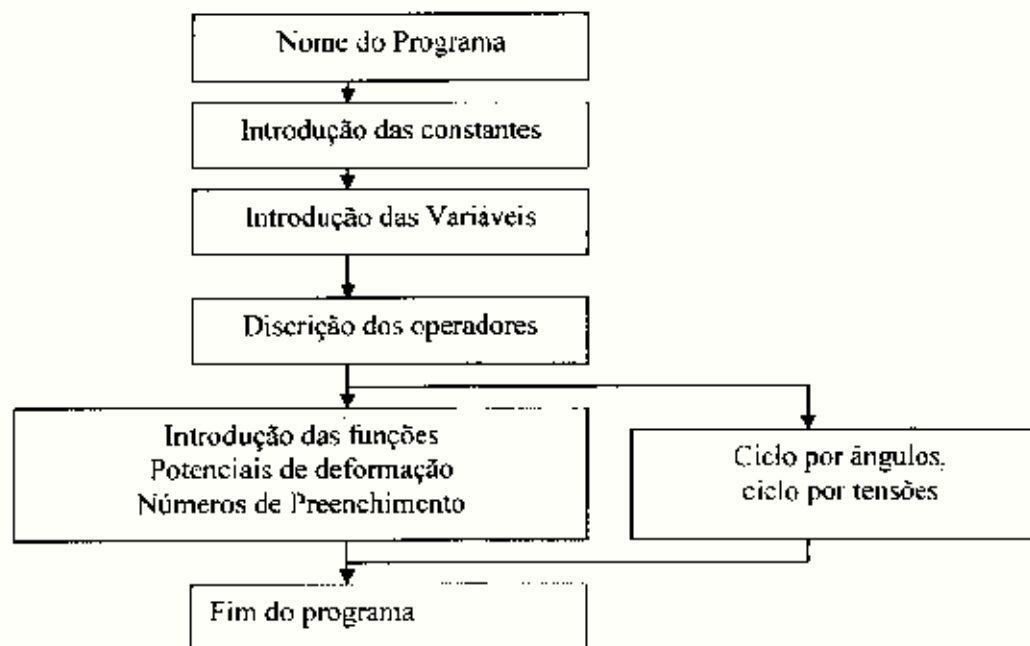


Fig.3. Esquema do programa de cálculo dos potenciais de deformação e números de preenchimento.

Constantes usadas para os cálculos numéricos. As constantes dos potenciais de deformação usadas são:  $C_1^{L_1} = 0.1 \text{ eV}$ ,  $C_2^{L_1} = 12.0 \text{ eV}$  [15] e  $C_3^{L_1} = 16.4 \text{ eV}$ ,  $C_1^{L_2} = -6.4 \text{ eV}$  [3,5], as massas eficazes dos electrões:

$$L_1\text{-vales: } m_{11}/m_0 = 0.082 \quad m_{33}/m_0 = 1.58 \quad [3,5] \text{ e}$$

$$\Delta_1\text{-vales: } m_{11}/m_0 = 0.9 \quad m_{33}/m_0 = 0.192.$$

Os valores dos módulos elásticos [3,25,27]:

$T = 78K$  :

$$S_{11} = 9.378 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{kgf}, \quad S_{12} = -2.56 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{kgf}, \quad S_{44} = 14.342 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{kgf} \text{ e}$$

$T = 293K$  :

$$S_{11} = 9.553 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{kgf}, \quad S_{12} = -2.603 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{kgf}, \quad S_{44} = 14.615 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{kgf}.$$

Os cálculos foram realizados para as temperaturas de nitrogénio líquido e temperatura ambiente (78K e 293k) respectivamente, porque existem dados experimentais da medição dos coeficientes cinéticos à estas temperaturas, o que vai permitir a comparação no futuro dos dados teóricos com os experimentais e tirar conclusões sobre parâmetros característicos do cristal.

Consideremos primeiro a cinética do deslocamento dos vales energéticos a temperatura de 78K. Sob  $\beta = 0^\circ$  temos três grupos de vales a saber:  $L_1^{(1-4)}$ ,  $\Delta_1^{(3-6)}$  e  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales onde os  $L_1^{(1-4)}$  e  $\Delta_1^{(3-6)}$ -vales tem potenciais de deformação positivos, portanto sobem na escala energética e os  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales descem na escala energética. Este caso está ilustrado na fig.4 como se vê para menores tensões aplicadas só temos os  $L_1$ -vales com menores potenciais de deformação, i.e. os estão abaixo de todos os restantes vales e, pois, são  $L_1$ -vales que estão preenchidos por electrões, o que justifica mais uma vez o uso do  $L_1$ - modelo de Germânio para menores tensões aplicadas. Este caso foi considerado em [3-9].

Os  $L_1^{(1-4)}$ -vales sobem lentamente até as pressões  $1.5 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$ , os estão ocupados por electrões. Com o crescimento do esforço deformador os  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales aproximam-se dos  $L_1^{(1-4)}$ -vales na escala energética e os electrões transitam para estes vales ( $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales). No ponto de inversão  $P_0 = 1.7 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$ , estes dois grupos de vales são energeticamente equivalentes na escala energético, i.e. estão na mesma posição, os seus potenciais de deformação são iguais.

A partir deste ponto com o crescimento posterior da tensão deformadora os  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales estão abaixo de todos os vales. A energia menor dos portadores de carga será nestes vales, por isso estes vales estão completamente preenchidos por electrões e assim realiza-se o modelo do Germânio com dois  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales.

A fig.5 mostra a cinética de deslocamento dos vales com a orientação do esforço deformador em ângulo de  $\beta = 5^\circ$  em relação ao eixo cristalográfico  $[001]$ . Neste caso são validas as expressões gerais para os potenciais de deformação, onde temos cinco grupo de vales, três grupos dos  $L_1$  - vales:  $L_1^{(1)}$ -,  $L_1^{(3)}$ - e  $L_1^{(2,4)}$ -vales e dois grupos de  $\Delta_1$ -vales:  $\Delta_1^{(1,2)}$ - e  $\Delta_1^{(3,6)}$ -vales. Os  $\Delta_1^{(1,2)}$ -  $L_1^{(1)}$ -vales possuem os potenciais de deformação negativos, i.e. descem na escala energética e observa-se uma subidas dos  $\Delta_1^{(3,6)}$ -,  $L_1^{(3)}$ - e  $L_1^{(2,4)}$ -vales na escala energética pois estes vales possuem potenciais de deformação positivos. Para menores tensões aplicadas o  $L_1^{(1)}$ -vale está abaixo de todos os vales e realiza-se o tal chamado um  $L_1^{(1)}$  - modelo de Germânio. Nestas condições de orientação do esforço deformador a inversão dos electrões entre os  $\Delta_1^{(1,2)}$ - e  $L_1^{(1)}$ -vales ocorre a partir de  $2.4 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$ . neste ponto os dois grupos de vales são energeticamente equivalentes, e para  $p > p_0$ ,  $\Delta_1^{(1,2)}$ - vales estão em baixo de todos os restantes vales, de novo realiza-se o modelo do germânio com dois  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales, para maiores tensões aplicadas, equivalente ao modelo observado sob  $\beta = 0^\circ$ .

Aumentando o ângulo de orientação do esforço deformador para  $\beta = 10^\circ$ , obteremos os resultados indicados na fig.6. Neste caso também são validas as expressões gerais para os potenciais de deformação (usadas para  $\beta = 5^\circ$ ). É fácil ver que o deslocamento dos vales é qualitativamente semelhante ao observado para  $\beta = 5^\circ$ , só que o ponto de inversão desloca-se para a região de altas pressões. O modelo de germânio com um  $L_1^{(1)}$ -vale observa-se até as pressões maiores, pois ainda não é possível realizar transição dos electrões entre os vales porque estes estão bem afastados na escala energética. Caso estender as pressões acima das  $3.0 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$  será possível ocorrer a inversão dos electrões entre estes vales e de novo vai se realizar o modelo de Germânio observado para os dois casos anteriores, à maiores tensões aplicadas.

Consideremos o seguinte caso especial em que a tensão deformadora está dirigida ao longo do diagonal espacial do cubo  $P // [111]$ . O ângulo da orientação da tensão deformadora satisfaz as relações  $\sin \beta = \sqrt{2/3}$  e  $\cos \beta = \sqrt{1/3}$ . Neste caso temos três grupos de vales a saber:  $L_1^{(2-4)}$ ,  $L_1^{(1)}$  e  $\Delta_1^{(1-6)}$ -vales. Os vales  $\Delta_1^{(1-6)}$ -vales (orientados identicamente ao longo do eixo da deformação) e  $L_1^{(1)}$ -vale descem na escala energética, pois possuem potenciais de deformação negativos e os  $L_1^{(2-4)}$ -vales sobem na escala energética esta situação está mostrada na fig.7. É de notar que apesar dos dois grupos de vales estarem a descer na escala energética os portadores de carga estão localizados no  $L_1^{(1)}$ -vale porque o desce mais rápida na escala energética do que os  $\Delta_1^{(1-6)}$ -vales, i.e. a distância energética entre estes vales aumenta, assim vai se realizar o modelo do Germânio com um  $L_1^{(1)}$ -vale.

Finalmente analisaremos o caso.  $\beta = 90^\circ$  fig.8. Como foi mostrado, temos quatro grupos de vales a saber:  $L_1^{(1-3)}$ ,  $L_1^{(2-4)}$ ,  $\Delta_1^{(1-2)}$  e  $\Delta_1^{(3-6)}$ -vales dos quais  $\Delta_1^{(1-2)}$  e  $L_1^{(2-4)}$ -vales possuem potenciais de deformação positivos e deste modo sobem na escala energética enquanto que os  $\Delta_1^{(3-6)}$  e  $L_1^{(1-3)}$ -vales com potenciais de deformação negativos, descem na escala energética. Os  $L_1^{(1-3)}$ -vales descem rapidamente na escala energética e os  $\Delta_1^{(3-6)}$ -vales descem lentamente, deste modo os  $L_1^{(1-3)}$ -vales estarão completamente preenchidos por electrões e assim realiza-se o modelo do Germânio com dois  $L_1^{(1-3)}$ -vales. Nestas condições de orientação do esforço deformador não ocorre a inversão dos electrões entre os  $L_1^{(1-3)}$  e  $\Delta_1^{(3-6)}$ -vales, porque a distância energética entre eles é grande e aumenta com o crescimento do esforço deformador.

É de notar que com a variação da temperatura pouco variam os potenciais de deformação. Estes possuem a dependência da temperatura através dos módulos elásticos que tem fraca dependência da temperatura. Portanto o comportamento verificado para temperatura de  $T = 78K$  será qualitativamente semelhante para  $T = 293K$ , como mostram as fig.9-13.

É interessante considerar a dependência de potenciais de deformação em função do ângulo ( $E_{T, \nu_1} = f(\beta)$ ) para certos valores do esforço deformador. Analisaremos a dependência dos ângulos para pressões antes do ponto de inversão dos  $L_1$  e  $\Delta_1$ -vales e depois das pressões de inversão, i.e. de  $1.5 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$  e  $2.5 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$ .

As expressões analíticas obtidas mostram que os  $L_1$ -vales estão subdivididos em três grupos:  $L_1^{(1-4)}$ -,  $L_1^{(3)}$ - e  $L_1^{(1)}$ -vales e  $\Delta_1$ -vales só em dois grupos,  $\Delta_1^{(1,2)}$ - e  $\Delta_1^{(3-6)}$ -vales. As figs.14-15 mostram a dependência dos potenciais de deformação em função do ângulo para a temperatura de 78 K. Vê-se que todos os electrões estão distribuídos nos  $L_1$ -vale para  $\beta = 0^\circ$  e  $P = 1.5 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$ . com o aumento do ângulo a redistribuição dos electrões ocorre entre os  $L_1$ -vales porque estão bem afastados dos  $\Delta_1$ -vales na escala energética. Quando a pressão é de  $2.0 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$  é possível ocorrer a inversão dos electrões entre os  $L_1$ - e  $\Delta_1$ -vales energéticos no intervalo de ângulos  $0^\circ < \beta < 10^\circ$ . Com aumento gradual do ângulo todos os electrões ficam distribuídos só no  $L_1^{(1)}$ -vale, pois estes possuem potenciais de deformação negativos e diminui com o aumento do ângulo da orientação do esforço deformador. Os potenciais de deformação atingem o valor mínimo quando o esforço deformador está orientado ao longo do diagonal espacial do cubo,  $\text{sen}\beta = \sqrt{2/3}$  e  $\text{cos}\beta = \sqrt{1/2}$ . A variação do ângulo de  $10^\circ < \beta < 70^\circ$ , praticamente todos electrões ficam localizados no  $L_1^{(1)}$ -vale. Neste intervalo dos ângulos sempre realiza-se o modelo do Germânio com um  $L_1^{(1)}$ -vale. A partir de  $\beta = 80^\circ$  o  $L_1^{(3)}$ -vale aproxima-se do  $L_1^{(1)}$ -vale e para  $\beta = 90^\circ$  estes dois vales são energeticamente equivalentes, i.e. estão na mesma posição na escala energética. Estes vales deslocam-se identicamente na escala energética e assim realiza-se o modelo do Germânio com dois  $L_1^{(1)}$  e  $L_1^{(3)}$ -vales energéticos.

## IX - REDISTRIBUIÇÃO DOS ELECTRÕES ENTRE OS VALES ENERGÉTICOS. ANÁLISE DOS RESULTADOS NUMÉRICOS

Levando em conta os resultados das expressões analíticas dos potenciais de deformação e o seu comportamento em função do esforço deformador, é possível investigar a redistribuição dos electrões para cada vale energético. Para análise dos números de preenchimento, consideremos um ângulo fixo com a variação do esforço deformador de 0 até  $3.0 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$ . Sob  $\beta = 0^\circ$ , como mostra a fig.16 para a temperatura de 78 K todos os electrões ficam distribuídos nos  $L_1$ -vales no intervalo  $P < P_0$  com mesma quantidade  $L_1^{(1-4)} = 1/4$  para cada vale. Com o aumento do esforço deformador os  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales aproximam-se aos  $L_1$ -vales e os electrões transitam para estes vales.

Já sob as pressões de  $P > 2.0 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$  os dois  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales estão completamente preenchidos com electrões porque estão em baixo de todos os vales, i.e. os potenciais de deformação são negativos ( $n_{\Delta_1^{(1,2)}} = 1/2$  para cada vale).

Sob  $\beta = 5^\circ$ , os  $L_1^{(2,4)}$ - e  $\Delta_1^{(3,6)}$ -vales sobem na escala energética e todos electrões distribuem-se no  $L_1^{(1)}$ -vale que se encontra em baixo de todos os vales, a partir de pressão de  $P > 2.0 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$  os  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales aproximam-se do  $L_1^{(1)}$ -vale, como mostra a fig.17. E quando o esforço deformador atinge  $P_0 = 2.4 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$ , a quantidade dos electrões torna-se compatível ( $n_{\Delta_1^{(1,2)}} = n_{L_1^{(1)}} = 1/3$ ). A partir de  $P > P_0$  ocorre a inversão dos electrões entre os vales sob pressões maiores os  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales estão abaixo de todos os restantes vales, por isso estão completamente preenchidos por electrões. Quando  $\beta = 10^\circ$  como mostra a fig.18, sob pressão de  $3.0 \cdot 10^4 \text{ kgf/cm}^2$  o  $L_1^{(1)}$ -vale é o único com menor energia dos portadores de carga por isso este vale está ocupado, a inversão dos electrões entre os vales ocorre às altas pressões. Quando a tensão deformadora está dirigida ao longo do diagonal espacial do cubo os electrões ficam localizados no  $L_1^{(1)}$ -vale porque o desce mais rápida na escala energética como mostra a fig.19. Já quando o esforço deformador está orientado por um ângulo  $\beta = 90^\circ$ , este caso está representado na fig.20, descem na escala energética os  $L_1^{(1,3)}$ - e  $\Delta_1^{(3,6)}$ -vales, e sobem os  $L_1^{(2,4)}$ - e  $\Delta_1^{(1,2)}$ -vales. Os electrões estão distribuídos entre os  $L_1^{(1,3)}$ -vales porque estes vales possuem potenciais de deformação negativos e descem mais rápido do que os  $\Delta_1^{(3,6)}$ -vales na escala energética e a distância energética de separação entre estes vales aumenta. Deste modo realiza-se o modelo de Germânio com dois  $L_1^{(1,3)}$ -vales com igual número de electrões.

Com o crescimento da temperatura  $T = 293K$ , é possível ocorrer transições dos electrões entre vales energéticos sob as tensões menores porque a energia térmica média dos portadores é maior. Estas transições começam a ocorrer sob menores valores das tensões de deformação aplicadas como mostram as fig.21-25. As curvas que descrevem esta dependência, dos números de preenchimento em função da tensão deformadora para a temperatura do ambiente sofrem um alastramento e o ponto de inversão dos electrões ocorre sob as pressões menores. Deste modo verifica-se o mesmo comportamento observado à  $T = 78K$ , só que, há variação nas pressões em que começa a ocorrer a redistribuição dos electrões. Anotemos mais uma vez, que serão observados os modelos do Germânio semelhantes às observados para temperatura de  $T = 78K$ .

Potenciais de deformação  
 $T=78k, m1s=0.192, m3s=0.9, \beta=0^\circ,$   
 $c1s=0.1, c2s=12$

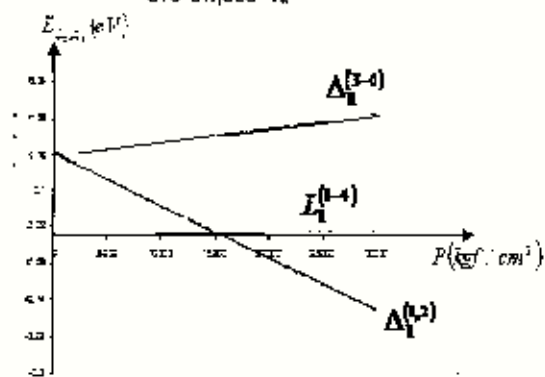


Fig.4. Potenciais de deformação  $T=78K, \beta=0^\circ$ .

Potenciais de deformação  $T=78k,$   
 $m1s=0.192, m3s=0.9, \beta=5^\circ,$   
 $c1s=0.1, c2s=12$

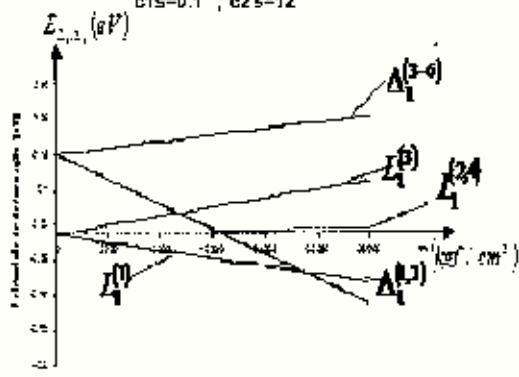


Fig.5. Potenciais de deformação  $T=78K, \beta=5^\circ$ .

Potenciais de deformação  $T=78k,$   
 $m1s=0.192, m3s=0.9, \beta=10^\circ,$   
 $c1s=0.1, c2s=12$

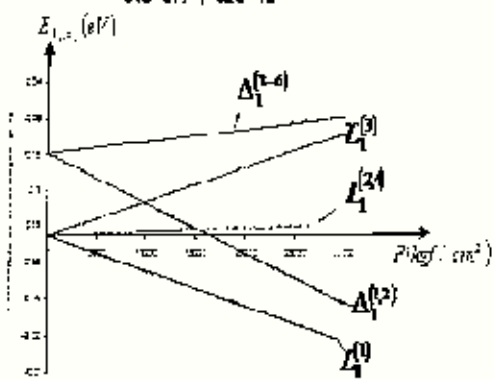


Fig.6. Potenciais de deformação  $T=78K, \beta=10^\circ$ .

Potenciais de deformação  $T=78k,$   
 $m1s=0.192, m3s=0.9, \beta=54.7356^\circ,$   
 $c1s=0.1, c2s=12$

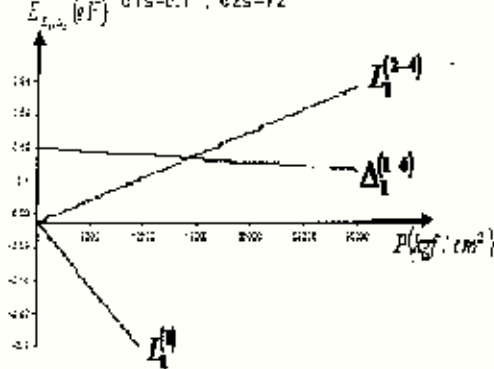


Fig.7. Potenciais de deformação  $T=78K, \beta=54.7356^\circ$ .

Potenciais de deformação  
 $T=78k, m1s=0.192, m3s=0.9, \beta=90^\circ,$   
 $c1s=0.1, c2s=12$

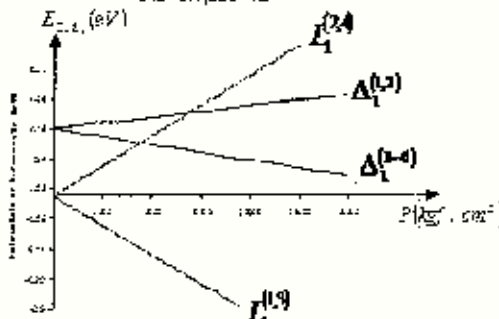


Fig.8. Potenciais de deformação  $T=78K, \beta=90^\circ$ .

Potenciais de deformação  $T=293K,$   
 $m1s=0.192, m3s=0.9, \beta=0^\circ,$   
 $c1s=0.1, c2s=12$

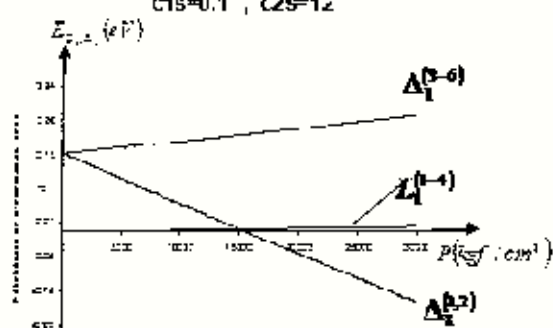


Fig.9. Potenciais de deformação  $T=293K, \beta=0^\circ$ .



Potenciais de deformação  $T=293k$ ,  
 $m1s=0.192$ ,  $m3s=0.9$ ,  $B=5^\circ$ ,  
 $c1s=0.1$ ,  $c2s=12$

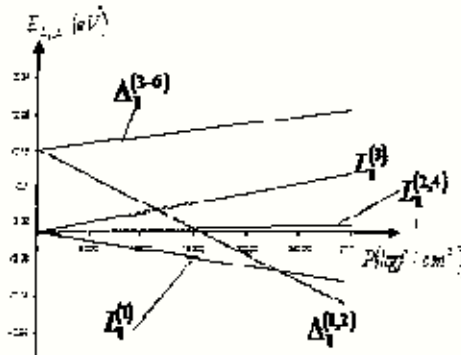


Fig.10. Potenciais de deformação  $T = 293K$ ,  $B = 5^\circ$ .

Potenciais de deformação  $T=293k$ ,  
 $m1s=0.192$ ,  $m3s=0.9$ ,  $B=10^\circ$ ,  
 $c1s=0.1$ ,  $c2s=12$

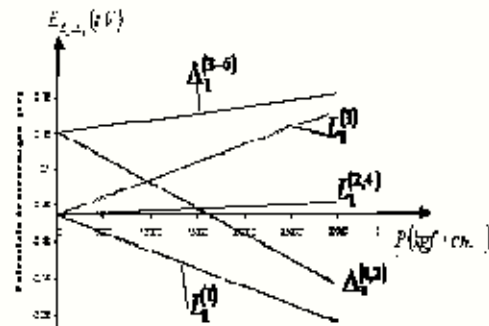


Fig.11. Potenciais de deformação  $T = 293K$ ,  $B = 10^\circ$ .

Potenciais de deformação  $T=293k$ ,  
 $m1s=0.192$ ,  $m3s=0.9$ ,  $B=90^\circ$ ,  
 $c1s=0.1$ ,  $c2s=12$

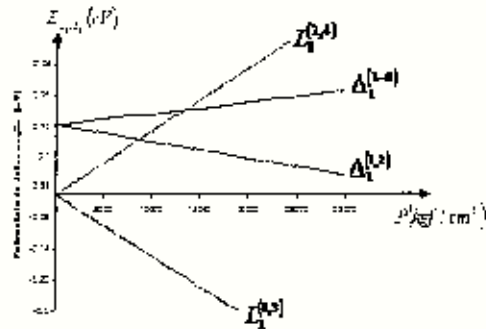


Fig.12. Potenciais de deformação  $T = 293K$ ,  $B = 90^\circ$ .

Potenciais de deformação  $T=293k$ ,  
 $m1s=0.192$ ,  $m3s=0.9$ ,  $B=54.7356^\circ$ ,  
 $c1s=0.1$ ,  $c2s=12$

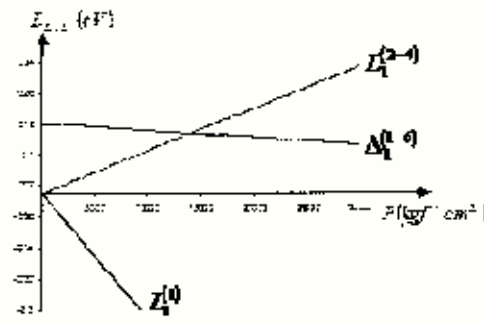


Fig.13. Potenciais de deformação  $T = 293K$ ,  $B = 54.7356^\circ$ .

Potenciais de deformação  $T=78k$

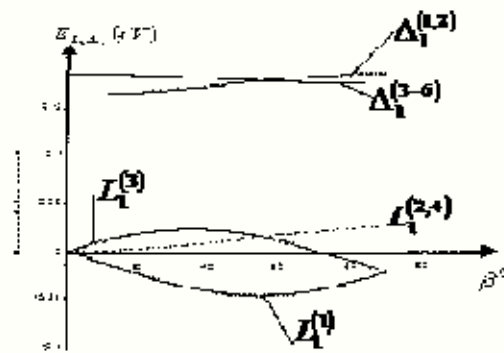


Fig.14. Potenciais de deformação  
 $T = 78K$ ,  $P = 15 \cdot 10^3 \text{ kgf/cm}^2$ .

Potenciais de deformação  $T=78k$

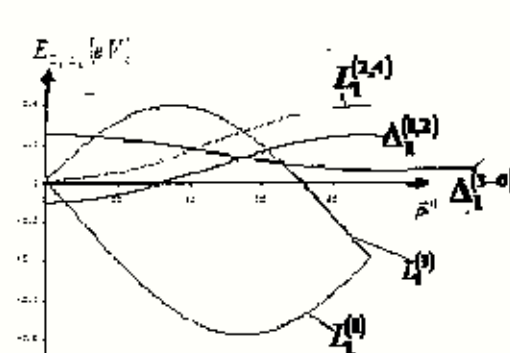


Fig.15. Potenciais de deformação  
 $T = 78K$ ,  $P = 25 \cdot 10^3 \text{ kgf/cm}^2$ .

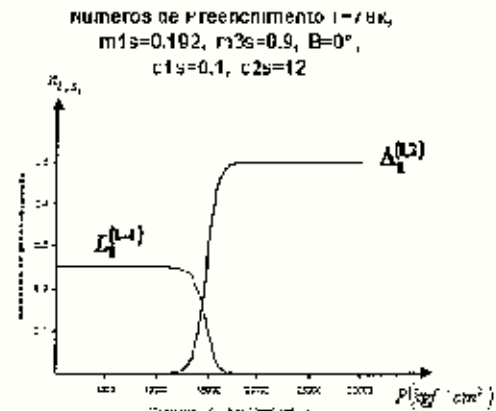


Fig.16. Números de preenchimento  $T = 78K$ ,  $B = 0^\circ$ .

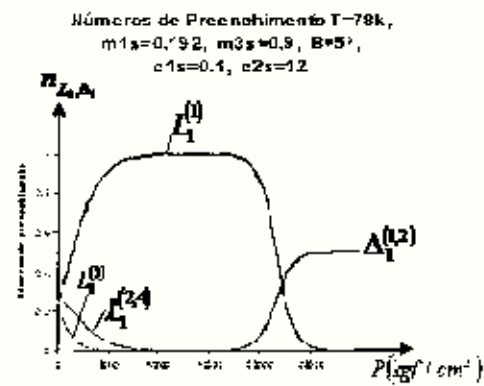


Fig.17. Números de preenchimento  $T = 78K$ ,  $B = 5^\circ$ .

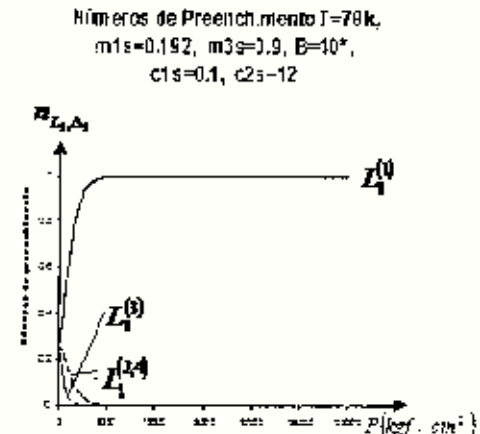


Fig.18. Números de preenchimento  $T = 78K$ ,  $B = 10^\circ$ .

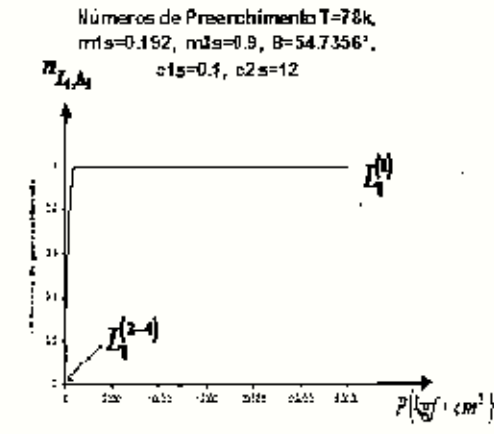


Fig.19. Números de preenchimento  $T = 78K$ ,  $B = 54.7356^\circ$ .

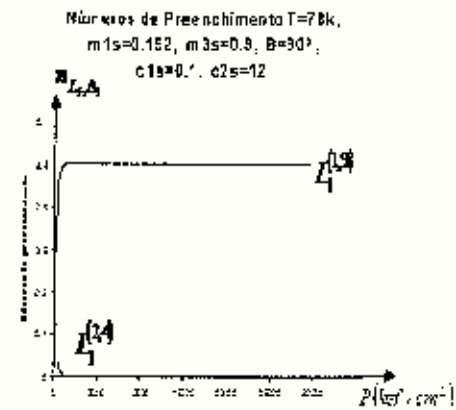


Fig.20. Números de preenchimento  $T = 78K$ ,  $B = 90^\circ$ .

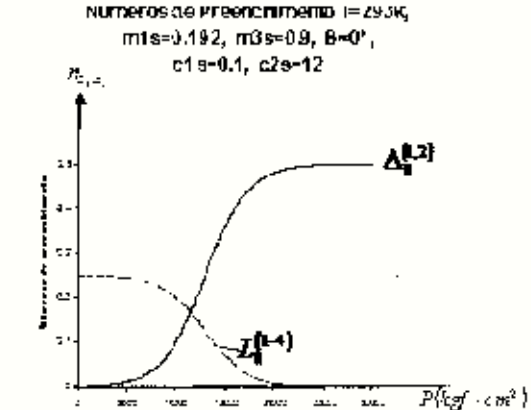


Fig.21. Números de preenchimento  $T = 293K$ ,  $B = 0^\circ$ .

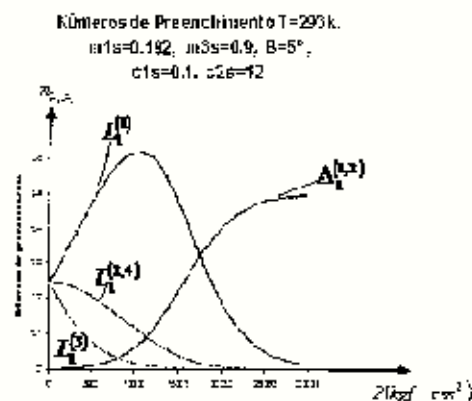


Fig.22. Números de preenchimento  $T = 293K$ ,  $\beta = 5^\circ$

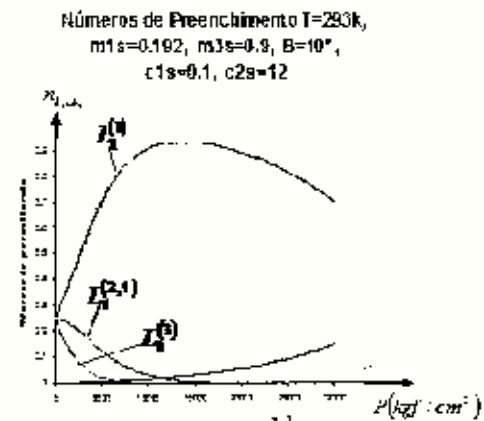


Fig.23. Números de preenchimento  $T = 293K$ ,  $\beta = 10^\circ$

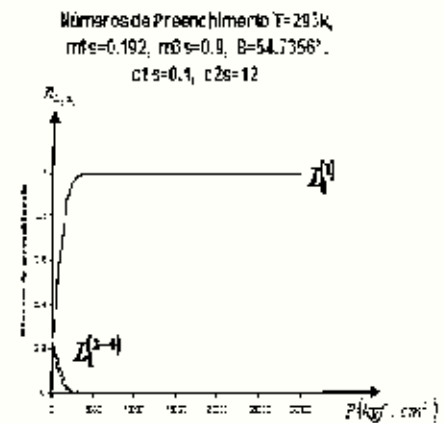


Fig.24. Números de preenchimento  $T = 293K$ ,  $\beta = 54.7356^\circ$

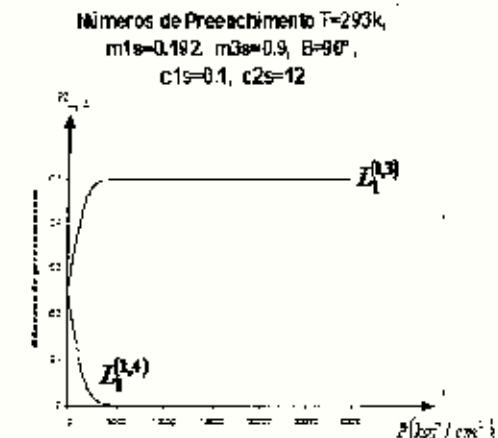


Fig.25. Números de preenchimento  $T = 293K$ ,  $\beta = 90^\circ$

## X-CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

1. Foi feita a revisão bibliográfica que permitiu investigar a influência das deformações para a redistribuição dos electrões entre os  $L_1$ - e  $\Delta_1$ - vales energéticos dos monocristais do Germânio deformado.
2. Foram encontradas as expressões explícitas para os potenciais de deformação dos  $L_1$ - e  $\Delta_1$ -vales do Germânio que permitiram prever o deslocamento dos vales na escala energética.

3. Na base do programa elaborado para realizar os cálculos numéricos foi investigada a cinética do deslocamento dos diferentes vales energéticos na presença do esforço deformador orientado arbitrariamente no plano cristalográfico  $(110)$ . Foram analisados os casos particulares importantes.
4. Foram encontradas e analisadas as expressões analíticas para os números de preenchimentos para cada vale. Usando as fórmulas explícitas para os potenciais de deformação foram realizados os cálculos numéricos na base do programa especialmente elaborado para este fim. Os cálculos numéricos foram realizados para as temperaturas do nitrogênio líquido e para as do ambiente. A atenção especial foi dedicada a análise dos casos particulares importantes.
5. Os resultados obtidos permitem realizar as investigações teóricas dos diferentes efeitos cinéticos e também os simplificam análise dos dados experimentais. A par disto a informação obtida neste trabalho permite realizar a modelação qualitativa das propriedades dos semicondutores mais complicados.
6. Sendo conhecidos os dados experimentais para a piezoresistência do Germânio no caso da orientação arbitrária do esforço deformador no plano  $(110)$  recomenda-se realizar os cálculos necessários para verificar e comprovar as suposições teóricas e escolha dos parâmetros dos  $\Delta_1$ -vales do Germânio.

## XI - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Smith C.S. Piezoresistance effect in germanium and silicon, Phys. Rev., 1954, v.94, N1, p 42-49.
2. Herring C. Transport properties of many-valley semiconductors, Bell System Techn. J., 1956, v34, N1, p237-290.
3. Baranskii P.I., Buda I.S., Dakhovskii I.V., Kolomoets V.V., Electric and galvanomagnetic phenomena in anisotropic semiconductors, Kiev, Naukova Dumka, 1977. – 270p.

4. Baranskii P.I., Buda I.S., Dakhovskii I.V., Theory of thermoelectric and thermomagnetic phenomena in anisotropic semiconductors, Kiev, Naukova Dumka, 1987. – 272p.
5. Baranskii P.I., Buda I.S., Saviak V.V., Thermoelectric and thermomagnetic phenomena in many valey semiconductors, Kiev, Naukova Dumka, 1987. – 272p.
6. Baranskii P.I., Klochkov V.P., Potykevych I.V., Semiconductors electronics, Kiev: Naukova Dumka Publishers, 1975, 704 p.
7. Baranskii P.I., Fedosov A.V., Gaidar G.P., Physical properties of Silicon and Germanium crystals in effective external fields, Lutsk, Nadsyria, 2000, 280p.
8. Baranskii P.I., Buda I.S., Kolomoets V.V., Samoilovich A.G., Suss B.A., Chernysh V.V., Phonon-phonon relaxation in presence of phonon drag phenomena in  $n-Ge$ . Phys.Techn.Semicond., – 1975. - 9. № 9. – p. 1580-1684.
9. Baranskii P.I., Buda I.S., Kolomoets V.V., Suss B.A., Chernysh V.V., Piezothermomagnetic counterpart of Grabner effect in  $n-Ge$ , Phys.Techn.Semicond., 1975, № 9, p. 1680-1684.
10. W. Fawcett , E.G.S. Paige Negative differential mobility of electrons in germanium ...J.Phys. C: Solid St. Phys., 1971, Vol.4. p 1801 -1821 .
11. K. Fletcher and C.D. Pitt, Intervalley scattering in n type Ge from a Hall effect experiment to high pressures, J. Phys. C: Solid State Phys., 1971, v.4, p.1822—1834.
12. Ahmad C., Adams A. and Pitt G. Temperature dependence of the electron mobility in the  $\Delta_{1c}$  minima of Germanium . J. Phys. C: Sol. State Phys., 1979, v.12, N 10, p L379 - L383
13. Baranskii P.I., Kolomoets V.V., Fedosov A.V. Piezoresistance occure in conditions of symmetrical direction of deformation axis in relation of all constant energy ellipsoids. Physics and Technics of Semiconductors 1979, v.13, N 10, p 815-819 (in Russian).
14. Baranskii P.I., Kolomoets V.V., Suss B.A., Shapovalov V.P. Some characteristics of energetic minima of  $\langle 100 \rangle$  type in n-Ge -Physics and Technics of Semiconductors, 1979, v.13, N 3, p 602-604 .
15. V.Chernysh , V.Burdeynyy , F.Tomo. Peculiarity of Piezoresistance in  $L_1-A_1$  Model of Germanium, Proceedings of SPIE , Vol.4425, pp. 362-368, 2001, USA.
16. Chernysh V.V., Tomo Felix, Burdeynyi V.M., Piezoresistance caused by electron transitions between L and delta minima of Germanium, South African Institute of Physics, 43<sup>rd</sup> Annual Conference, 7-10 July 1998, University of Cape Town, p.60.

17. Chernysh V.V., Burdeynyi V.M. Effective mass and deformation potentials in the delta minima of Germanium, South African Institute of Physics, 43<sup>rd</sup> Annual Conference, 7-10 July 1998, University of Cape Town, p.60.
18. Chernysh V.V., Burdeynyi V.M. & Nhanala J., Scattering of Electrons in  $L_1 - \Delta_1$  Model of Germanium under High Uniaxial Elastic Pressure along [001], Interscience 98, 5-7 October 1998, University of the North, Sovenga, South Africa; Program and Abstracts, p.82.
19. Tomo F., The investigation of piezoresistance caused by electrons redistribution between  $L_1$  and  $\Delta_1$  minima of germanium, Licentiate thesis, 1998, Maputo, UEM, Physics Department.
20. Nhanala J., The investigation of electrons scattering in  $L_1$  and  $\Delta_1$  minima of germanium, Licentiate thesis, 1999, Maputo, UEM, Physics Department.
21. Miguel N. A., Piezoresistance in  $L_1 - \Delta_1$  model of Germanium caused by isotropic pressure, Licentiate thesis, 2005, Maputo, UEM, Physics Department.
22. Kunhonha F., The investigations of electron distributions between  $L_1$  and  $\Delta_1$  valley of elastically deformed (100) germanium, Licentiate thesis, 2006, Maputo, UEM, Physics Department.
23. Herring C., Transport and deformation potential theory of many valley semiconductors with anisotropic scattering, Phys. Rev, 1956, v.101, N3, p.944 – 961.
24. Chernysh V.V., A.G.Samoilovich and investigations of transport phenomena in elastically deformed germanium, J. of Thermoelectricity, 2006, N3, p 14 – 24.
25. Chernysh V.V., Cuamba B.C., Thermo-emf in  $L_1 - \Delta_1$  model of Germanium, J. of Thermoelectricity, 2007, N3, p. .
26. Nye J.F., Physical properties of crystals, Oxford at the Clarendon press, 1964, 322p.
27. McSkimin J. and Andreatch P., Elastic Moduli of Germanium Versus Hydrostatic Pressure at 25.0° and – 195.8°C, J.Applied Phys., 1963, v 34, N3. p.651-655.

# Anexos

## Anexo I.

### Transição do referencial Cristalográfico para referencial Laboratorial.

As matrizes de cada vale no referencial ligado com o tensor de massa eficaz (referencial elipsoidal) determinam-se pela relação [19].

$$a_{Mj} = \tau_{jk} \cdot b_{Mk} \quad (1)$$

onde  $b_{Mk}$  é a matriz de transição de cada vale no referencial ligado com o tensor da massa eficaz para

o referencial cristalográfico,  $\tau_{jk}$  é a matriz de transição do referencial cristalográfico para o

referencial laboratorial e  $a_{Mj}$  é a matriz de transição do referencial ligado com os eixos principais ligados com o tensor da massa eficaz de cada vale para o referencial laboratorial.

Matriz de transição do referencial ligado com o tensor da massa eficaz de cada vale para o

referencial cristalográfico. As matrizes  $b_{Mk}$  foram calculados em [19]:

**Cálculo da matriz para  $L_1$  vale.**

A posição deste vale é definida de modo:

$$\vec{i}_3 // [111], \quad \vec{i}_2 // [110], \quad \vec{i}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}), \quad \vec{i}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{i} - \vec{j}) \quad (2)$$

Onde todos os vectores  $\vec{i}_2$ ,  $\vec{i}_3$  e  $\vec{i}_1$  formam uma base ortogonal por isso o primeiro vector normal é

obtido pelo produto vectorial entre  $\vec{i}_2$  e  $\vec{i}_3$ :

$$\vec{i}_1 = \left[ \vec{i}_2 \times \vec{i}_3 \right], \quad \vec{i}_1 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3)$$

Efectuando o desenvolvimento dos vectores da base antiga por nova obteremos:

$$\begin{aligned} \vec{i}_1 &= a_{11} \cdot \vec{i} + a_{12} \cdot \vec{j} + a_{13} \cdot \vec{k}, \\ \vec{j}_1 &= a_{21} \cdot \vec{i} + a_{22} \cdot \vec{j} + a_{23} \cdot \vec{k}, \\ \vec{k}_1 &= a_{31} \cdot \vec{i} + a_{32} \cdot \vec{j} + a_{33} \cdot \vec{k}. \end{aligned} \quad (4)$$



Os elementos da matriz de transição do referencial cristalográfico para o referencial elipsoidal para o  $L_1$  vale, são calculadas de modo:

$$\begin{aligned}
 a_{11} &= (\vec{i} \cdot \vec{i}_1) = -\frac{1}{\sqrt{6}} & a_{31} &= (\vec{k} \cdot \vec{i}_1) = \frac{2}{\sqrt{6}} & a_{22} &= (\vec{j} \cdot \vec{i}_2) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \\
 a_{21} &= (\vec{j} \cdot \vec{i}_1) = -\frac{1}{\sqrt{6}} & a_{12} &= (\vec{i} \cdot \vec{i}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}} & a_{23} &= (\vec{k} \cdot \vec{i}_2) = 0 \\
 a_{13} &= (\vec{i} \cdot \vec{i}_3) = \frac{1}{\sqrt{3}} & & & & \\
 a_{23} &= (\vec{j} \cdot \vec{i}_3) = \frac{1}{\sqrt{3}} & a_{33} &= (\vec{k} \cdot \vec{i}_3) = \frac{1}{\sqrt{3}} & & 
 \end{aligned} \tag{5}$$

As matrizes de passagem e a transposta para o primeiro  $L_1$ -vale são:

$$b_k^{(L_1)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad b_u^{(L_1)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \tag{6}$$

Realizando cálculos semelhantes obteremos para as restantes elipsóides:

$L_1$ -vales,

$$b_u^{(L_2)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad b_u^{(L_3)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad b_u^{(L_4)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \tag{7}$$

$$b_u^{(L_5)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad b_u^{(L_6)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad b_u^{(L_7)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \tag{8}$$

$\Delta_1$ -vales:

$$b_M^{1,2(\Delta_1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad b_M^{2,1(\Delta_1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad b_M^{3,4(\Delta_1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$b_M^{4,3(\Delta_1)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad b_M^{5,6(\Delta_1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad b_M^{6,5(\Delta_1)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

Matrizes de transição do referencial cristalográfico para laboratorial.

Neste caso o esforço deformador uniaxial está orientado arbitrariamente no plano  $(1\bar{1}0)$  e a tensão

deformadora  $P$  dirigido ao longo do eixo  $\vec{l}$  do referencial laboratorial que é desviado do referencial cristalográfico por um ângulo  $\beta$  fig. 25

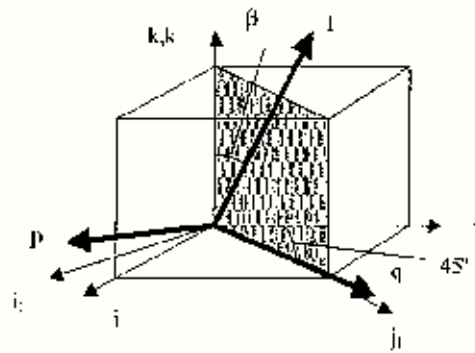


Fig. 25

A passagem do referencial cristalográfico de  $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$  para o referencial  $(\vec{p}, \vec{q}, \vec{l})$ , primeiro temos que rodar o sistema em relação ao eixo  $-X$ , por um ângulo arbitrário  $\beta$  depois desenvolver os vectores da nova base  $(\vec{p}, \vec{q}, \vec{l})$  por vectores da base antiga  $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$  de modo:

$$\begin{aligned}\vec{p} &= a_{11} \cdot \vec{i} + a_{12} \cdot \vec{j} + a_{13} \cdot \vec{k}, \\ \vec{q} &= a_{21} \cdot \vec{i} + a_{22} \cdot \vec{j} + a_{23} \cdot \vec{k}, \\ \vec{l} &= a_{31} \cdot \vec{i} + a_{32} \cdot \vec{j} + a_{33} \cdot \vec{k}.\end{aligned}\tag{10}$$

A matriz de transição correspondente é dado por:

$$\hat{\alpha}_{ij} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}.\tag{11}$$

Para encontrarmos os elementos desta matriz temos que multiplicar escalarmente os vectores  $(\vec{p}, \vec{q}, \vec{l})$

por  $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ :

$$\begin{aligned}a_{11} &= (\vec{i} \cdot \vec{p}) = 1 & a_{12} &= (\vec{j} \cdot \vec{p}) = 0 & a_{13} &= (\vec{k} \cdot \vec{p}) = 0 \\ a_{21} &= (\vec{i} \cdot \vec{q}) = 0 & a_{22} &= (\vec{j} \cdot \vec{q}) = \cos \beta & a_{23} &= (\vec{k} \cdot \vec{q}) = \sin \beta \\ a_{31} &= (\vec{i} \cdot \vec{l}) = 0 & a_{32} &= (\vec{j} \cdot \vec{l}) = \cos(\beta - \frac{\pi}{2}) = \sin \beta & a_{33} &= (\vec{k} \cdot \vec{l}) = \cos \beta \\ a_{21} &= (\vec{i} \cdot \vec{q}) = 0 & a_{32} &= (\vec{k} \cdot \vec{q}) = \cos(\beta + \frac{\pi}{2}) = -\sin \beta\end{aligned}\tag{12}$$

Substituindo estes resultados na matriz dada obtém-se a matriz de transição da base  $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$  para a base

$(\vec{p}, \vec{q}, \vec{l})$  dada de modo:

$$\hat{\alpha}_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \beta & -\sin \beta \\ 0 & \sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix}.\tag{13}$$

Levando em conta a direcção dos planos  $(\bar{1}\bar{1}0)$ , por onde está dirigido o esforço deformador temos que fazer uma nova passagem do referencial cristalográfico para o referencial ligado com os planos  $(\bar{1}\bar{1}0)$ .

Deste modo é preciso desenvolver os vectores  $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$  por vectores dum referencial  $(\vec{i}_1, \vec{j}_1, \vec{k}_1)$

ligados com os planos na direcção no novo referencial de modo:

$$\begin{aligned}\vec{i}_1 &= b_{11} \cdot \vec{i} + b_{12} \cdot \vec{j} + b_{13} \cdot \vec{k} \quad , \\ \vec{j}_1 &= b_{21} \cdot \vec{i} + b_{22} \cdot \vec{j} + b_{23} \cdot \vec{k} \quad , \\ \vec{k}_1 &= b_{31} \cdot \vec{i} + b_{32} \cdot \vec{j} + b_{33} \cdot \vec{k}\end{aligned}\quad (14)$$

A matriz correspondente é dado por:

$$\alpha_{jk} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix} . \quad (15)$$

Para encontrar está base  $(\vec{i}_1, \vec{j}_1, \vec{k}_1)$ , temos que rodar o sistema ligado com os vectores  $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$  por um ângulo  $\delta$  igual a  $45^\circ$  em relação ao eixo Z. Realizando os cálculos obteremos os seguintes elementos para a matriz de transição correspondente:

$$\begin{aligned}b_{11} &= (\vec{i}_1 \cdot \vec{i}) = \cos\delta & b_{13} &= (\vec{k}_1 \cdot \vec{i}) = 0 \\ b_{12} &= (\vec{j}_1 \cdot \vec{i}) = \cos(\delta + \frac{\pi}{2}) = -\text{sen}\delta & b_{21} &= (\vec{i}_1 \cdot \vec{j}_1) = \cos(\delta - \frac{\pi}{2}) = \text{sen}\delta \\ b_{31} &= (\vec{i}_1 \cdot \vec{k}_1) = 0 & b_{32} &= (\vec{j}_1 \cdot \vec{j}_1) = \cos\delta & b_{33} &= (\vec{k}_1 \cdot \vec{k}_1) = 1 \\ b_{32} &= (\vec{j}_1 \cdot \vec{k}_1) = 0 & b_{23} &= (\vec{k}_1 \cdot \vec{j}_1) = 0\end{aligned}\quad (16)$$

A matriz que corresponde a transição do referencial cristalográfico para um referencial ligados com os planos na direcção  $(\bar{1}\bar{1}0)$  é dado por:

$$\alpha_{jk} = \begin{pmatrix} \cos\delta & -\text{sen}\delta & 0 \\ \text{sen}\delta & \cos\delta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} . \quad (17)$$

Para obter a matriz de transição do referencial cristalográfico para laboratorial este que correspondente a rotação do sistema por um ângulo arbitrário  $\beta$  na direcção dos planos  $(110)$  temos que multiplicar a matriz  $\alpha_{ij}$  por  $u_{jk}$ :

$$\alpha_{ij} \cdot \alpha_{jk} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \beta & -\text{sen} \beta \\ 0 & \text{sen} \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \delta & -\text{sen} \delta & 0 \\ \text{sen} \delta & \cos \delta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (18)$$

realizando os cálculos simples não é difícil obter:

$$\tau_{ik} = \begin{pmatrix} \cos \delta & -\text{sen} \delta & 0 \\ \text{sen} \cdot \cos \beta & \cos \delta \cdot \cos \beta & -\text{sen} \beta \\ \text{sen} \delta \cdot \text{sen} \beta & \cos \delta \cdot \text{sen} \beta & \cos \beta \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Substituindo o valor de ângulo  $\delta = 45^\circ$ :

$$\tau_{ik} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \cos \beta & \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \cos \beta & -\text{sen} \beta \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \text{sen} \beta & \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \text{sen} \beta & \cos \beta \end{pmatrix}. \quad (20)$$

### Transição do referencial laboratorial para elipsoidal

As matrizes de transição do referencial ligado com os eixos principais do tensor das massas eficazes dos  $L_1$ -vales e  $\Delta_1$ -vales (referencial elipsoidal) para o referencial laboratorial são obtidas pela seguinte relação:

$$a_{ij} = \tau_{ik} \cdot b_{kj}, \quad (21)$$

$$a_{ij}^{(1)M_1} = \begin{pmatrix} \cos \delta & -\operatorname{sen} \delta & 0 \\ \operatorname{sen} \delta \cdot \cos \beta & \cos \delta \cdot \cos \beta & -\operatorname{sen} \beta \\ \operatorname{sen} \delta \cdot \operatorname{sen} \beta & \cos \delta \cdot \operatorname{sen} \beta & \cos \beta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad (22)$$

Substituindo o valor de  $\delta = 45^\circ$  e realizando a multiplicação das matrizes ficamos com:

$$a_{ij}^{L_1(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}(\cos \beta + \sqrt{2} \cdot \operatorname{sen} \beta) & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2} \cdot \cos \beta - \operatorname{sen} \beta) \\ \frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2} \cdot \cos \beta - \operatorname{sen} \beta) & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}(\cos \beta + \sqrt{2} \cdot \operatorname{sen} \beta) \end{pmatrix} \quad (23)$$

$L_1$ -vales.

$$\bar{a}_{ij}^{L_1(1)} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(\cos \beta + \sqrt{2} \cdot \operatorname{sen} \beta) & \frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2} \cos \beta - \operatorname{sen} \beta) \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2} \cdot \cos \beta - \operatorname{sen} \beta) & \frac{1}{\sqrt{3}}(\cos \beta - \sqrt{2} \cdot \operatorname{sen} \beta) \end{pmatrix} \quad (24)$$

Realizando cálculos semelhantes obteremos as seguintes matrizes para os restantes elipsóides:

$$a_{ij}^{(2)M_1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \cdot \operatorname{sen} \beta & -\cos \beta & -\frac{1}{\sqrt{3}} \operatorname{sen} \beta \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \cdot \cos \beta & -\operatorname{sen} \beta & \frac{1}{\sqrt{3}} \cos \beta \end{pmatrix} \quad \bar{a}_{ij}^{(2)M_1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \operatorname{sen} \beta & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \cos \beta \\ 0 & -\cos \beta & -\operatorname{sen} \beta \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \operatorname{sen} \beta & \frac{1}{\sqrt{3}} \cos \beta \end{pmatrix} \quad (25)$$

$$a_{ij}^{(3)M_1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}}(\cos \beta - \sqrt{2} \cdot \operatorname{sen} \beta) & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2} \cdot \cos \beta + \operatorname{sen} \beta) \\ \frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2} \cdot \cos \beta + \operatorname{sen} \beta) & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}(\cos \beta - \sqrt{2} \cdot \operatorname{sen} \beta) \end{pmatrix} \quad (26)$$

$$\tilde{a}_i^{(2)\Delta_1} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{3}}(\cos\beta - \sqrt{2}\text{sen}\beta) & \frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2}\cos\beta + \text{sen}\beta) \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2}\cos\beta + \text{sen}\beta) & \frac{1}{\sqrt{3}}(\cos\beta - \sqrt{2}\text{sen}\beta) \end{pmatrix} \quad (27)$$

$$a_i^{(4)\Delta_1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}\text{sen}\beta & \cos\beta & -\frac{1}{\sqrt{3}}\text{sen}\beta \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}\cos\beta & \text{sen}\beta & \frac{1}{\sqrt{3}}\cos\beta \end{pmatrix} \quad \tilde{a}_i^{(4)\Delta_1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}\text{sen}\beta & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}\cos\beta \\ 0 & \cos\beta & \text{sen}\beta \\ -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}}\text{sen}\beta & \frac{1}{\sqrt{3}}\cos\beta \end{pmatrix} \quad (28)$$

$\Lambda_1$ -vales:

$$a_i^{(1,2)\Delta_1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\beta & -\text{sen}\beta \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sen}\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sen}\beta & \cos\beta \end{pmatrix} \quad \tilde{a}_i^{(1,2)\Delta_1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sen}\beta \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sen}\beta \\ 0 & -\text{sen}\beta & \text{sen}\beta \end{pmatrix} \quad (29)$$

$$a_i^{(4,3)\Delta_1} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\text{sen}\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\beta \\ \cos\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sen}\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sen}\beta \end{pmatrix} \quad \tilde{a}_i^{(4,3)\Delta_1} = \begin{pmatrix} 0 & -\text{sen}\beta & \cos\beta \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sen}\beta \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sen}\beta \end{pmatrix} \quad (30)$$

$$a_i^{(5,3)\Delta_1} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\beta & -\text{sen}\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\beta \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sen}\beta & \cos\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sen}\beta \end{pmatrix} \quad \tilde{a}_i^{(5,3)\Delta_1} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sen}\beta \\ 0 & -\text{sen}\beta & \cos\beta \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\beta & \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sen}\beta \end{pmatrix} \quad (31)$$

## Anexo 2.

```
Temperatura de T=78K
program fisica;
uses crt;
const
S11=9.378E-7; S12=-2.562E-7; C1L=-6.4 ; S44=14.342E-7; C2L=16.4;
C1s=0.1;
C2s=12.0; T=78; dEk=2087; m3T=1.58; m1L=0.082; m3s=0.9; m1s=C.192;
n0=9.1E-28;
k=8.625E-5; Kc=1.38E-16; pi=3.14159;

Var
Ei1,Ei24,Ei3,Ek12,Ek34,P,n1L,n2L,n3L,n12s,n34s,dEk1,B,
Ei1r,Ei24r,Ei3r,Ek12r,Ek34r,mnL,mnS,soma:real;
i,j:integer;

Begin
clrscr;
Writeln('Potencias de deformação e números de preenchimento');
Writeln('B=',B);
Writeln('T=',T);
B:=0.0;
for i:=1 to 3 do

Begin
P:=0.0;
for j:=1 to 6 do
Begin
dEk1:=-dEk/T;
Writeln('B=',B,' ', 'P=',P:2);

Ei1:=( (S11+2*S12) * (C1L+C2L/3) + (2/3) * C2L * (2*sqrt(2) * Sin(B) * Cos(B) +
Sin(B) * Sin(B)) * S44) * P;
Ei1r:=Ei1 / (k*T);

Ei24:=( (S11+2*S12) * (C1L+C2L/3) -
(2/3) * C2L * Sin(B) * Sin(B) * S44) * P;
Ei24r:=Ei24 / (k*T);

Ei3:-( (S11+2*S12) * (C1L+C2L/3) + (2/3) * C2L * (-2*sqrt(2) * Sin(B) *
Cos(B) + Sin(B) * Sin(B)) * S44) * P;
Ei3r:=Ei3 / (k*T);

Ek12:=( (S11-2*S12) * C1s + C2s * (Cos(B) * cos(B) * S11 +
Sin(B) * Sin(B) * S12) ) * P;
Ek12r:=Ek12 / (k*T);
```



```

EK34:=(S11+2*S12)*C1s+(1/2)*C2s*(Sin(B)*Sin(B)*S11+
(1+Cos(B)*Cos(B))*S12))*F;
Ek34r:=Ek34/(k*T);

Writeln('Ei1',' ', 'Ei24',' ', 'Ei3',' ',
', 'Ek12',' ', 'Ek34');
Writeln(Ei1:2,' ', 'Ei24:2',' ', 'Ei3:2',' ', 'Ek12:2','
',Ek34:2);
Writeln('Ei1r',' ', 'Ei24r',' ', 'Ei3r',' ',
', 'Ek12r',' ', 'Ek34r');
Writeln(Ei1r:2,' ', 'Ei24r:2',' ', 'Ei3r:2',' ', 'Ek12r:2','
',Ek34r:2);
mrL:=exp(ln(sqr(m11)*m31)/3);
mrS:=exp(ln(sqr(m1s)*m3s)/3);

n1L:=1/(1+2*exp(Ei1r-Ei24r)+exp(Ei1r-
Ei3r)+2*exp(3*ln(mns/mnL)/2)*
exp(Ei1r-dEk1)*(exp(-Ek12r)+2*exp(-Ek34r)));

n2L:=1/(exp(Ei24r-Ei1r)+2*exp(Ei24r-
Ei3r)+2*exp(3*ln(mns/mnL)/2)*
exp(Ei24r-dEk1)*(exp(-Ek12r)+2*exp(-Ek34r)));

n3L:=1/(exp(Ei3r-Ei1r)+2*exp(Ei3r-
Ei24r)+1+2*exp(3*ln(mns/mnL)/2)*
(exp(Ei3r-dEk1)*(exp(-Ek12r)+2*exp(-Ek34r))));

n12s:=1/(exp(3*ln(mnL/mns)/2)*exp(Ek12r+dEk1)*(exp(-Ei1r)+
2*exp(-Ei24r)+exp(-Ei3r))+2+4*exp(Ek12r-Ek34r));

n34s:=1/(exp(3*ln(mnL/mns)/2)*exp(Ek34r+dEk1)*(exp(-Ei1r)+
2*exp(-Ei24r)+exp(-Ei3r))+4+2*exp(Ek34r-Ek12r));

Writeln('n1L',' ', 'n2L',' ', 'n3L',' ',
', 'n12s',' ', 'n34s');
Writeln(n1L:2,' ', 'n2L:2',' ', 'n3L:2',' ', 'n12s:2',' ', 'n34s:2);
soma:=n1L+2*n2L+n3L+2*n12s+4*n34s;
Writeln('soma=',soma:20);

P:=-5000.0*j;
end;
B:-i*pi/180;

readln;
end;

```

```
end.  
End;
```

Temperatura de T=293K

```
program fisica;  
uses crt;  
const  
  s1= 9.5531000000E-07  s12=-2.6030000000E-07  s44= 1.4615000000E-06  
  C2L=16.4;  C1s=0.1;  
  C2s=12.0;  T=293;  dEk=2087;  m3L=1.58;  m1L=C.082;  m2s=0.9;  m1s=C.192;  
  m0=9.1E-28;  
  k=8.625E-5;  Ko=1.38E-16;  pi=3.14159;  
  
Var  
  E1, Ei24, Ei3, Ek12, Ek34, P, r1L, n2L, n3L, n12s, n34s, dEk1, B,  
  E11r, Ei24r, E13r, Ek12r, Ek34r, m1L, m2s, soma:real;  
  i, j:integer;  
  
Begin  
  clrscr;  
  WriteIn('Potencias de deformação e números de preenchimento');  
  WriteIn('B=', B);  
  WriteIn('T=', T);  
  B:=0.0;  
  for i:=1 to 9 do  
    Begin  
      P:=0.0;  
      for j:=1 to 6 do  
        Begin  
          dEk1:=dEk/T;  
          WriteIn('B=', B, ' ', 'P=', P:2);
```

```
          E1i:=( (S11+2*S12)*(C1L+C2L/3)+(2/3)*C2L*(2*sqrt(2)*sin(B)*Cos(B)+  
            Sin(B)*Sin(B))*S44)*P;  
          E11r:=E1i/(k*T);  
  
          E124:=( (S11+2*S12)*(C1L+C2L/3)-  
            (2/3)*C2L*Sin(B)*Sin(B)*S44)*P;  
          Ei24r:=E124/(k*T);  
  
          E13:=( (S11+2*S12)*(C1L-C2L/3)+(2/3)*C2L*(-2*sqrt(2)*Sin(B)*  
            Cos(B)- Sin(B)*Sin(B))*S44)*P;
```

```

Ei3r:=Ei3/(k*T);

EK12:-((S11+2*S12)*C1s-C2s*(Cos(B)*cos(E)*S11+
Sin(B)*Sin(B)*S12))*P;
Ek12r:=Ek12/(k*T);

EK34:-((S11+2*S12)*C1s-(1/2)*C2s*(Sin(B)*Sin(B)*S11+
(1+Cos(B)*Cos(B))*S12))*P;
Ek34r:=Ek34/(k*T);

Writeln('Ei1','          ','Ei24','          ','Ei3','
','Ek12','          ','Ek34');
Writeln(Ei1:2,'          ',Ei24:2,'          ',Ei3:2,'          ',Ek12:2,'
',Ek34:2);
Writeln('Ei1r','          ','Ei24r','          ','Ei3r','
','Ek12r','          ','Ek34r');
Writeln(Ei1r:2,'          ',Ei24r:2,'          ',Ei3r:2,'          ',Ek12r:2,'
',Ek34r:2);
mnL:=exp(ln(sqr(m1L)*m3L)/3);
mns:=exp(ln(sqr(m1s)*m3s)/3);

n1L:=1/(1+2*exp(Ei1r-Ei24r)+exp(Ei1r-
Ei3r)+2*exp(3*ln(mns/mnL)/2)*
exp(Ei1r-dEk1)*(exp(-Ek12r)+2*exp(-Ek34r)));

n2L:=1/(exp(Ei24r-Ei1r)+2+exp(Ei24r-
Ei3r)+2*exp(3*ln(mns/mnL)/2)*
exp(Ei24r-dEk1)*(exp(-Ek12r)+2*exp(-Ek34r)));

n3L:=1/(exp(Ei3r-Ei1r)+2*exp(Ei3r-
Ei24r)+1+2*exp(3*ln(mns/mnL)/2)*
(exp(Ei3r-dEk1)*(exp(-Ek12r)+2*exp(-Ek34r))));

n12s:=1/(exp(3*ln(mnL/mns)/2)*exp(Ek12r+dEk1)*(exp(-Ei1r)+
2*exp(-Ei24r)+exp(-Ei3r))+2+4*exp(Ek12r-Ek34r));

n34s:=1/(exp(3*ln(mnL/mns)/2)*exp(Ek34r+dEk1)*(exp(-Ei1r)+
2*exp(-Ei24r)+exp(-Ei3r))+4+2*exp(Ek34r-Ek12r));

Writeln('n1L','          ','n2L','          ','n3L','
','n12s','          ','n34s');
Writeln(n1L:2,'          ',n2L:2,'          ',n3L:2,'          ',n12s:2,'          ',n34s:2);
soma:=n1L+2*n2L+n3L-2*n12s+4*n34s;
Writeln('soma=',soma:20);

P:=-5000.0*j;

```

```

end;
  B:=i*pi/180;

  reacin;
end;
end.
End;

```

Potencias de deformação e números de preenchimento

Pressão F(110)

B= 0 S11= 9.3700000000E-07 S12=-2.5620000000E-07 S11= 1.4342000000E-06

α1s= 1.9200000000E-01 n3s= 9.0000000000E 01

T=78 C1s= 1.0000000000E-01 C2s= 1.2000000000E+01

E11 E124 E13 Ek12 Ek34 n1L n2L n3L n12s n34s soms

B= 0.0000000000E+00

P= 0.000E+00

0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.250 0.250 0.250 0.000 0.000 1.000

P=-5.000E+03

0.002 0.002 0.002 -0.056 0.015 0.250 0.250 0.250 0.000 0.000 1.000

P=-1.000E+04

0.004 0.004 0.004 -0.113 0.030 0.250 0.250 0.250 0.000 0.000 1.000

P=-1.500E+04

0.006 0.006 0.006 -0.169 0.045 0.173 0.173 0.173 0.154 0.000 1.000

P=-2.000E+04

0.008 0.008 0.008 -0.226 0.061 0.000 0.000 0.000 0.500 0.000 1.000

P=-2.500E+04

0.010 0.010 0.010 -0.292 0.076 0.000 0.000 0.000 0.500 0.000 1.000

P=-3.000E+04

0.012 0.012 0.012 -0.339 0.091 0.000 0.000 0.000 0.500 0.000 1.000

B= 8.7255388889E-02

P= 0.000E+00

0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.250 0.250 0.250 0.000 0.000 1.000

P=-5.000E+03

-0.010 0.003 0.021 -0.056 0.015 0.910 0.044 0.003 0.000 0.000 1.000

P=-1.000E-04

-0.036 0.005 0.041 -0.112 0.030 0.995 0.002 0.000 0.000 0.000 1.000

P=-1.500E+04

-0.054 0.008 0.062 -0.168 0.045 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000

P=-2.000E+04

-0.071 0.010 0.083 -0.224 0.060 0.946 0.000 0.000 0.027 0.000 1.000

P=-2.500E+04

-0.089 0.013 0.103 -0.230 0.074 0.057 0.000 0.000 0.471 0.000 1.000

P=-3.000E+04

-0.107 0.015 0.124 -0.336 0.099 0.000 0.000 0.000 0.500 0.000 1.000

B= 1.7453277779E-01  
P= 0.000E+00  
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.250 0.250 0.250 0.000 0.000 1.000  
P=-5.000E+03  
-0.338 0.004 0.039 -0.054 0.014 0.996 0.002 0.000 0.000 0.000 1.000  
P=-1.000E+04  
-0.077 0.009 0.075 -0.109 0.028 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000  
P=-1.500E+04  
-0.115 0.013 0.113 -0.163 0.042 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000  
P=-2.000E+04  
-0.153 0.017 0.150 -0.217 0.056 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000  
P=-2.500E+04  
-0.192 0.022 0.186 -0.272 0.070 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000  
P=-3.000E+04  
-0.230 0.026 0.225 -0.326 0.084 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000  
1.000

Potências de deformação e números de preenchimento

Pressão P(110)

B= 0 S11= 9.5530000000E-07 S12=-2.6030000000E-07 S44= 1.4615000000E-06

m1s= 1.9200000000E-01 m3s= 9.0000000000E-01

T=293 C1s= 5.3000000000E-01 C2s= 1.0400000000E+01

E11 E12 E13 Ek12 Ek34 nu n2L n3L n12s n34s soma

B= 9.5531581125E-01  
P= 0.000E+00  
0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.249 0.249 0.249 0.000 0.000 1.000  
P=-5.000E+03  
0.158 0.055 0.055 -0.009 -0.009 0.999 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000  
P=-1.000E+04  
-0.316 0.111 0.111 -0.017 -0.017 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000  
P=-1.500E+04  
0.473 0.166 0.166 -0.026 -0.026 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000  
P=-2.000E+04  
-0.631 0.221 0.221 -0.035 -0.035 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000  
P=-2.500E+04  
-0.789 0.275 0.275 -0.043 -0.043 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000  
P=-3.000E+04  
-0.947 0.332 0.332 -0.052 -0.052 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000

B= 8.7266388889E-02

P= 0.000E+00

0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.250 0.250 0.250 0.000 0.000 1.000

P=-5.000E+03

-0.018 0.003 0.021 -0.056 0.015 0.916 0.044 0.003 0.000 0.000 1.000

P=-1.000E+04

-0.036 0.005 0.041 -0.112 0.030 0.995 0.002 0.000 0.000 0.000 1.000

P=-1.500E+04

-0.054 0.008 0.062 -0.168 0.045 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000

P=-2.000E+04

-0.071 0.010 0.083 -0.224 0.060 0.947 0.060 0.000 0.026 0.000 1.000

P=-2.500E+04

0.089 0.013 0.103 -0.280 0.074 0.053 0.000 0.000 0.470 0.000 1.000

P=-3.000E+04

-0.107 0.015 0.124 -0.336 0.085 0.000 0.000 0.500 0.000 0.000 1.000

```
B= 1.7453277778E-01
P= 0.000E+00
 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.250 0.250 0.250 0.000 0.000 1.000
P=-5.000E+03
-0.038 0.004 0.038 -0.054 0.014 0.996 0.002 0.000 0.000 0.000 1.000
P=-1.000E+04
-0.077 0.009 0.075 -0.109 0.028 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000
P=-1.500E+04
-0.115 0.013 0.113 -0.163 0.042 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000
P=-2.000E+04
-0.153 0.017 0.150 -0.217 0.056 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000
P=-2.500E+04
-0.192 0.022 0.188 -0.272 0.070 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000
P=-3.000E+04
-0.230 0.026 0.225 -0.326 0.084 1.000 0.000 0.000 0.000 0.000 1.000
```

