



FIS. 41

UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE
FACULDADE DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

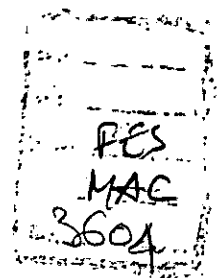
TRABALHO DE LICENCIATURA

**Estrutura do Espectro dos Portadores em Filmes de Superfícies
Congruentes**

AUTOR:

ALBERTO JULIÃO MACAMO

MAPUTO, ABRIL DE 1999





UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE
FACULDADE DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TRABALHO DE LICENCIATURA

**Estrutura de Espectro dos Portadores em Filmes de Superfícies
Congruentes**

SUPERVISOR:

PROF. DOUTOR VOLODYMYR BURDEYNYI

MAPUTO, ABRIL DE 1999

A memória de Julião Mudanisse Macamo, o amável pai,
a dona Marta Chaúque, a mãezinha, à memória da Zaida Lucas,
à Lina Rafael Langa
e aos meus filhos, Belton e Ulnisse.

Agradecimentos

Este trabalho é resultado do apoio que me foi prestado, por aqueles que acreditaram na minha formação. Pelo que agradeço:

Ao Prof. Doutor Burdeynny V.M., meu supervisor, pelo incansável apoio, inestimáveis pontos de vista e pela elevada paciência que teve ao longo da realização deste trabalho.

À direcção do Departamento de Física, nas pessoas do dr. Hermínio Tembe e da dr^a Mayra Hernandez de Sousa, pela elevada flexibilidade no desbloqueamento de todos aspectos burocráticos.

À todos os meus docentes, particularmente ao Prof. Doutor Tchernych V.V., ao Prof. Doutor Yuri Rakov, ao Prof. Doutor Rogério Utui, ao Prof. Doutor Boaventura Cuamba, pela maneira simples e coerente de estar na ciência.

Aos meus colegas do curso, especialmente ao Humberto Mutevuie, Félix Tomo, João Lobo, Faustino Nhanombe, Rego, pelo apoio que me prestaram ao longo do curso.

Ao dr. Saíde, dr. Genito, dr. Amino, dr. Sacate, pelos valiosos pontos de vista e opiniões que me concederam.

A todo o pessoal do Capacity Building Project (CBP), em particular ao senhor Luis de Carvalho, pela possibilidade de divulgação e da publicação dos resultados obtidos na conferência do SAIP-98.

Aos meus amigos dr Tiago, Alfredo, Germano, Cossa, Hilário Cossa, Emilia Jossai, Naima Saú, Vaniza, Marta Gracinda e as minhas irmãs, pela ajuda que sempre me concederam.

Aos membros do CTA do Departamento de Física, em particular ao sr. Santos Luis Victorino, sr. Joaquim Namburete, sr. Cossa, sr. Simões Mbuluco, sr. Jorge, dona Rosa Nhambe e dona Etelvina, pelo apoio concedido ao longo do curso.

DECLARAÇÃO DE HONRA

Este trabalho foi completamente realizado com base no material, a que ao longo do mesmo se faz referência. As ideias originais nele expressas são de inteira responsabilidade do autor.

Maputo, Abril de 1999

O autor

Alberto Julião Macamo
(Alberto Julião Macamo)

RESUMO

O objectivo deste trabalho é investigar a estrutura do espectro electrónico dum modelo de filmes de superfícies congruentes (FSC) uniforme ao longo do eixo-y.

Foram feitas pesquisas bibliográficas, referentes à quantificação dimensional (QD); classificação dos filmes; método geral de investigação de filmes de espessura variável e possibilidades tecnológicas.

Efectua-se a dedução e resolução da equação secular e discussão dos métodos de aproximação.

Usa-se a teoria geral de resolução de equação diferencial com coeficientes periódicos e a teoria de perturbação.

Os resultados dos cálculos numéricos da equação secular (parte esquerda desta equação), estão em concordância com a função de onda. Estes resultados são também confirmados de acordo com o método de aproximação de ordem zero.

ÍNDICE.

| | | |
|-----|---|-----------|
| 1. | INTRODUÇÃO..... | 3 |
| 2. | QUANTIFICAÇÃO DIMENSIONAL E CLASSIFICAÇÃO DOS FILMES..... | 5 |
| | 1. <i>Conceitos Básicos da Teoria de Quantificação Dimensional.....</i> | <i>5</i> |
| | 2. <i>Classificação dos Filmes.....</i> | <i>9</i> |
| 3. | FILME DE ESPESSURA VARIÁVEL E APROXIMAÇÃO ADIABÁTICA..... | 10 |
| | 1. <i>Conceitos Básicos de Filmes de Espessuras Variáveis.....</i> | <i>10</i> |
| | 2. <i>Filme de fronteiras arbitrárias.....</i> | <i>10</i> |
| 4. | FILME DE SUPERFÍCIES CONGRUENTES..... | 13 |
| | 1. <i>Escolha do Modelo Teórico.....</i> | <i>13</i> |
| | 2. <i>Discussão do Modelo Escolhido.....</i> | <i>18</i> |
| 5. | DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO SECULAR..... | 19 |
| 6. | SOLUÇÕES APROXIMADAS DA EQUAÇÃO SECULAR..... | 23 |
| 7. | DISCUSSÃO DOS RESULTADOS..... | 35 |
| 8. | CONCLUSÃO..... | 38 |
| 9. | RECOMENDAÇÕES..... | 39 |
| 10. | REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS..... | 40 |
| 11. | ANEXOS..... | 42 |
| | 1. <i>Anexo₁.....</i> | <i>43</i> |
| | 2. <i>Anexo₂.....</i> | <i>48</i> |
| | 3. <i>Anexo₃.....</i> | <i>51</i> |
| | 4. <i>Anexo₄.....</i> | <i>52</i> |

1. Introdução

As primeiras investigações sistemáticas dos filmes, isto é, os objectos, um de três tamanhos lineares, dos quais fosse muitas vezes menor que dois tamanhos restantes, foram empreendidas segundo as fontes bibliográficas [1] e por J. W. Gibbs [2] que avançando com um dos métodos desenvolvidos por seus esforços, estudou em particular as propriedades Termodinâmicas de tensão superficial. No entanto, o progresso essencial em entendimento das propriedades dos filmes foi conseguido graças as pesquisas cumpridas por Devisson e Germer. Além demais estas propriedades foram aprofundadas por vários autores tais como; Scheibken e Hartmann [3]. Devisson e Germer elaboraram o método de difracção dos electrões lentos (electrões de energia (20 – 500) eV) que permite investigar a estrutura atômica dos filmes e por intermédio das amplitudes de espalhamento estabelecer a distribuição de carga eléctrica dentro dum filme. A essa época também se referem as famosas obras de Langmuir, quem investigou os problemas dos filmes monoatômicos formados por via de absorção. Conforme a monografia[4], Langmuir e sua colaboradora Katherine Blodgett foram os primeiros a mostrarem claramente a diferença fundamental entre os filmes e sólidos tridimensionais e introduziram o conceito de “mundo bidimensional” referindo-se aos filmes.

Entretanto, até aos anos 50 a investigação dos filmes ainda não tinha atingido o nível de completabilidade que nessa altura fora peculiar a Física dos sólidos cristalinos, embora as ideias básicas de Mecânica Quântica e Física Estatística demonstraram todas as suas possibilidades. Este estado das coisas explica-se de uma forma bastante simples, pois, os principais esforços foram dirigidos para estudar metais e semicondutores de estrutura e simetria cristalina, bem conhecidas isto é, os sólidos em relação aos quais já foram elaborados os métodos teóricos e experimentais que permitem apresentar o quadro quantitativo dos fenómenos ópticos, cinéticos, magnéticos, etc. Para além disso, o mais importante é que nessa época se revelou e aprofundou-se a tendência de substituir o equipamento vácuo-electrónico por dispositivos de semicondutores. Exactamente esta revolução com base elementar da electrónica criou o impulso potente para desenvolver as pesquisas relacionadas com a Física dos cristais. Quanto aos filmes foi comparavelmente estreita a base das suas aplicações práticas, não existiam as tecnologias bem controladas e reproduzíveis que permitissem fabricar filmes com os parâmetros exigidos. A situação acima esboçada mudou radicalmente no início dos anos 70 quando se levantou o problema de aumentar a velocidade de elaboração de informação bem como a densidade do fluxo de informação. Um dos caminhos

possíveis de resolver este problema foi a passagem para a tecnologia de película que pudesse aumentar a densidade dos elementos básicos e criar os dispositivos microelectrónicos de nova geração.

Por isso mesmo foram elaborados vários métodos bastantes sofisticados, tais como: epitaxia de feixe molecular de fabricar filmes com os parâmetros definitivos. Por sua vez a necessidade de desenvolver uma tecnologia mais avançada fez aprofundar as investigações das propriedades fundamentais dos filmes, tais como espectro energético, fenómenos de transporte, transições de fase, efeitos colectivos. Desde então, atingiu-se um progresso extraordinário no entendimento e interpretação das propriedades físicas dos filmes e foi criada uma base sólida para as suas aplicações práticas. Os pormenores deste movimento avançado e os resultados concretos são apresentados em várias revistas[5-9] e monografias[4,10].

Segundo Coutts T.J. e Meakin J.D.[11], a área de perspectiva, onde os filmes podem ser efectivamente aplicados é relacionado com a transformação directa de energia solar em energia eléctrica que se baseia no uso dos efeitos fotovoltaicos. A partir dos anos 80 certo nível de produção industrial adquiriu vários tipos das fotocélulas cujo elemento básico é a película de semiconductor. No entanto, as fotocélulas mesmo aquelas que têm os valores satisfatórios de parâmetros, ainda não atingiram os limites teóricos previstos. Esta observação, em primeiro lugar, refere-se ao rendimento de transformação de energia cujo valor mais alto na altura era de 20% enquanto, conforme as avaliações teóricas, o rendimento máximo pode ser de cerca de 60 % (fotocélula de cascata que se baseia no uso do GaAs, fotocélula de cascata com os concentradores de radiação solar). Visto que existe o recurso bem amplo de aperfeiçoar os dispositivos fotovoltaicos não é surpreendente que investigações de vários planos para além dos semicondutores tradicionais, envolvam materiais novos bem como estruturas novas tais como: heterojunções tensas, sistemas bidimensionais (filmes no fundo) com os poços quânticos, composições de filme estratificadas, etc.

Em Moçambique os problemas relacionados com transformação da energia têm importância extraordinária devido as razões económicas, sociais e ambientais. No Departamento de Física da UEM está -se a realizar o projecto que se refere a implantação vasta dos métodos fotovoltaicos.

Este trabalho é uma tentativa modesta de contribuir para as pesquisas que se efectuam neste contexto por via de investigação do espectro electrónico dum modelo concreto do filme, pois, o

espectro energético é uma característica dominante que determina a maioria das propriedades entre as quais as propriedades fotoeléctricas.

2. Quantificação dimensional e classificação dos filmes.

1. Conceitos básicos da teoria de quantificação dimensional.

O papel dominante, na maioria dos casos sobretudo relacionados com as propriedades eléctricas e ópticas, é desempenhado pelas regularidades do espectro energético dos portadores de carga peculiares a filmes de semicondutores ou metais. Estas regularidades são relacionadas com a elaboração dos dispositivos electrónicos em geral e fotovoltaicos em particular. Portanto, é natural prestar atenção a uma propriedade fundamental do espectro que foi prevista e investigada em pormenor por autores do artigo[12]. Trata-se de uma propriedade chamada quantificação dimensional(QD). Uma vez que existem várias revistas dedicadas ao assunto[13], a consideração que será feita abaixo só aborda os resultados que são necessários para concretizar o objecto deste estudo.

Como se sabe[14], o espectro energético de qualquer sistema inclusive o filme, se determina por autovalores de equação de Schrödinger que em forma geral pode ser escrita de modo seguinte:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, z) + V(\vec{r}, z) \Psi(\vec{r}, z) = E \Psi(\vec{r}, z) \quad , \quad (2.1)$$

onde \vec{r} é um vector bidimensional correspondente ao movimento de uma partícula ao longo do filme, z é a coordenada referente ao movimento transversal e $V(\vec{r}, z)$ é a energia potencial do portador no campo cristalino incluindo o potencial de retenção isto é, o potencial que impede a fuga dos electrões fora do filme. Conforme o artigo [12], aceita-se a aproximação de massa eficaz isotrópica que designaremos daqui adiante por "m". Segundo a teoria dos sólidos[15], esta aproximação permite excluir a necessidade de concretizar a energia potencial do campo periódico. Quanto ao potencial de retenção sabe-se [16], que este possui a ordem de grandeza comparável com a energia de extracção electrónica isto é, cerca de (2 – 6) eV. Entretanto, em relação aos fenómenos acima mencionadas só é importante conhecer a posição dos níveis de energia baixa. Por isso, o potencial de retenção pode ser tratado como se criasse um poço potencial de profundidade infinita.

Todas as suposições que foram introduzidas pelos autores[12], permitem reduzir a equação (2.1)

para a forma:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, z) = E \Psi(\vec{r}, z), \quad (2.2)$$

com as seguintes condições de fronteira:

$$\Psi(\vec{r}, z)|_{z=0} = 0 \quad \text{e} \quad \Psi(\vec{r}, z)|_{z=d} = 0, \quad (2.3)$$

onde d é a espessura do filme.

É evidente, que as condições de fronteira (2.3) resultam do comportamento do potencial de retenção e correspondem ao filme com as superfícies planas e paralelas entre si. Além disso, os resultados que seguem de equação(2.2) só se referem ao filme de espessura constante. A separação das variáveis é feita conforme a relação:

$$\Psi(\vec{r}, z) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi(z), \quad (2.4)$$

onde \vec{k} é vector de onda bidimensional, conduz a equação.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} = \left[E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] \Psi(z), \quad (2.5)$$

e as condições de fronteira respectivas a função $\Psi(z)$ que de maneira óbvia se deduzem das fórmulas (2.3). O método de resolução da equação(2.5) dá-se nos vários livros de mecânica quântica (MQ), por exemplo[14], portanto, é suficiente escrever os autovalores de energia, isto é:

$$E_n(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} n^2, \quad (2.6)$$

onde "n" é número inteiro que se chama número quântico de QD.

De relação(2.6), conclui-se fundamental segundo os autores[12], que espectro electrónico do filme uniforme à espessura constante consiste de sub-bandas de modo que cada uma das sub-bandas corresponda ao movimento quase-livre dos portadores ao longo do filme. Esta modificação do espectro conforme a terminologia estabelecida chama-se quantificação dimensional.

Observa-se que o efeito de QD possui um traço tão acentuado, que se reduz ao caracter discreto do espectro referido ao movimento transversal. Entretanto, a discretização por si só ainda

não significa que QD possa ser incondicionalmente observável, pois, pelo menos dois factores principais podem impedir a revelação experimental da QD. O primeiro factor é a distorção de distribuição de Fermi-Dirac, devido ao movimento térmico que envolvendo quantidade significativa dos níveis, faz lhes perder a sua individualidade quântica. O segundo factor é a ampliação dos níveis quânticos devido aos processos de espalhamento. Esta ampliação sob certas condições pode provocar a sobreposição dos níveis e por este meio reduz a possibilidade de observar o efeito de quantificação. Os factores em questão limitam a espessura de que seja revelada a QD.

Sejam, ΔE e ΔE_t as distâncias mínimas entre os níveis e o intervalo das energias dentro do qual tem lugar a distorção de "degrau" de Fermi-Dirac. É óbvio, que QD será significativa se for satisfeita a condição:

$$\Delta E \gg \Delta E_t . \quad (2.7)$$

De equação (2.6), obtém-se:

$$\Delta E = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2md^2} . \quad (2.8)$$

Quanto a ΔE_t de acordo com [15], obtém-se:

$$\Delta E_t \cong 2k_B T , \quad (2.9)$$

onde T é a temperatura absoluta. Combinando as equações (2.7)-(2.9), obtém-se restrições sobrepostas aos valores possíveis de espessura da película:

$$d \ll \frac{\pi \hbar \sqrt{3}}{2 \sqrt{mk_B T}} . \quad (2.10)$$

A condição (2.10) é consequência óbvia dos princípios básicos de MQ. De acordo com estes princípios a distância dentro da qual o potencial varia essencialmente, deve ser muitas vezes menor que o comprimento de onda de Broglie, para que sejam reveladas as propriedades ondulatórias. Quanto, a ampliação dos níveis ΔE_e estimulada por espalhamento, pode ser avaliada segundo as relações de incerteza, isto é:

$$\Delta E_e \sim \frac{\hbar}{\tau} . \quad (2.11)$$

Nesta equação (2.11), τ é o tempo médio de relaxação. Por analogia com a equação (2.9), obtém-se a condição:

$$\Delta E \gg \frac{\hbar}{\tau} . \quad (2.12)$$

Considerando que a velocidade $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ é fácil transformar (2.12) para a forma:

$$d \ll l, \quad (2.13)$$

onde l é comprimento médio do percurso livre.

O filme cuja espessura satisfaz as relações (2.10) e (2.13), de acordo com a terminologia estabelecida chama-se filme quântico. Um tipo dos filmes quânticos é objecto de investigação, mencionado neste trabalho, pois, exactamente os filmes quânticos revelam propriedades extraordinárias tais como: as oscilações[17] das grandezas termodinâmicas, definidas em função de $1/d$, ressonâncias dimensionais dos vários tipos[18], oscilações dos coeficientes cinéticos[10],etc. No entanto, as relações (2.10) e (2.13), permitem fazer avaliações numéricas, atribuindo aos parâmetros m e T os valores típicos $m \sim 10^{-30}$ kg e $T \sim 2-300$ K, obtém-se:

$$d < (50 - 5) \text{ nm} \quad (2.14)$$

O comprimento de caminho livre " l " depende de vários factores em particular da concentração das impurezas dos mecanismos de espalhamento e enquadra-se dentro do intervalo de l até 10^3 nm.

Observa-se que as relações (2.10) e (2.13) sobrepõem as limitações bastantes duras a espessura do filme quântico. Por isso, durante muito tempo as previsões teóricas só tinham interesse científico. A satisfação destas condições tornou-se atingível no ano 1971 quando o método de epitaxia molecular foi aplicado[20,21], a fim de fabricar filmes quânticos. As investigações dos filmes produzidos por meio desta tecnologia por completo confirmaram o efeito de QD. Por exemplo a fig.1 apresenta os resultados [22], que se referem ao coeficiente de absorção da luz em função da energia dos fotões.

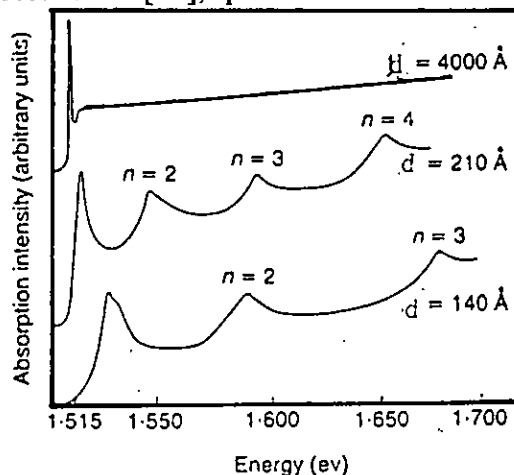


Fig.1 Coeficiente de absorção da luz em função da energia dos fotões [22].

Conforme as previsões teóricas feitas em termos da teoria do efeito de QD, o coeficiente de absorção deve possuir a estrutura de “degrau”. Observa-se que este comportamento tem sido comprovado por gráficos experimentais, dados na fig.1. Durante os últimos anos a tecnologia de criação das estruturas quânticas avançou muito, então, permite fabricar filmes de espessura e forma geométrica bem controladas e reproduzíveis. Hoje em dia, para estes objectivos, usam-se [23] os vários métodos em particular litografia electrónica de alta resolução, epitaxia de feixe molecular, precipitação química de vapor, precipitação química de vapor assistido por plasma ou radiação de laser e as suas combinações. A eficiência destes métodos mostra a fig.2 adoptada de artigo [24] que leva a imaginar as possibilidades de alta tecnologia, em criar as estruturas nanométricas.

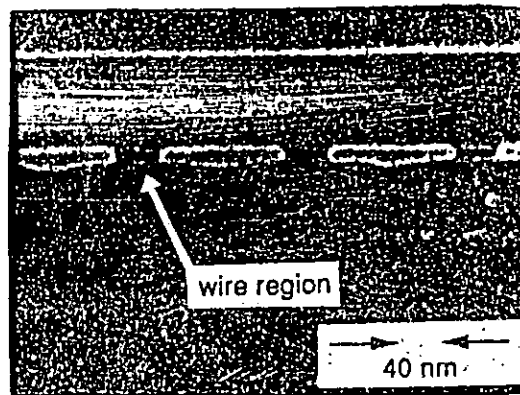


Fig.2 Exemplo de estrutura nanométrica adoptada de[24].

2. Classificação dos filmes.

Os filmes de um modo geral podem ser classificados por intermédio de várias maneiras tais como: a sua estrutura atómica, tecnologia de criação, as suas propriedades magnéticas, eléctricas, ópticas, etc. Mas para além desta classificação generalizada, sublinha-se o facto de que a QD permite dar a possibilidade de classificar filmes do ponto de vista das regularidades do espectro electrónico. Os que satisfazem as condições (2.10),(2.13) como foi mencionado, pertencem ao grupo dos filmes quânticos. As películas em relação às quais não seja satisfeita pelo menos uma destas condições chamam-se filmes clássicos. Estes ficam fora do estudo neste trabalho.

3. Filme de espessura variável e aproximação adiabática.

1. Conceitos básicos de filmes de espessuras variáveis.

Os resultados do parágrafo(2) reproduzidos de acordo com os artigos [12,18], referentes ao espectro energético dos filmes, como foi sublinhado, só são válidos em relação a um filme ideal com espessura constante. Entretanto, cria-se um interesse na investigação dos filmes de espessuras variáveis. De uma forma geral, as duas razões estimulam este interesse. Uma delas possui a natureza puramente tecnológica, pois, uma tecnologia mesmo avançada ainda não permite fabricar filmes com precisão dos planos atômicos, por um lado e para além disso, durante a exploração por via de regras, tem lugar a degradação das superfícies limitadas do filme. Por outro lado, o espectro energético é sensível em relação às condições de fronteira. Portanto, por via de factores geométricos consegue-se alcançar a estrutura determinada do espectro. Isso é mais uma razão para prestar atenção aos filmes de espessuras variáveis.

Uma das primeiras pesquisas dedicadas a este assunto foi feita pelos autores do artigo[25] em que foi considerado filme a forma de cunha. Aplicando a aproximação quase-clássica [14], os autores confirmaram que de facto aparecem os níveis virtuais provocados pela espessura variável. Os autores de artigo[26], investigaram as descargas de energia dos electrões devido a passagem através do filme com superfícies rugosas, isto é, aspecto importante para analisar o funcionamento do fotodiodo do filme, também comprovam a necessidade de se estudar filmes de género. A forma geral de resolver os problemas do espectro energético relacionados com os defeitos geométricos do filme quântico foi elaborada no artigo[27]. Daqui em diante este método ajusta-se a um modelo específico do filme que será concretizado durante as considerações posteriores.

2. Filme de fronteiras arbitrárias.

Filme de espessura variável é um filme fino limitado pelas superfícies que se descrevem com as equações:

$$\begin{cases} z_1 = \xi_1(\vec{r}) \\ z_2 = \xi_2(\vec{r}) + d_0 \end{cases} \quad (3.1)$$

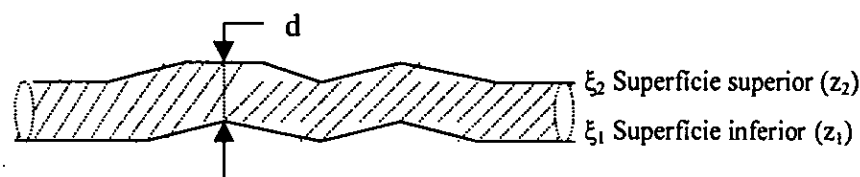


Fig.3 Modelo de filme de fronteiras arbitrárias.

Lembremo-nos que o potencial de retenção [16] possui a ordem de grandeza comparável com a energia de extracção electrónica de (2 - 6) eV, então, a autofunção e a densidade quântica do fluxo anulam-se. Isto significa que fora do filme a energia potencial possui tal valor, que a autofunção rapidamente diminui, tendendo para zero.

Tomando em conta que seja válida a aproximação da massa eficaz, a equação de Schrödinger será:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(\vec{r}, z) \right] \Psi(\vec{r}, z) = E \Psi(\vec{r}, z) \quad (3.2)$$

Conforme a suposição sobre o comportamento da energia potencial, tem-se a relação:

$$U(\vec{r}, z) = \begin{cases} 0, & \text{dentro do filme} \\ \infty, & \text{fora do filme} \end{cases} \quad (3.3)$$

Seja d distância entre os pontos que possuem o mesmo vector de posição \vec{r} . Então, se $d = d_0 + \xi_2 - \xi_1$ é uma função do vector de posição e em princípio ξ_2 e ξ_1 são funções arbitrárias. Para satisfazer as condições de fronteiras no filme, a autofunção Ψ desenvolve-se por sistema das autofunções que são soluções da equação unidimensional.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_n}{dz^2} = E_n \Psi_n(z), \quad (3.4)$$

onde $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} n^2$ é energia do estado estacionário referente ao número quântico "n".

Além demais $\Psi_n(z) |_{z=\xi_1} = \Psi_n(z) |_{z=d_0+\xi_2} = 0$ são condições de fronteiras do filme de superfícies arbitrárias.

Como se trata de um filme de espessura variável, a função $\Psi_n(z)$ é definida por Landau L. e Lifchitz E. [14] :

$$\Psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{d}} \operatorname{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi n}{d} \quad (3.5)$$

Lembremos que d depende de \vec{r} , então o desenvolvimento que são soluções da equação unidimensional, apresenta:

$$\Psi(\vec{r}, z) = \sum_n \Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \quad (3.6)$$

Substituindo a equação (3.6) em (3.2), tomando em conta que a função $\Psi_n(z)$ depende do vector de posição \vec{r} , através do parâmetro d , obtém-se:

$$\sum_n \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \left[\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \right] + E_n \Psi_n(z) \Psi_n(\vec{r}) \right\} = E \sum_n \Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \quad (3.7)$$

Multiplicando à equação (3.7) pela função conjugada de $\Psi_l(z)$, integrando em relação a "z", tomando em conta o somatório de "n" e sabendo que:

$$\int \Psi_l^*(z) \Psi_n(z) dz = \delta_{nl} = \begin{cases} 0; n \neq l \\ 1; n = l \end{cases} \quad (3.8)$$

obtém-se a seguinte equação:

$$\sum_n -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\xi_1}^{\xi_1 + \xi_2} \left\{ \Psi_l^*(z) \nabla^2 \left[\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \right] \right\} dz + E_l \Psi_l(\vec{r}) = E \Psi_l(\vec{r}) \quad (3.9)$$

Para calcular a integral da equação (3.9), deve-se considerar o desenvolvimento do seguinte operador de Laplace:

$$\nabla^2 \left[\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \right] = \vec{\nabla} \left\{ \vec{\nabla} \left[\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \right] \right\} \quad (3.10)$$

onde

$$\vec{\nabla} \left[\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \right] = \Psi_n(\vec{r}) \vec{\nabla} \Psi_n(z) + \Psi_n(z) \vec{\nabla} \Psi_n(\vec{r}) \quad (3.11)$$

Então, substituindo a fórmula (3.11) à fórmula (3.10) obtém-se:

$$\nabla^2 \left[\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \right] = \Psi_n(\vec{r}) \nabla^2 \Psi_n(z) + 2 \vec{\nabla} \Psi_n(\vec{r}) \vec{\nabla} \Psi_n(z) + \Psi_n(z) \nabla^2 \Psi_n(\vec{r}) \quad (3.12)$$

De acordo com a fórmula (3.5), onde a função $\Psi_n(z)$ depende de \vec{r} , através do parâmetro d e z não depende do vector \vec{r} , então tomando em conta estas considerações e efectuando os cálculos

intermediários, obtém-se uma fórmula diferencial que pode ser subdividida em dois aditivos para simplificar os cálculos. Estes aditivos encontram-se no **anexo 1** junto com as transformações intermediárias.

Entretanto, substituindo estas transformações à equação (3.9) e integrando, obtém-se o seguinte resultado:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_n(\vec{r}) + \Lambda_n \Psi_n(\vec{r}) + \sum_l' D_{ln} \Psi_l(\vec{r}) = E \Psi_n(\vec{r}), \quad (3.13)$$

onde Λ_n e D_{ln} correspondem aos elementos diagonais e não-diagonais respectivamente.

$$\Lambda_n = -\frac{\hbar^2}{2md^2} \left\{ \sqrt{\frac{2}{d}} \left[-\frac{1}{4} (\vec{\nabla} d)^2 - \pi^2 n^2 \left(\frac{1}{3} (\vec{\nabla} d)^2 + \vec{\nabla} \xi_1 \vec{\nabla} d + (\vec{\nabla} \xi_1)^2 \right) \right] \right\}, \quad (3.14)$$

$$D_{ln} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{4nl(-1)^{n+l}}{n^2-l^2} \frac{\vec{\nabla} d}{d} \cdot \vec{\nabla} - \frac{(6n^2+2nl)nl(-1)^{n+l}}{(n^2-l^2)^2} \left(\frac{\vec{\nabla} d}{d} \right)^2 + (-1)^{n+l} \frac{2nl}{n^2-l^2} \frac{\nabla^2 d}{d} - \frac{8nl^3}{(n^2-l^2)^2} \left[(-1)^{n+l} - 1 \right] \frac{\vec{\nabla} \xi_1 \vec{\nabla} d}{d^2} \right\}. \quad (3.15)$$

Importa salientar que o operador de Hamilton correspondente ao filme de fronteiras arbitrárias em representação matricial inclui por si termos de dois tipos essencialmente diferentes. Um destes tem forma diagonal e o outro pelo contrário é não-diagonal.

4. Filme de superfícies congruentes.

1. Escolha do modelo teórico.

De acordo com a análise feita no parágrafo (3), o operador de Hamilton correspondente ao filme arbitrário consiste de dois aditivos, onde um dos quais (3.14) tem a forma diagonal em relação aos números quânticos, descritos pela quantificação dimensional.

$$u_e = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{6md^2} \left[\left(\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \right)^2 + \left(\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \cdot \frac{\vec{\nabla} \xi_2}{d} \right) + \left(\frac{\vec{\nabla} \xi_2}{d} \right)^2 \right]. \quad (4.1)$$

A função u é energia potencial respectiva ao movimento bidimensional ao plano xoy . O outro aditivo (3.15) implica em si autofunções diferentes correspondentes a quantificação dimensional. Como este não é diagonal, estimula as transições quânticas entre os níveis de quantificação dimensional. Isto, deve-se ao espalhamento por não-homogeneidade das superfícies do filme. Ao limite $d \rightarrow \infty$ correspondente ao cristal maciço, os termos não-diagonais anulam-se, tal como acontece com a energia eficaz definida pela equação (4.1).

Portanto, os termos não-diagonais só influem sobre o espectro do sistema limitado a uma direcção do eixo- z . Quando se trata de um filme, são elaborados dois métodos aproximados que permitem investigar os termos considerados: i) Um deles usa-se a fim de se estudar filmes maciços em que a espessura média do filme "d" pode prevalecer nos tamanhos lineares das não-homogeneidade superfícies, isto é, $d \gg (h, r)$, onde "h" é parâmetro característico correspondente ao eixo- z e "r" é tamanho característico ao plano do filme. ii) Se for realizada a condição (i), pode ser aplicável a teoria de perturbação, em que na qualidade dos parâmetros de desenvolvimento de Wigner-Brilluin [28], servem as relações h/d e r/d . iii) Se o filme fosse feito de tal maneira que a espessura média pudesse ser comparável com os tamanhos lineares do relevo superficial, poderia ser aplicável outro método equivalente a aproximação adiabática [15], em teoria dos sólidos. Esta reduz-se a separação do movimento rápido por um lado e lento por outro lado. Nos sólidos, o movimento rápido é realizado pelos electrões e os iões efectuam o movimento lento, isto é, $w_r \gg w_i$. Onde w_r e w_i são frequências respectivas. Segundo esta relação é admissível considerar o movimento dos electrões, tal como se repousassem os iões num sólido. Consequentemente autofunções dos electrões só dependem das posições instantâneas dos iões. Portanto, os subsistemas das partículas leves "electrões" e das partículas pesadas "iões", na primeira aproximação consideram-se como se fossem independentes. Pelo que, para um filme fino, a ideia é geral e foi argumentada por Baskin-Entin [27]. Os quais investigaram os níveis locais criados por distorções de superfície de um filme quântico.

A frequência característica respectiva ao movimento transversal " w_t " é cerca de $h/2md^2$, por sua vez a frequência ao movimento longitudinal " w_l " é $hk_0^2/2m$, onde k_0 é o vector de onda térmico. Então, para uma película fina pode ser satisfeita a relação $d^2 \gg k_0^2$, que permite separar os movimentos transversal e longitudinal. Esta separação significa que seja aplicável a aproximação adiabática para graus de liberdades diferentes.

Ao analisar o resultado geral que reproduz os dados do artigo [27], concluímos que existe um caso especial que ainda não foi bastante investigado, sendo assim, permite evitar a necessidade de considerar todos aspectos provocados pelo termo não-adiabático do operador de Hamilton. Este caso refere-se ao filme de superfícies congruentes.

Então, seja $z_i = \xi(\vec{r})$ equação da superfície inferior da película e $z_s = \xi(\vec{r}) + d_0$ equação da superfície superior, d é a distância correspondente aos pontos com mesmo vector de posição \vec{r} que permanece constante em função a este vector, isto é:

$$d = z_s - z_i = d_0 + \xi(\vec{r}) - \xi(\vec{r}) = d_0 = \text{const.} \quad (4.2)$$

As superfícies que tem esta propriedade denominam-se congruentes. Estas obtêm-se devido ao deslocamento de todos os pontos por mesmo vector, pois a consideração citada refere-se ao deslocamento de superfície inferior " d_0 " ao longo do eixo-z. Tomando em conta a definição (4.2) para superfícies congruentes, obtêm-se:

$$\vec{\nabla} d = 0 \quad ; \quad \nabla^2 d = 0 \quad (4.3)$$

Também, filmes limitados por superfícies de género se chamam congruentes.

Substituindo as relações (4.3) nos termos não-diagonais do operador de Hamilton (3.15), conclui-se que estes se anulam para filmes em questão. Para além disso de (4.1) resulta:

$$u_e = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2} \left(\vec{\nabla} \xi \right)^2 \quad (4.4)$$

Consequentemente a equação de Schrödinger correspondente ao movimento longitudinal reduz-se a fórmula:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_n + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2} \left(\vec{\nabla} \xi \right)^2 \Psi_n = \left(E - \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2} \right) \Psi_n \quad (4.5)$$

Sublinha-se que só se refere a um filme de fronteiras congruentes.

O operador não adiabático é nulo independentemente da forma concreta da equação de superfície. Todos os efeitos ligados à forma da superfície contém o termo que corresponde a energia potencial. A energia eficaz é a mesma função das coordenadas x e y , multiplicada por um factor que além dos parâmetros fundamentais (m, d) só depende do número quântico "n" de quantificação dimensional.

Ao limite $d \rightarrow \infty$ corresponde ao cristal maciço em que o efeito de fronteira pode ser desprezível depois de omitir o termo infinitésimo $(\vec{\nabla} \xi / d)^2$. Esta análise vai de acordo com os resultados conhecidos e investigados, sendo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \Psi = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \Psi, \quad (4.6)$$

onde $k_z = \pi n/d$. Então, se vê que a equação (4.5) reduz-se a equação (4.6), que descreve o movimento quase-livre dos portadores, tal como deve ser em aproximação da massa eficaz. Assim, ao limite $\vec{\nabla} \xi \rightarrow 0$, corresponde a película plana, isto é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_n = \left(E - \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m} \right) \Psi_n. \quad (4.7)$$

De acordo com esta análise, obtém-se a relação argumentada em teoria dos efeitos dimensionais [12,18].

Foi sublinhado que a forma do filme influi sobre o espectro dos autovalores de energia por meio de energia potencial que é proporcional ao factor $(\vec{\nabla} \xi)^2$. Portanto, é necessário concretizar a forma explícita da função $\xi(\vec{r})$ a fim de obter informações detalhadas respectivas aos estados quânticos dos portadores. Antes, deve ser feita uma observação geral que se refere a função $\xi(\vec{r})$, do ponto de vista teórico. Esta função não se objecta que seja arbitrária, por isso, o problema pode ser reduzido a investigação do movimento bidimensional em campo arbitrário. Este problema foi investigado, embora existam particularidades ainda não estudadas até ao fim, como: a localização fraca dos portadores; efeito quântico de Hall; infiltração perto do ponto de localização; etc.

Portanto, para uma película de superfícies congruentes, se faz objecção praticamente inevitável de visão tecnológica. Seja a função $\xi(\vec{r})$ arbitrária, para obter um filme de fronteiras congruentes é necessário que seja aplicada a mesma função $\xi(\vec{r})$, à superfície superior.

Se a função $\xi(\vec{r})$ é arbitrária, então é pouco provável que possa, tecnologicamente, ser reproduzida a mesma função, pois, o método de espectroscopia electrónica de túnel [29], permite distinguir a estrutura atômica de superfície (em princípio). Portanto, mesmo que se usasse esta informação sobre a função $\xi(\vec{r})$ seria impossível dirigir por processo de produção de filme de modo que permitisse reproduzir a mesma forma para superfície superior. Então, sem excluir a importância de investigar o espectro energético e outras propriedades de filmes com as não-homogeneidades arbitrárias, que podem ser feitas na base de Hamiltoniano (3.13) e (4.1) a consideração posterior irá cingir-se só na película congruente, cuja superfície se descreve pela equação:

$$\xi_{(x+2ld)} = \xi_{(x)} = \begin{cases} \xi_0; |x| \leq a \\ -\frac{\xi_0}{b-a}(x-b); a < x \leq b \\ \frac{\xi_0}{b-a}(x+b); -b \leq x < -a \\ 0; -d \leq x < -b; b < x \leq d \end{cases} \quad (4.8)$$

De acordo com a equação (4.8), conclui-se que o modelo em estudo corresponde a um filme uniforme ao longo do eixo-y, e, ao eixo-x trata-se de um sistema periódico, de período "2d". Uma secção recta ao filme por plano zox, é representado na fig.4.

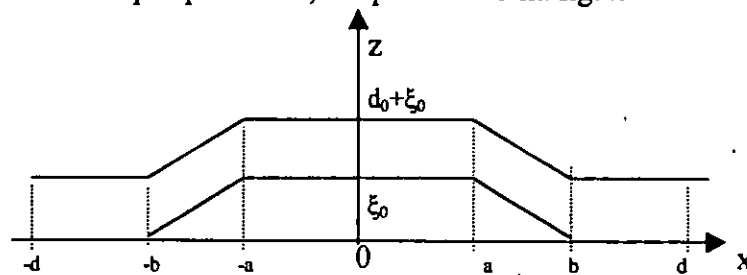


Fig.4 Substrato de filme uniforme no plano zox.

Considerando a forma explícita da função $\xi(\vec{r})$, isto é, a equação (4.8) e a definição de energia eficaz, obtém-se:

$$u_e = \begin{cases} 0, \text{ se } |x| \leq a \text{ ou } b \leq |x| \leq d \\ u_n, \text{ se } a < |x| \leq b \end{cases} \quad (4.9)$$

$$u_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2 m d_0^2} \operatorname{tg}^2 \varphi ; \quad \operatorname{tg} \varphi = \xi_0 / b-a \quad (4.10)$$

A escolha do modelo da película de superfícies congruentes, permite pelo menos do ponto de vista geral que a função $\xi(\vec{r})$ em princípio possa ser arbitrária. Entretanto, o que é importante é que o modelo teórico deve corresponder às possibilidades de tecnologia. Os métodos da tecnologia moderna sem dificuldades permitem produzir filmes de semicondutores e de metais de periodicidade unidimensional e, por sua vez, é mais cómodo controlar tecnologicamente o perfil linear do que qualquer outro. Portanto, para aproximar a consideração teórica às aplicações possíveis a investigação, limita-se a analisar um só modelo concreto que corresponde a forma do filme definida pela equação(4.8). Também, deve-se ter em conta que a análise teórica de um sistema simples dá possibilidades de verificar os métodos próprios, a fim de aplicá-los para investigar os sistemas mais complicados, sobretudo se forem conseguidos resultados perspectivos a menos que seja em relação aos modelos simples.

2. Discussão do modelo escolhido.

De facto, o estudo do modelo considerado tem um interesse independente; pois trata-se de um sistema de portadores de carga eléctrica que possui espectro energético bastante específico. Os autovalores de energia correspondentes ao movimento transversal, isto é, ao longo do eixo-z, formam espectro completamente discreto.

Então, conforme a terminologia habitual [27], tem-se a localização forte, pelo que a autofunção respectiva está localizada dentro do intervalo finito de coordenada "z".

O movimento ao longo do eixo-y, efectua-se de tal modo que os portadores de carga sejam livres; dado que o espectro referente ao grau de liberdade é contínuo e as autofunções são ondas planas que envolvem todo eixo-y.

Para tirar conclusões qualitativas sobre o movimento ao longo do eixo-x, é analisada a energia potencial, cujo gráfico abaixo em função de "x" apresenta a fig.5.

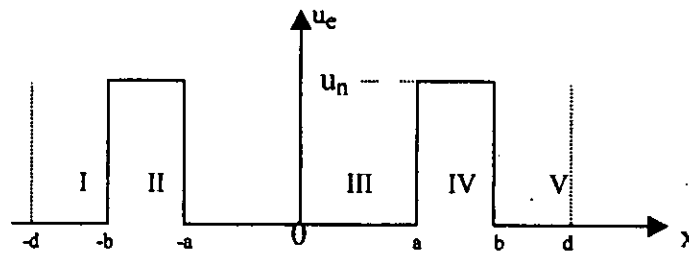


Fig.5 Energia potencial qualitativa.

É claro, que se tem dois intervalos de energia qualitativamente diferentes. Em que um deles corresponde a energia maior que a altura da barreira potencial " u_n ". Da mecânica quântica [14], sabe-se que autovalores de equação de Schrödinger criam espectro contínuo e as autofunções respectivas devem ser ondas planas modificadas por potencial periódico " $u_n(x)$ ". O outro intervalo refere-se às energias de $[0, u_n]$, onde cada poço rectangular [14] cria os níveis locais.

Os níveis criados por poços separados ampliam as sub-bandas devido a simetria de translação; a largura de uma sub-banda é proporcional à integral de descobrimento que é função exponencial de período " $2d$ ", como será demonstrado posteriormente. Portanto, o espectro consiste de bandas pouco largas, onde cada sub-banda de quantificação dimensional contém estados correspondentes ao movimento bidimensional e quase-unidimensional. Importa aqui salientar que por um lado a investigação deste espectro permite prever frequências próprias; intensidade de absorção de radiação electromagnética; analisar e interpretar os efeitos de ressonância.

Por outro lado, a anisotropia essencial do espectro terá de estimular todos fenómenos de transporte que apresentam por si interesse independente, sobretudo se se tomar em conta a possibilidade de dois mecanismos de transferência de carga e da energia. Um destes efectua-se por via de saltos electrónicos e o outro tem carácter habitual [15].

5. Dedução da equação secular.

De acordo com o parágrafo(4), a energia potencial " u_e " correspondente ao modelo mais simples, só depende da coordenada " x ". Portanto, a equação de Schrödinger admite a separação das variáveis " x " e " y ". Como o movimento ao longo do eixo- y é livre, a autofunção respectiva deve ser uma onda plana:

$$\Psi_n(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cdot e^{iyk} \cdot \Psi(x), \quad (5.1)$$

em que L é o comprimento do filme, k_y é o vector de onda.

A função $\Psi(x)$ depende do número quântico "n" e " k_y "; os índices correspondentes foram omitidos para simplificar as equações posteriores. Substituindo a equação (5.1) na equação de Schrödinger obtém-se:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\Psi}{dx^2} + u_e \Psi = \varepsilon \Psi \quad , \quad (5.2)$$

$$\varepsilon = E - \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2 m d_0^2} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2 m} \quad . \quad (5.3)$$

A energia potencial é uma função lisa em pedaços. É necessário considerar separadamente todos os intervalos onde " u_e " seja derivável, de acordo com a fig.5. No entanto, considerando o primeiro intervalo, a equação (5.2) é transformada assim:

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + k^2 \Psi_1 = 0 \quad , \quad (5.4)$$

$$k^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \quad . \quad (5.5)$$

Então, a autofunção Ψ_1 possui a fórmula seguinte:

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad . \quad (5.6)$$

A equação (5.6), inclui dois coeficientes A_1 e B_1 , pois, que a mesma fórmula de autofunção corresponde ao terceiro e quinto intervalos. Quanto ao segundo e quarto intervalos é necessário considerar dois momentos diferentes:

Um deles refere-se a energia $\varepsilon < u_n$, portanto, a solução geral da equação (5.2) é:

$$\Psi_{2/4}(x) = A_{2/4} e^{\chi x} + B_{2/4} e^{-\chi x} \quad , \quad (5.7)$$

$$\chi = \left[\frac{2m(u_n - \varepsilon)}{\hbar^2} \right]^{1/2} \quad . \quad (5.8)$$

Para obter a solução correspondente a energia $\varepsilon > u_n$, basta substituir na equação (5.7) o valor imaginário de χ definido pela equação (5.8).

Sabe-se [14], que a autofunção da equação de Schrödinger e sua derivada da primeira ordem são algumas funções contínuas. Segundo esta propriedade das autofunções obtém-se um sistema de

equações correspondentes a dez incógnitas A_i, B_i . As oito equações são deduzidas de acordo com a continuidade em cada um dos pontos “ $x = -b, -a, a, b$ ”.

Para $x = a$, as condições mencionadas possuem as fórmulas:

$$\Psi_3|_{x=a} = \Psi_4|_{x=a} \quad \text{e} \quad \Psi_3'|_{x=a} = \Psi_4'|_{x=a} \quad (5.9)$$

Depois de substituir as funções Ψ_3 e Ψ_4 que se determinam conforme as equações (5.6) e (5.7), obtém-se:

$$\begin{cases} A_3 e^{ika} + B_3 e^{-ika} = A_4 e^{xa} + B_4 e^{-xa} \\ ik(A_3 e^{ika} - B_3 e^{-ika}) = \chi(A_4 e^{xa} - B_4 e^{-xa}) \end{cases} \quad (5.10)$$

Por analogia deduzem-se as restantes equações, sendo conveniente apresentá-las em forma matricial, como:

$$\hat{V}(k, a) \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \hat{V}(\chi, a) \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix}, \quad (5.11)$$

$$\hat{V}(k, \xi) = \begin{pmatrix} e^{ik\xi} & e^{-ik\xi} \\ ike^{ik\xi} & -ike^{-ik\xi} \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

A matriz $\hat{V}(\chi, \xi)$, deduz-se da equação (5.12), se substituir χ em vez do parâmetro “ ik ”. Considerando a equação (5.11) exprimem-se os coeficientes “ A_{i-1}, B_{i-1} ” através dos coeficientes “ A_i, B_i ”, obtendo-se a seguinte equação:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{V}^{-1}(k, b) \hat{T}(\chi, -b, -a) \hat{T}(k, -a, a) \hat{T}(\chi, a, b) \hat{V}(k, b) \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

Nesta equação (5.13), são introduzidas as matrizes $\hat{T}(\chi, \xi, \eta); \hat{T}(k, \xi, \eta)$ que se denominam matrizes de transição ou de transferência [30]. Estas permitem simplificar a análise quantitativa de propagação das ondas e movimento das partículas em meio periódico. Cada matriz de transferência é expressa através das matrizes $\hat{V}(\chi, \xi), \hat{V}(k, \xi)$ de acordo com:

$$\hat{T}(\chi, \xi, \eta) = \hat{V}(\chi, \xi) \hat{V}^{-1}(\chi, \eta) \quad \text{e} \quad \hat{T}(k, \xi, \eta) = \hat{V}(k, \xi) \hat{V}^{-1}(k, \eta) \quad (5.14)$$

Aplicando as definições (5.12) e (5.14), facilmente se obtém as formas explícitas correspondentes às matrizes de transferência:

$$\hat{T}(\chi, -b, -a) = \hat{T}(\chi, a, b) = \frac{1}{\chi} \begin{pmatrix} \chi ch \chi \Delta & -sh \chi \Delta \\ -\chi^2 sh \chi \Delta & \chi ch \chi \Delta \end{pmatrix}, \quad (5.15)$$

$$\hat{T}(k, -b, -d) = \hat{T}(k, b, d) = \frac{1}{k} \begin{pmatrix} k \cos k\Delta_1 & -\text{sen}k\Delta_1 \\ k^2 \text{sen}k\Delta_1 & k \cos k\Delta_1 \end{pmatrix}, \quad (5.16)$$

$$\hat{T}(k, -a, a) = \frac{1}{k} \begin{pmatrix} k \cos 2ka & -\text{sen} 2ka \\ k^2 \text{sen} 2ka & k \cos 2ka \end{pmatrix}, \quad (5.17)$$

onde $b-a = \Delta$ é largura da barreira potencial e $d-b = \Delta_1$ é semi-largura do poço potencial.

Contudo, o sistema das equações (5.13) não está fechado, pelo que se obtêm duas equações em relação aos quatro coeficientes A_1, B_1, A_5 e B_5 ; para tal é necessário ter em conta a estrutura periódica.

Assim sendo, é válido o teorema de Floke [15]. De acordo com este teorema as soluções da equação diferencial da segunda ordem com coeficientes periódicos devem satisfazer as equações:

$$\Psi_1|_{x=-d} = e^{2iqd} \Psi_5|_{x=d} \quad \text{e} \quad \Psi_1'|_{x=-d} = e^{2iqd} \Psi_5'|_{x=d}, \quad (5.18)$$

onde "q" desempenha o papel de vector de onda e segundo as condições de Born-Karman[15], percorre os valores $\pi n/2Nd$, $n = (0, \pm 1, \dots, \pm N)$ e $2Nd$ é comprimento do filme ao longo do eixo-x.

As equações (5.18), permitem exprimir os coeficientes (A_5, B_5) em função dos coeficientes (A_1, B_1) , isto é:

$$\begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} = e^{-2iqd} \hat{V}^{-1}(k, d) \hat{V}(k, -d) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (5.19)$$

Combinando as equações (5.13) e (5.19), obtém-se:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = e^{-2iqd} \hat{V}^{-1}(k, -b) \hat{T}(k, -b, -a) \hat{T}(k, -a, a) \hat{T}(k, b, d) \hat{V}(k, -d) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (5.20)$$

Sabe-se que o sistema das equações lineares e homogéneas só pode possuir soluções se se anular o seu determinante:

$$\text{Det} \left\| \hat{T}(k, -b, -d) - e^{-2iqd} \hat{T}(k, -b, -a) \hat{T}(k, -a, a) \hat{T}(k, a, b) \hat{T}(k, b, d) \right\| = 0. \quad (5.21)$$

Substituindo as matrizes \hat{T} e omitindo as transformações intermediárias, apresentadas em anexo2, da equação (5.21) obtém-se a equação secular seguinte:

$$\left(ch2\chi\Delta \cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} sh2\chi\Delta sen2ka \right) \cos 2k\Delta_1 + \left[\frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} sh2\chi\Delta \cos 2ka - \right. \\ \left. - \left(ch^2\chi\Delta - \frac{\chi^4 + k^4}{2\chi^2 k^2} sh^2\chi\Delta \right) sen2ka \right] sen2k\Delta_1 = \cos 2qd \quad (5.22)$$

A equação secular (5.22) corresponde ao intervalo de energia $[0, u_n]$, isto é, a energia menor que a altura da barreira potencial. Pelo que cada uma das soluções expressas em função de quase-vector de onda "q", determina sub-banda energética respectiva. Conforme a mecânica quântica [14], os autovalores que se encontram fora deste intervalo referem-se ao espectro contínuo.

Considerando a definição (5.8), verifica-se que a energia maior que " u_n ", a grandeza χ só possui valor imaginário. Então, para encontrar a equação secular é suficiente substituir na equação (5.22), o valor $i\chi$ em vez de χ .

Assim:

$$\left[\cos 2\chi\Delta \cos 2ka - \frac{\chi^2 + k^2}{2\chi k} sen2\chi\Delta sen2ka \right] \cos 2k\Delta_1 + \left[\left(\frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \right)^2 sen2ka - \right. \\ \left. - \frac{\chi^2 + k^2}{2\chi k} \left(sen2\chi\Delta \cos 2ka + \frac{\chi^2 + k^2}{2\chi k} \cos 2\chi\Delta sen2ka \right) sen2k\Delta_1 \right] = \cos 2qd \quad (5.23)$$

As equações (5.22) e (5.23) abordam totalmente o espectro energético dos electrões, uma vez que a primeira equação permite determinar os autovalores localizados dentro do intervalo $[0, u_n]$, enquanto que a segunda cobre o intervalo de u_n até ao infinito.

6. Soluções aproximadas da equação secular.

As equações (5.22) e (5.23) são exactas e enquadram-se ao modelo do filme em estudo. Entretanto, estas equações só podem ser resolvidas por via de cálculos numéricos, por isso é necessária a escolha das aproximações que permitam encontrar formas analíticas das soluções respectivas.

Contudo, antes de propormos o método aproximado que seja adequado ao problema, é preciso verificar que essas equações, em alguns casos de limite, podem ser reduzidas a forma conhecida e confirmar-se a sua validade.

Considerando a fig.5, em que sejam iguais os comprimentos dos poços potenciais, isto é, $a=d-b$, neste caso o limite correspondente ao sistema periódico dos poços rectangulares é conhecido como modelo de Kronig-Penney [31]. Portanto, se a equação (5.22) for correcta pode ser transformada numa forma equivalente à equação secular de Kronig-Penney (KP). Depois de efectuar esta substituição obtém-se:

$$ch\chi\Delta \cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} sh\chi\Delta \operatorname{sen} 2ka = \cos qd \quad (6.1)$$

Verifica-se que [31] a equação (6.1), exactamente coincide com a equação secular do modelo de Kronig-Penney. Mas ao limite $\xi_0 \rightarrow 0$ e $\Delta \rightarrow 0$, de fig.4 conclui-se que este limite corresponde ao filme com fronteiras planas e paralelas uma da outra. Recordemo-nos que do parágrafo(4), ao filme desta forma tem lugar o efeito de quantização dimensional, além disso o espectro energético consiste de sub-bandas de tal modo que cada uma das sub-bandas corresponde ao movimento livre ao longo dos eixos "x" e "y". Assim sendo, a lei de dispersão deve ser quadrática em função dos componentes do quase-vector de onda. Atendendo que a equação (5.23) refere-se ao espectro contínuo é necessário considerá-la, quando se pretende reproduzir resultados peculiares a filme ideal. Para tal usam-se dois procedimentos:

O primeiro corresponde ao limite $\Delta \rightarrow 0$, mas este só não permite restabelecer a forma plana das fronteiras, pois como se pode ver da fig.5, se obtém potencial correspondente ao modelo de Dirac [31], com uma diferença de energia potencial, permanecendo finita. Havendo, por isso mesmo, a necessidade de efectuar o segundo limite $\xi_0 \rightarrow 0$, por meio do qual se anula a barreira potencial que separa os poços vizinhos e restabelece a estrutura ideal do filme. Realizados os cálculos da equação (5.23) para segundo limite, obtém-se:

$$\cos 2kd = \cos 2qd \quad (6.2)$$

Daí resulta:

$$k = \pi p/2d + q \quad (6.3)$$

Em que “p” percorre os valores $(0, \pm 1, \pm 2, \dots)$. Quanto ao quase-vector de onda “q” varia dentro da primeira zona de Brilluin. Aplicando o esquema ampliado das zonas [15] por meio da relação:

$$k_x = \pi p / 2d + q, \quad (6.4)$$

introduz-se “x” componente do vector de onda que percorre todos os valores quase-discretos de “ $-\infty$ ” até “ $+\infty$ ”. As equações (5.5), (6.3) e (6.4) permitem estabelecer a forma explícita da lei de dispersão, de tal modo:

$$E(k_x, k_y) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md_0^2} + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2). \quad (6.5)$$

A equação (6.5) enquadra-se em teoria de EQD [12]. Portanto, analisados os dois casos particulares acima dados demonstram a validade da equação secular, representada pelas equações (5.22) e (5.23). Além demais a equação (5.22) pode ser transformada assim:

$$\begin{aligned} & \left[\cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka + e^{-2z\Delta} \left(\cos 2ka - \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka \right) \right] \cdot \\ & \cdot \left[\cos 2k\Delta_1 + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2k\Delta_1 + e^{-2z\Delta} \left(\cos 2k\Delta_1 - \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2k\Delta_1 \right) \right] = \\ & = 2e^{-2z\Delta} (\cos 2k(a - \Delta_1) + \cos 2qd) \end{aligned} \quad (6.6)$$

No intervalo $[0, u_n]$ de energia, alguns termos tem ordem exponencial, desprezando estes termos de ordem superior, obtém-se a aproximação de ordem zero da equação secular:

$$\left(\cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka \right) \cdot \left(\cos 2k\Delta_1 + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2k\Delta_1 \right) = 0 \quad (6.7)$$

Entretanto, a equação (6.7) é satisfeita se pelo menos um dos factores for igual a zero no primeiro membro. É de salientar que as equações obtidas deste modo são perfeitamente investigadas em (MQ). Conforme [14] cada uma das equações determina os níveis estacionários respectivos ao poço rectangular de profundidade finita. Então, a aproximação de ordem zero corresponde aos dois poços independentes, que têm a mesma profundidade e as larguras “2a” e “2 Δ_1 ” em geral diferentes.

Se se desprezar um só termo de ordem exponencial, isto é, o segundo membro da equação (6.6), obtém-se duas equações separadas análogas à equação (6.7).

Quanto aos níveis energéticos da MQ [32], sabe-se que o número N destes níveis é determinado pela relação:

$$N = \left[\left(\frac{2mu}{\hbar^2} \right)^2 \frac{2a}{\pi} \right] + 1, \quad (6.8)$$

onde "u" é a profundidade do poço, "a" é a largura do poço. Segundo as designações feitas na fórmula (6.3), os números N_1 e N_2 referidos em cada um dos poços são:

$$N_1 = \left[\frac{4n\xi_0 a}{d_0 \Delta} \right] + 1 \quad e \quad N_2 = \left[\frac{4n\xi_0 \Delta_1}{d_0 \Delta} \right] + 1. \quad (6.9)$$

Porém pode se ver que além do número quântico de quantização transversal "n", os números N_1 e N_2 dependem dos parâmetros geométricos " ξ_0 , d_0 , Δ_1 e Δ "; cujos valores só se limitam a possibilidades tecnológicas. Os parâmetros " d_0 , a e Δ_1 ", devido a sua orientação em relação a direcção de crescimento, são mais admissíveis ao controle tecnológico que os parâmetros " ξ_0 e Δ " correspondentes às partes inclinadas do filme. Em cada aspecto devem ser distinguidos três hipóteses respectivas aos números N_1 e N_2 . A primeira refere-se às relações $N_1 \gg 1$ e $N_2 \gg 1$; a segunda só tem lugar quando um só número dos níveis, digamos $N_1 \gg 1$ e a terceira hipótese corresponde aos casos N_1 e N_2 , sejam comparáveis com o número "1". Portanto, na primeira bem como na segunda hipótese ambos os poços ou pelo menos um possui estrutura quase-discreta dos níveis energéticos com a distribuição quase-contínua de energia [32]. Então, só o último caso corresponde ao filme quântico, o espectro proporcional à nossa perspectiva em estudo nesta investigação.

Consequentemente a consideração posterior irá debruçar os casos em que $N_1 \geq 1$ e $N_2 \geq 1$. Se as equações (6.9) incluem os quatros parâmetros geométricos, então sempre existe um espaço para que a tecnologia possa garantir a validade destas restrições.

Recordando a aproximação de ordem zero expressa pela equação (6.7), apresentamos a estrutura qualitativa dos níveis energéticos, da seguinte forma:

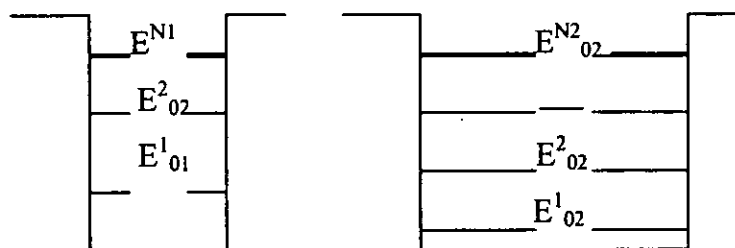


Fig.6 Estrutura qualitativa dos níveis de energia.

As energias E_{0i}^j dependem da profundidade “u” e da largura do poço. Existem tabelas que incluem os autovalores da energia em função dos parâmetros acima mencionados. Para a realização dos cálculos numéricos precisa-se de conhecer estes autovalores que os reduzimos a tabela1, aproveitando os dados adoptados de [32,33].

Tabela1. Autovalores de energia [32,33], * corresponde aos níveis ímpares.

| $\left(\frac{2mu_0}{\hbar^2}\right)^{1/2} \cdot a$ | 1,0 | 1,5 | 2,0 | 2,5 | 3,0 | 3,5 | 4,0 | | | | | | | |
|---|-------|-------|-------|--------|-------|--------|-------|--------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|
| $\left(\frac{2mE_{0i}}{\hbar^2}\right)^{1/2} \cdot a$ | 0,628 | 0,944 | 1,038 | 1,886* | 1,223 | 2,237* | 1,318 | 2,675* | 1,432 | 2,823* | 3,374 | 1,477 | 2,892* | 3,847 |

$$tgka = \frac{\chi}{k}, \text{ equação respectiva ao estado par.}$$

$$ctgka = -\frac{\chi}{k}, \text{ equação respectiva ao estado ímpar.}$$

As correcções aos autovalores E_{0i}^j são encontrados por meio da teoria das perturbações com respeito ao espectro discreto. Como regra geral esta teoria é aplicada directamente à equação de Schrödinger, no entanto a equação (6.6) é equivalente à equação de onda. Assim nesta equação (6.6) também são aplicáveis os métodos elaborados para a equação de Schrödinger, mas em princípio é necessário especificar a forma explícita de perturbação. Comparando a equação imperturbada (6.7) com a equação exacta (6.6), conclui-se que desempenham o papel de perturbação todos os aditivos que incluem os factores exponenciais $e^{-2x\Delta}$. A origem destes factores é evidente, uma vez que a aproximação dada pela equação (6.7) em forma implícita baseia-se na posição de que as paredes do

poço sejam intransitáveis, pois, a espessura deste tende ao infinito. Entretanto, cada uma das paredes na realidade tem espessura finita e é determinada pelo parâmetro "Δ". Sabe-se que [14], dentro da barreira potencial a função de onda não se anula e reduz-se a sobreposição das ondas passadas e reflectidas, porém cada uma possui o comportamento exponencial, que explica o surgimento dos factores em questão. Assim, conclui-se que a perturbação é responsável pela transferência parcial das barreiras que separam os poços e as células vizinhas.

Podemos verificar que os factores exponenciais que se encontram em equação (6.6) estimulam os processos qualitativamente diferentes, com efeito, desprezando o segundo membro obtém-se a equação que é separada em duas independentes, além demais, cada uma delas corresponderá a um só poço potencial.

A equação correspondente ao primeiro poço escreve-se:

$$\cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka + e^{-2\chi\Delta} \left(\cos 2ka - \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka \right) = 0 \quad (6.10)$$

A equação análoga tem lugar em relação ao outro poço; a propriedade da equação (6.6), permiti-nos concluir que o termo de perturbação que se encontra na parte direita estabelece uma ligação entre os poços dentro de uma célula elementar (primeiro aditivo) e entre as células elementares (segundo aditivo). Sabe-se que o processo microscópico respectivo a ligação em questão, se reduz ao efeito de túnel, por meio do qual a partícula efectua transições de um poço para outro vizinho.

Interpretado o segundo membro da equação (6.6), podemos atribuir o senso físico aos factores exponenciais do primeiro membro. Vemos que os factores observados em (6.6) são responsáveis pela modificação do espectro devido a transferência parcial das paredes dos poços.

A análise faz crer que desprezando ampliação dos níveis energéticos em subbandas consegue-se reduzir a equação (6.6), para a forma correspondente aos poços independentes, cujas paredes tornam-se semi-permeáveis devido a sua transferência parcial. Os gráficos qualitativos de energia são dados pela fig.7 (estes foram deslocados em direcção vertical para acentuar o facto de que se trata de poços independentes).

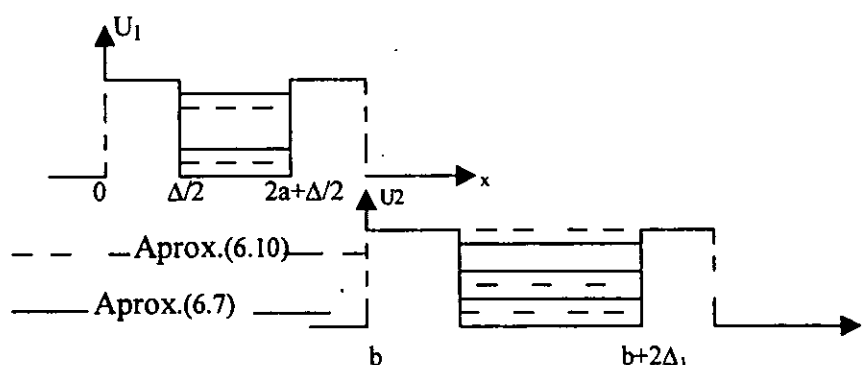


Fig. 7 Esquema qualitativo dos níveis estacionários em poços independentes.

Em cada um dos gráficos de forma qualitativa são dados os respectivos níveis, a aproximação expressa pela equação (6.7) e os níveis modificados. Conforme a aproximação (6.10) para poder encontrar novas posições dos níveis energéticos modificados por transferência das paredes, aplicamos o método que permite controlar as aproximações e identificar cada uma das aproximações consecutivas em termos da teoria de perturbação. Como este método será aplicado para encontrar soluções aproximadas a equação (6.6), introduzimos as funções $G_1(E)$ e $G_0(E)$, que são definidas por :

$$G_1(E) = \frac{G_0(E)}{1 + G_0(E)e^{-2\chi\Delta}} \quad (6.11)$$

$$G_0(E) = \frac{2\chi k \operatorname{ctg} 2ka - (\chi^2 - k^2)}{2\chi k \operatorname{ctg} 2ka + (\chi^2 - k^2)} \quad (6.12)$$

A partir da definição (6.12), observamos que a equação (6.10) é equivalente a:

$$1 + G_0(E)e^{-2\chi\Delta} = 0 \quad (6.13)$$

Então, as soluções da equação (6.10) determinam os pólos da grandeza $G_1(E)$, definida em função da energia "E". Por sua vez, da equação (6.7) e definição (6.12), concluímos que as soluções imperturbadas correspondem aos pólos da função $G_0(E)$; com efeito, o numerador desta função é finito para todos os "ka" que são diferentes de " πn " onde $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Portanto, os pólos só aparecem em pontos correspondentes aos zeros do denominador. No entanto, anulando o denominador da função $G_0(E)$ obtém-se a equação (6.7), assim se confirma a conclusão tirada acima

em relação aos pólos da função $G_0(E)$. Então, o denominador é função par em relação ao parâmetro "k". A equação (6.7) possui "N" soluções correspondentes ao intervalo de energia $[0, U_n]$; por isso, em relação ao numerador é válida a aproximação polinomial, isto é, o denominador é proporcional ao produto $(k^2 - k_1^2)(k^2 - k_2^2) \dots (k^2 - k_N^2)$. Como " $k^2 \sim E$ ", este produto pode ser expresso em função de energia de tal modo que $(E - E_{01})(E - E_{02}) \dots (E - E_{0N})$. Daí conclui-se que deve ser válida a representação:

$$G_0(E) \sim [(E - E_{01})(E - E_{02}) \dots (E - E_{0N})]^{-1} \quad (6.14)$$

Se for aplicado o teorema de decomposição por frações simples da relação (6.14), obtém-se:

$$G_0(E) = \sum_{r=1}^N \frac{A_{r0}}{E - E_{r0}} \quad (6.15)$$

Os coeficientes " A_r ", são encontrados igualando definições (6.12) - (6.15) e integrando ao longo do contorno infinitesimal dado na fig.8.

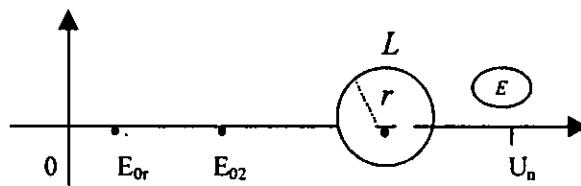


Fig.8 Campo de contorno infinitesimal.

Usando o teorema de Cauchy[34], obtém-se:

$$A_{r0} = \left\{ \frac{d}{dk} \left[\frac{\cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka}{\cos 2ka - \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka} \right] \frac{dk}{dE} \right\}_{E=E_{r0}}^{-1} \quad (6.16)$$

substituindo $E = E_{r0}$, tendo em conta a equação (6.8) depois de calcular as derivadas resulta que:

$$A_{r0} = - \frac{8E_{r0} \chi_r^3 k_r \operatorname{ctg} 2k_r a}{(\chi_r^2 + k_r^2)^2 (1 + \chi_r a)} \quad (6.17)$$

Considerando os cálculos aproximados e as equações (6.13), (6.15) e (6.17) obtém-se a equação mais cômoda seguinte:

$$1 - \sum_{r=0}^N \frac{8E_{r0} \chi_r^3 k_r e^{-2\chi_r \Delta} \operatorname{ctg} 2k_r a}{(E - E_{r0})(\chi_r^2 + k_r^2)^2 (1 + \chi_r a)} = 0. \quad (6.18)$$

O factor $e^{-2\chi \Delta}$ foi inserido dentro da soma, porque cada um dos aditivos tem um valor essencial em pontos correspondentes a energia "E_{r0}". Então, a equação (6.18) pode ser resolvida por via das aproximações consecutivas, pois, inclui a perturbação proporcional ao factor $e^{-2\chi \Delta}$. Os cálculos directos permitem verificar que em relação a energia, a resolução da equação (6.18) conduz a série peculiar à teoria de perturbação. Assim sendo, a correcção da primeira ordem tem a forma:

$$E_r = E_{r0} + \frac{8E_{r0} \chi_r^3 k_r e^{-2\chi_r \Delta} \operatorname{ctg} 2k_r a}{(\chi_r^2 + k_r^2)^2 (1 + \chi_r a)} \quad (6.19)$$

A primeira correcção é proporcional ao factor $e^{-2\chi \Delta}$ que tem senso de transferência das paredes, como a equação (6.10) foi modificada para fórmula (6.18), adequada à teoria de perturbação, então, pode-se dizer que a correcção da segunda ordem deve ser proporcional a $e^{-4\chi \Delta}$. Com efeito, uma partícula entrando dentro da barreira potencial deve percorrê-la duas vezes antes de regressar ao poço.

O caminho percorrido dentro da barreira torna-se duas vezes maior, isto origina o factor $e^{-4\chi \Delta}$. Esta conclusão vai de acordo com a teoria de perturbação, pelo que a correcção da segunda ordem é proporcional ao factor em causa. Então, esta correcção é pelo menos de "e²" vezes menor que a correcção da primeira ordem, determinada pela equação (6.19).

A análise limita-se a consideração de aproximação linear em relação as soluções da equação (6.10). Estabelecidas as soluções aproximadas desta equação, podem ser encontradas as soluções da equação secular (6.6). Por analogia à relação (6.11) introduzimos a função G(E) em relação a equação (6.6) da seguinte maneira:

$$G(E) = \frac{G_1(E)G_2(E)}{1 - G_1(E)G_2(E)\delta(E)} \quad (6.20)$$

onde G₁(E) e G₂(E) são definidos pela equação (6.11) e função δ(E) é:

$$\delta(E) = 2e^{-2\chi d} (\cos 2k(a - \Delta_1) \cos 2qd) \cdot \left\{ \left(\cos 2ka - \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \sin 2ka \right) \left(\cos 2k\Delta_1 - \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \sin 2k\Delta_1 \right) \right\}^{-1} \quad (6.21)$$

As soluções da equação (6.6) coincidem com os pólos da função $G(E)$ que se determinam pela equação:

$$1 - G_1(E)G_2(E)\delta(E) = 0. \quad (6.22)$$

A cada uma das funções $G_1(E)$ próximo dos seus pólos são apresentadas de modo análogo a equação (6.15), isto é:

$$G_1(E) = \sum_{r=1}^{N_1} \frac{A_{r1}}{E - E_{r1}}. \quad (6.23)$$

Onde " E_{ri} " são soluções exactas da equação (6.10), estas energias são determinadas pela equação (6.15), em aproximação principal da teoria de perturbação. Portanto, nesta aproximação os coeficientes " A_{ri} ", são escritos de acordo com a equação (6.17), isto é, devem ter a ordem zero em relação a perturbação, para não superar a precisão das séries da teoria de perturbação. Considerando esta observação a equação (6.22) é transformada em:

$$1 - \sum_{r=1}^{N_1} \sum_{p=1}^{N_2} \frac{A_{r01} A_{p02} \delta_{rp}}{(E - E_{r1})(E - E_{p2})} = 0, \quad (6.24)$$

δ_{rp} é uma função que se obtém da equação (6.21), depois de simetrizá-la e aplicando a equação (6.7), a sua transformação é:

$$\delta_{rp} = \frac{1}{2} e^{-(\chi_r + \chi_p)k} \left[1 + \operatorname{tg} 2k_r \operatorname{atg} 2k_p \Delta_1 + \frac{\cos 2qd}{\cos 2k_r \cos 2k_p \Delta_1} \right]. \quad (6.25)$$

A resolução da equação (6.24), faz-se em quadro da teoria de perturbação, assegurando só os coeficientes lineares em relação a perturbação δ_{rp} , havendo a necessidade de distinguir dois casos qualitativamente diferentes.

O primeiro dos quais refere-se aos níveis não degenerados dos poços independentes, isto é, supõe-se que $E_{r01} \neq E_{p02}$ para todos os "r" e "p". Para encontrar a correcção relativa a energia " E_r ", o aditivo correspondente separa-se da soma dada na equação (6.24) e resulta:

$$1 - \frac{A_{r01}}{E - E_{r1}} \sum_{p=1}^{N_2} \frac{A_{p02} \delta_{rp}}{E - E_{p2}} - \sum_n' \sum_p \frac{A_{n01} A_{p02} \delta_{np}}{(E - E_{n1})(E - E_{p2})} = 0, \quad (6.26)$$

onde Σ' significa que desta soma destaca-se um aditivo para " $n = r$ ". O último termo da equação (6.26) origina a correcção da segunda ordem e o penúltimo aditivo é responsável pela correcção da ordem linear, consequentemente tem-se:

$$\tilde{E}_{r1} = E_{r1} + \sum_{p=1}^{N_2} \frac{A_{r01} A_{p02} \delta_{rp}}{E_{r1} - E_{p2}}, \quad (6.27)$$

$$\tilde{E}_{p2} = E_{p2} + \sum_{r=1}^{N_1} \frac{A_{r01} A_{p02} \delta_{rp}}{E_{p2} - E_{r1}}. \quad (6.28)$$

Entretanto, os níveis " E_{r01} " e " E_{p02} " podem ser degenerados. A degeneração sistemática sucede quando as larguras dos poços são iguais entre si, " $a = \Delta_1$ ". Mas também esta degeneração pode ser accidental quando os parâmetros " a " e " Δ_1 " satisfazem a condição $\Delta_1 = a + \pi n / k_r$; onde " n " é um número inteiro e " k_r " é o vector de onda correspondente a energia dos níveis degenerados. No entanto, em ambos casos o nível " E_{r0} " é duplamente degenerado. Se o nível for degenerado em equação (6.24) deve-se separar apenas dois aditivos, obtendo-se:

$$1 - \frac{A_{r01}^2 \delta_{r1}}{(E - E_r)^2} = 0. \quad (6.29)$$

Daí resulta que os autovalores de energia respectiva aos níveis degenerados são:

$$E_{r1} = E_r + A_{r01} \sqrt{\delta_{rr}}, \quad (6.30)$$

$$E_{r2} = E_r - A_{r01} \sqrt{\delta_{rr}}. \quad (6.31)$$

Conforme as relações (6.30) e (6.31) conclui-se que os níveis degenerados se tornam desintegrados devido as transições do electrão de uma célula para outra.

Substituindo as fórmulas (6.17), (6.19) em relações (6.27) e (6.28) obtém-se os seguintes resultados finais:

$$\tilde{E}_r = E_{r0} + \Delta E_r + I_r (1 - \cos 2qd) \quad (6.32)$$

$$\tilde{E}_p = E_{p0} + \Delta E_p + I_p (1 - \cos 2qd) \quad (6.33)$$

Nestas relações E_{r0} e E_{p0} determinam por si as aproximações de ordem zero, ΔE_r e ΔE_p correspondem ao deslocamento dos níveis devido a transferência das barreiras e efeito de túnel. De acordo com a consideração feita em aproximação linear em relação a ΔE_r e ΔE_p obtém-se as formas explícitas:

$$\Delta E_r = -\frac{4E_{r0}\chi_r^2(\chi_r^2 - k_r^2)}{(\chi_r^2 + k_r^2)^2(1 + \chi_r a)} \cdot e^{-2\chi_r \Delta} + \sum_{p=1}^{N_2} \frac{16E_{r0}E_{p0}\chi_r^2\chi_p^2(k_r^2 k_p^2 + \chi_r^2 \chi_p^2)}{(\chi_r^2 + k_r^2)^2(1 + \chi_r a)(\chi_p^2 + k_p^2)^2(1 + \chi_p a)} \cdot \frac{e^{-(\chi_r + \chi_p)\Delta}}{E_{r0} - E_{p0}} \quad (6.34)$$

$$\Delta E_p = -\frac{4E_{p0}\chi_p^2(\chi_p^2 - k_p^2)}{(\chi_p^2 + k_p^2)^2(1 + \chi_p a)} \cdot e^{-2\chi_p \Delta} + \sum_{r=1}^{N_1} \frac{16E_{r0}E_{p0}\chi_r^2\chi_p^2(k_r^2 k_p^2 + \chi_r^2 \chi_p^2)}{(\chi_r^2 + k_r^2)^2(1 + \chi_r a)(\chi_p^2 + k_p^2)^2(1 + \chi_p a)} \cdot \frac{e^{-(\chi_r + \chi_p)\Delta}}{E_{p0} - E_{r0}} \quad (6.35)$$

Os últimos aditivos das fórmulas (6.32) e (6.33) correspondem a desintegração dos níveis em sub-bandas energéticas, devido ao efeito de túnel e simetria de translação do filme ao longo do eixo-x. Os parâmetros " I_r " e " I_p " determinam a semi-largura da sub-banda originada pelo nível "r" ou "p" respectivamente:

$$I_r = \sum_{p=1}^{N_2} \frac{8E_{r0}E_{p0}\chi_r^2\chi_p^2 e^{-(\chi_r + \chi_p)\Delta}}{(\chi_r^2 + k_r^2)(1 + \chi_r a)(\chi_p^2 + k_p^2)(1 + \chi_p a)(E_{p0} - E_{r0})} \quad (6.36)$$

$$I_p = \sum_{r=1}^{N_1} \frac{8E_{r0}E_{p0}\chi_r^2\chi_p^2 e^{-(\chi_r + \chi_p)\Delta}}{(\chi_r^2 + k_r^2)(1 + \chi_r a)(\chi_p^2 + k_p^2)(1 + \chi_p a)(E_{r0} - E_{p0})} \quad (6.37)$$

No que concerne aos níveis degenerados das fórmulas (6.17), (6.19), (6.30) e (6.31) resulta:

$$\tilde{E}_{r1} = E_{r0} + \Delta E_{rd} - I_{rd}(1 - \cos qd) \quad , \quad (6.38)$$

$$\tilde{E}_{r2} = E_{r0} + \Delta E_{rd} + I_{rd}(1 - \cos qd) \quad , \quad (6.39)$$

$$\Delta E_{r1/2} = \frac{4E_{r0}\chi_r^2(\chi_r^2 - k_r^2) \cdot e^{-2x_r\Delta}}{(\chi_r^2 + k_r^2)^2(1 + \chi_r a)} + \frac{4E_{r0}\chi_r^2}{(\chi_r^2 + k_r^2)(1 + \chi_r a)} \cdot e^{-x_r\Delta} \quad , \quad (6.40)$$

$$I_{rd} = \frac{4E_{r0}\chi_r^2}{(\chi_r^2 + k_r^2)(1 + \chi_r a)} \cdot e^{-x_r\Delta} \quad . \quad (6.41)$$

Nota-se que o primeiro aditivo da fórmula (6.40) pode ser desprezado devido a sua ordem em comparação com o segundo aditivo desta relação.

7. Discussão dos resultados.

De acordo com os resultados principais deste trabalho expressos pelas fórmulas (6.5), (6.32) e (6.33) constata-se que espectro energético dos electrões dentro do intervalo de energia $[0, u_n]$ consiste de sub-bandas separadas. Em aproximação da segunda correcção da teoria de perturbação especificada no parágrafo(6), a lei de dispersão é proporcional à função "cos2qd"(para o caso não-degenerada) e possui a forma explícita seguinte:

$$E_n(k_y, q) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md_0^2} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + E_{r(p)0} + \Delta E_{r(p)} + I_{r(p)}(1 - \cos 2qd) \quad , \quad (7.1)$$

que resulta da definição (5.3) e das equações (6.32) e (6.33).

Sabe-se que o último aditivo da fórmula (7.1) é responsável sobre o movimento de translação ao longo do eixo-x do filme. Observa-se que a estrutura analítica deste aditivo é idêntica àquela que se obtém em termo do método de ligação forte conhecido da teoria dos sólidos[15]. Por isso o método que foi aplicado para resolver o problema do espectro energético pode ser interpretado como uma das versões da teoria de ligação forte, correspondente a aproximação dos vizinhos mais

próximos. No entanto, tem lugar uma particularidade fundamental que se refere a semi-largura "T" da banda energética. De facto em teoria dos sólidos bem como na maneira de tratar as sub-bandas, este parâmetro determina-se em termos das integrais de descobrimento. Como a energia potencial e as funções de Wannier [15,30], que se usam para os objectivos do método da ligação forte são desconhecidos, a grandeza "T" considera-se como se fosse parâmetro de teoria. Ao contrário disso o nosso tratamento permite encontrar este parâmetro em função explícita dos factores definidos pela forma geométrica do filme e por este meio tirar conclusões quantitativas que se referem a posição e semi-largura das sub-bandas. Ao estabelecer a equivalência entre o método deste trabalho e a teoria da ligação forte abre-se a possibilidade de tratar filmes de superfícies congruentes (FSC) de forma mais geral de superfície, incluindo o relevo bidimensional. Portanto, em relação a lei de dispersão logo pode ser escrita a equação (7.1). Quanto à posição da sub-banda e sua semi-largura deve ser resolvida a equação (4.5). Se for conhecida a forma geométrica do filme, o problema pode ser reduzido para os métodos tradicionais da MQ.

A lei de dispersão (7.1) confirma as previsões preliminares feitas no parágrafo(4), sobre o comportamento das propriedades físicas do FSC. De fórmula (7.1) observa-se que tem lugar a anisotropia extraordinária do espectro dos portadores, pois, um portador efectua o movimento quase-livre ao longo do eixo-y e realiza o movimento respectivo à banda estreita ao longo do eixo-x.

Por isso, espera-se observar a anisotropia essencial de todas as propriedades determinadas em termos da lei de dispersão. Em primeiro lugar trata-se de susceptibilidade magnética (componente de Paiérls [15]) e eléctrica, coeficientes cinéticos tais como: condutibilidade eléctrica, coeficiente diferencial da força termoeléctromotriz que são importantes de ponto de vista de transformação de energia. Para além disso, presume-se que devido às transições entre as sub-bandas varia o comportamento do coeficiente de absorção de luz dentro do intervalo das energias correspondente a extremidade de absorção. A anisotropia do espectro estimula a anisotropia das autofunções respectivas, daí conclui-se que o coeficiente de absorção deve depender também da polarização da luz.

Tanto as conclusões como as propostas acima feitas, para generalizar o método de investigar o espectro electrónico de um filme qualquer com simetria periódica, baseiam-se essencialmente em resolução das equações (5.2) e (5.23). No entanto, a solução da equação (5.23) foi obtida por via dos

métodos aproximados. Por isso, é importante verificar o resultado expresso pela equação (7.1) aplicando resolução exacta da equação secular. A ideia desta resolução é simples e reduz-se aos cálculos numéricos do primeiro membro da equação (5.22) ou (5.23), em função da energia adimensional normalizada de tal modo que " $x = E / u_n$ ".

O programa dos cálculos juntamente com os resultados numéricos podem se ver em anexos (3 e 4), respectivamente. Esses cálculos foram feitos para valores razoáveis dos parâmetros geométricos dos filmes. Depois de calcular o primeiro membro da equação (5.22) torna-se possível a sua resolução gráfica, apresentada pela fig.9.

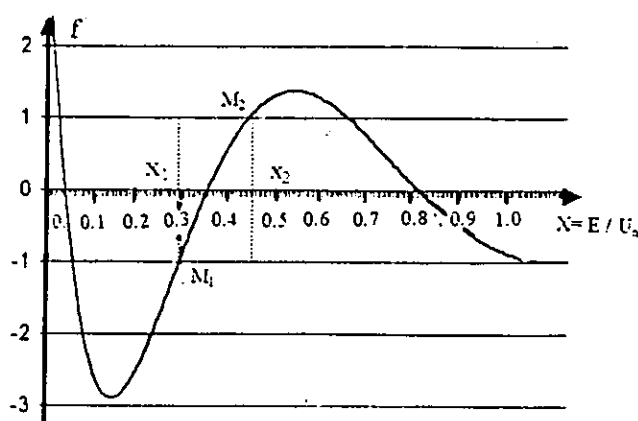


Fig.9 Espectro energético adimensional normalizada.

Observa-se que o segundo membro da equação (5.22) varia dentro do intervalo $[-1,1]$. Daí conclui-se que as soluções devem ser localizadas neste intervalo e para além disso os pontos de intersecção do gráfico com as rectas " $f = -1$ " e " $f = 1$ " determinam as energias respectivas no fundo e tecto da sub-banda (veja os pontos M_1 e M_2 da fig.9). No entanto, dentro do intervalo $[x_1, x_2]$ de acordo com a fig.9, o primeiro membro da equação (5.23) é função linear de energia. Este resultado permiti-nos concluir que a solução da equação (5.23) em aproximação fundamental depende linearmente de " $\cos 2qd$ ". Por este meio os cálculos numéricos confirmam a lei de dispersão (7.1) e todas as conclusões que resultam desta fórmula, isto é, a discussão acima feita. Chama-se atenção ao facto de o programa dos cálculos numéricos permitir realizá-los em relação aos parâmetros arbitrários do filme e encontrar a posição de sub-banda da escala energética, bem como a sua semi-largura. Quanto as investigações dos efeitos concretos a forma aproximada (7.1) é mais preferível pois, assegura a consideração analítica até certa etapa que depende do efeito em estudo.

Sublinha-se que os resultados dos parágrafos (4-6) se referem directamente aos electrões de banda de condução do semiconductor ou metal. Todavia, para as aplicações práticas é importante que seja conhecida a modificação do espectro das lacunas electrónicas. Entretanto, este problema é mais difícil pois, dum modo geral a banda de valência dos semicondutores é degenerada. Por isso a função de onda em equação (5.2) torna-se policomponente e a equação de Schödinger só pode ser resolvida por via dos métodos numéricos.

No entanto, segundo o artigo [35] para assegurar a investigação pelo menos semi-quantitativa a degeneração pode ser considerada como se fosse desprezível. Ao desprezar a degeneração se obtém equação semelhante a (5.2), para cada um dos componentes da função de onda.

Portanto, em relação as lacunas electrónicas tornam-se válidos todos os resultados deste trabalho, com duas alterações apenas. Primeiro, faz-se a substituição da massa eficaz da lacuna em vez da massa do electrão. Segundo, varia o sentido da contagem da energia.

Tomando em conta esta observação pode ser reproduzido o espectro do FSC constituído dum semiconductor bipolar. Este espectro está apresentado na fig10, onde E_c e E_v são energias correspondentes as extremidades das bandas do semiconductor maciço. Assim sendo, observa-se que a aplicação do FSC permite influir de modo controlado sobre a largura de banda proibida e estrutura dos estados estacionários que ficam dentro desta banda.

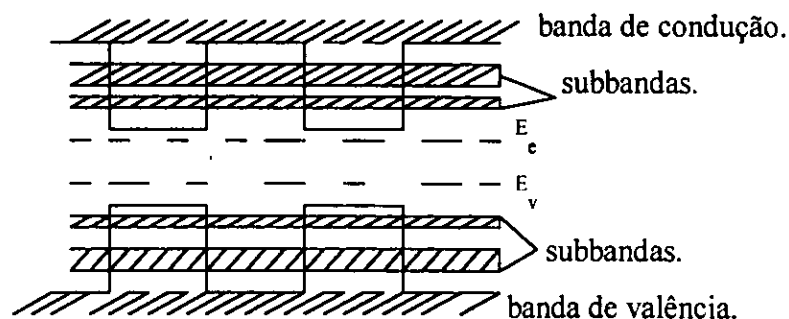


Fig.10 Espectro energético do FSC, dum semiconductor bipolar.

8. Conclusão.

1) As investigações bibliográficas realizadas permitiram verificar que existe um tipo específico de filmes quânticos (FSC). Este tipo de filme possui Hamiltoniano que não inclui o operador não adiabático.

- 2) Nos filmes deste tipo separam-se os movimentos transversal e longitudinal.
- 3) Foi estabelecida a forma geral de energia potencial eficaz correspondente ao movimento longitudinal. A energia eficaz exprime-se em termos da forma geométrica do filme e é sensível em relação aos parâmetros geométricos.
- 4) Das soluções aproximadas de equação secular referente a um modelo do filme resulta que a parte baixa do espectro dos portadores consiste de sub-bandas.
- 5) Conclui-se que a posição do centro de cada uma das sub-bandas bem como as suas semi-larguras possuem a ordem exponencial em função da espessura das barreiras.
- 6) Observa-se que os parâmetros das sub-bandas podem ser alterados e controlados por via dos parâmetros geométricos do filme.
- 7) Conclui-se que os resultados deste modelo podem ser generalizados em relação aos FSC de forma arbitrária mas periódica, pois, o método de solução da equação secular reduz-se a uma das versões da teoria de ligação forte.

9. Recomendações.

Recomenda-se:

- 1) Introduzir os FSC nas tecnologias, devido a possibilidade de prever definitivamente o espectro dos portadores e por causa da simplicidade relativa de criar os filmes deste tipo.
- 2) Usar os FSC para criar as sub-redes planares.
- 3) Continuar a investigar os FSC do ponto de vista dos efeitos concretos tais como efeitos fotoelétricos; fenómenos de transporte.

10. Referências Bibliográficas.

- [1]. Zangwill A. **Physics of Surfaces**. Cambr. Univ. Press. 1988, p438.
- [2]. Gibbs J.W. **The Equilibrium of Meterogeneous Substances**. Collect. Works v.1, 1948, New Haven, Jale.
- [3]. Scheibken J., Germer, Martmann. **Low energy eléctron difraction (LEED)**. Rev.Sci. Inst.,1960, v.31, p112.
- [4]. Pokrovsky V.L., Talapov A.L. **Theory of incommensurate crystal**. 1984, London, Marwood.
- [5]. Jin B.Y., Ketterson J.B. **Advances in Physics**. 1989, v.38, N3,p189.
- [6]. Schmitt-Rint S., Chemla D.S., Miller D.A. **Advances in Physics**. 1989, v.38,N2, p89.
- [7]. Cingolani R., Ploog K. **Advances in Physics**. 1991, v.40,N5, p535.
- [8]. Yoffe A.D. **Advances in Physics**. 1993, v.42,N2, p173.
- [9]. Jain J.K. **Advances in Physics**. 1992, v.41,N2, p105.
- [10]. Ando T., Fauler A., Stern F. **Eléctron properties of Two-dimensional systems**. 1982, New York, Perg. Press.
- [11]. Coutts T.J., Meakin J.D. **Current Topic in Photovoltaics**. 1985, New York, Acad. Press.
- [12]. Lifchitz I.M., Kosevich A.K., Dokl, Akad. Nauk SSSR, 1953, v.91, p795.
- [13]. Kelly M.J., Nicholas R.J. **Rep. Prog. Physics**. 1985, v.48, p1702.
- [14]. Landau L., Lifchitz E. **Mecânica Quântica**. 1985, Moskov, Mir, p294.
- [15]. Ziman J.M. **Principles of the Theory of solids**. 1972, Cambr. Univ. Press.
- [16]. Levdin D.L. **The Tamm surface**. 1972,Toronto.
- [17]. Lifchitz I.M., Kaganov M.I., Kosevich A.K. **Eléctron Theory of Metals**. 1974, New York, Acad. Press.
- [18]. Tawger B.A., Demikhovskii Y.Ya. **Sov. Phys.Usp**. 1969, v.11, p644.
- [19]. Friedman L.J. **Phys. C**. 1984, v.17, p3999.
- [20]. Alfetorov J.I., Shimaev Y.V., Shmartzev Y.M. **Physics and Tecnic Semiconductor**. 1971, v.5, p196.
- [21]. Esaki L. **Proc. Int. Conf. on Semiconductors Heterojunctions and Layered Structura** . Budapest, Akad, Kiado, Bdp. 1971, v.1, p17.
- [22]. Dingle R., Wiegsmam W., Henry C.M. **Phys. Rev. Lett**. 1974, v.33, p827.

- [23]. Hasegawa H. **Quantum Chemistry and Technology in the Mesoscopic Level**. 1994, Tokyo, Komiyama Printing.
- [24]. Notomi M., Nojima S., Okamoto M., Iwamura M., Tamamura T. **Phys. Rev. B**. 1995, v52, p11075.
- [25]. Volcov V.A., Pinskev T.N. **Soviet. Phys. Solid State**. 1971, v.13, p1138.
- [26]. Mc Gurn A., Maradudin A.A. **Phys. Rev. B**. 1984, v.30, p3136.
- [27]. Chaplik A.V., Baskin E.M., Entin M.V. **Soviet. Phys. -JETP**. 1972, v.63, p1072.
- [28]. Ziman J.M. **Modern Quantum Theory**. 1975, New York, Perg. Press.
- [29]. Bonnell D.A. **Scanning Tunneling Microscopy and Spectroscopy**. 1993, Cambridge, VCM Publishers.
- [30]. Born M., Wolf E. **Principles of Optics**. 1959, London, Pergamon.
- [31]. Zeeger R. **Physics of Semiconductors**. 1977, Berlin, Springer Verlag.
- [32]. Flugge S. **Practical Quantum Mechanics T**. 1971, Berlin, Springer Verlag.
- [33]. Colmers W.S. **Intrduciton to Quantum Mechanics**. 1960, New York, MRW.
- [34]. Morse P.M., Feshbach J. **Methods of Theoretical Physics**. 1953, New York, McGraw Mill.
- [35]. Bastard G., Brum J.A. **IEEE. Quant. Eléctron**. 1986,v.22, p1625.
- [36]. Burdeynny V.M., Macamo A., Tchernych V.V. **Electronic States Localised on Geometrical Non-uniformities of Abrupt Heterojunction**. SAIP-43rd Annual Conference (7-10 July 1998), p60.

ANEXOS

ANEXO1.

3. Filme de Espessura Variável e Aproximação Adiabática.

Apresentação dos resultados do cálculo diferencial da equação (3.12).

Lembremos que $\Psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d}$, então:

$$\nabla^2 \Psi_n(z) = \vec{\nabla} \left[\vec{\nabla} \left(\sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \right) \right] \quad (3.a)$$

Também recorda-se que $\Psi_n(z)$ depende de r , através do parâmetro "d" e " ξ_1 ", pois:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \left[\sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \right] &= -\frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \vec{\nabla} d \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \\ &+ \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{z - \xi_1}{d} \right) \cdot \pi n \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d}, \end{aligned} \quad (3.b)$$

mas $\vec{\nabla} \left[\frac{z - \xi_1}{d} \right] = -\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} - \frac{z - \xi_1}{d^2} \vec{\nabla} d$, onde "z" não depende de r .

Pois das equações (3.b) e (3.a) obtêm-se:

$$\nabla^2 \Psi_n(z) = \vec{\nabla} \left[-\frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \vec{\nabla} d \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{z - \xi_1}{d} \right) \cdot \pi n \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \right] \quad (3.c)$$

Para simplificar o cálculo diferencial da fórmula diferencial (3.c), subdividi-mo-la em dois aditivos, que são:

$$\begin{aligned} A_1 &= 3 \frac{\sqrt{2}}{4} d^{-3/2} \left(\vec{\nabla} d \right)^2 \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} - \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \nabla^2 d \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \vec{\nabla} d \cdot \\ &\cdot \pi n \cdot \frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \vec{\nabla} d \cdot \pi n \cdot \frac{(z - \xi_1)}{d^2} \cdot \vec{\nabla} d \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d}, \end{aligned} \quad (3.d)$$

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \vec{\nabla} d \cdot \pi n \cdot \frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \vec{\nabla} d \cdot \pi n \cdot \frac{(z - \xi_1)}{d^2} \cdot \vec{\nabla} d \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} - \\ &- \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot (\pi n)^2 \cdot \left(\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \right)^2 \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} - 2 \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot (\pi n)^2 \cdot \frac{\vec{\nabla} \xi_1 \cdot (z - \xi_1)}{d^2} \cdot \vec{\nabla} d \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} - \\ &- \sqrt{\frac{2}{d}} (\pi n)^2 \cdot \left[\frac{(z - \xi_1)}{d^2} \vec{\nabla} d \right]^2 \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} - \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \pi n \cdot \frac{\nabla^2 \xi_1}{d} \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \pi n \cdot \frac{\vec{\nabla} \xi_1 \cdot \vec{\nabla} d}{d^2} \cdot \\ &\cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + 2 \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \pi n \cdot \frac{(z - \xi_1)}{d^3} \vec{\nabla} d \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \pi n \cdot \frac{\vec{\nabla} \xi_1 \cdot \vec{\nabla} d}{d^2} \cdot \\ &\cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} - \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \pi n \cdot \frac{(z - \xi_1)}{d^2} \nabla^2 d \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \end{aligned} \quad (3.f)$$

Substituindo as equações (3.d) e (3.f) à equação (3.c), obtém-se a solução da equação (3.10). Pois, esta é substituída à equação (3.11), posteriormente procede-se sua integração, multiplicando-a com o conjugado da função da $\Psi_n(z)$. Mas para tornar a integral simples, pode-se agrupar os termos semelhantes das equações (3.d) e (3.f), nesta integração obtém-se o resultado da equação (3.13).

I. Cálculo dos elementos da diagonal, para $n=1$.

$$1) \quad (z - \xi_1)^0 \left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{3}{4} \sqrt{2} d^{-3/2} (\vec{\nabla} d)^2 - \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \nabla^2 d - \sqrt{\frac{2}{d}} \left(\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \right)^2 (\pi m)^2 \right] \\ \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi m}{d} \end{array} \right\} \quad , \quad (I.1)$$

$$\beta_0 = \frac{3}{4} \sqrt{2} d^{-3/2} (\vec{\nabla} d)^2 - \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \nabla^2 d - \sqrt{\frac{2}{d}} \left(\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \right)^2 (\pi m)^2 \quad (I.2)$$

O primeiro componente do integral será :

$$I_0 = \beta_0 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi m}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi l}{d} dz \quad , \quad (I.3)$$

sabe-se que: $\delta_n = \begin{cases} 0, n \neq l \\ 1, n = l \end{cases} ; \quad x = z - \xi_1 ; \quad dx = dz . \quad (I.4)$

$$I_0 = \beta_0 \frac{2}{d} \int \text{sen} \pi m \frac{x}{d} \cdot \text{sen} \pi l \frac{x}{d} dx = \beta_0 \delta_n \quad (I.5)$$

$$2) \quad (z - \xi_1)^1 \left\{ \left[3\sqrt{2} d^{-7/2} \vec{\nabla} d \vec{\nabla} d - \sqrt{2} d^{-5/2} \nabla^2 d \right] \cdot \pi m \cdot \cos \frac{(z - \xi_1) \pi m}{d} \right\} \quad , \quad (I.6)$$

$$\beta_1 = \left(3\sqrt{2} d^{-7/2} \vec{\nabla} d \vec{\nabla} d - \sqrt{2} d^{-5/2} \nabla^2 d \right) \cdot \pi m \quad (I.7)$$

O segundo componente do integral será :

$$I_1 = \beta_1 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{d_0+\xi_2} (z - \xi_1) \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi m}{d} dz \quad , \quad (\text{I.8})$$

$$\begin{aligned} I_1 &= \beta_1 \frac{2}{d} \int_0^d x \cdot \cos \frac{\pi x n}{d} \cdot \text{sen} \frac{\pi x m}{d} dx = \\ &= \frac{\beta_1}{d} \left[-\frac{d^2}{2\pi n} \cdot \cos 2\pi n + \left(\frac{d}{2\pi m}\right)^2 \cdot \text{sen} 2\pi m \right] = -\beta_1 \frac{d}{2\pi m} \quad . \end{aligned} \quad (\text{I.9})$$

$$3) \quad (z - \xi_1) \left[-2\sqrt{2}d^{-1/2} (\pi m)^2 \vec{\nabla} \xi_1 \vec{\nabla} d \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi m}{d} \right] \quad , \quad (\text{I.10})$$

$$\beta_2 = -2\sqrt{2}d^{-1/2} \vec{\nabla} \xi_1 \vec{\nabla} d (\pi m)^2 \quad . \quad (\text{I.11})$$

O terceiro componente do integral será :

$$I_2 = \beta_2 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{d_0+\xi_2} (z - \xi_1) \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi m}{d} dz \quad , \quad (\text{I.12})$$

$$I_2 = \beta_2 \frac{2}{d} \int_0^d x \cdot \text{sen}^2 \frac{\pi x n}{d} \cdot dx = \frac{\beta_2}{d} \left[\frac{d^2}{2} - \frac{d^2}{2\pi n} \text{sen} 2\pi n - \left(\frac{d}{2\pi m}\right)^2 \cos 2\pi m + \left(\frac{d}{2\pi m}\right)^2 \right] = \frac{\beta_2 d}{2} \quad . \quad (\text{I.13})$$

$$4) \quad (z - \xi_1)^2 \left[-\sqrt{2}d^{-1/2} (\pi n)^2 \left(\vec{\nabla} d\right)^2 \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \right] \quad , \quad (\text{I.14})$$

$$\beta_3 = -\sqrt{2}d^{-1/2} \left(\vec{\nabla} d\right)^2 (\pi n)^2 \quad . \quad (\text{I.15})$$

O quarto componente do integral será :

$$I_3 = \beta_3 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{d_0+\xi_2} (z - \xi_1)^2 \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi m}{d} dz \quad , \quad (\text{I.16})$$

$$I_3 = \beta_3 \frac{2}{d} \int_0^d x^2 \text{sen}^2 \frac{\pi x n}{d} dx = \beta_3 d^2 \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2(\pi n)^2} \cos 2\pi n \right] = \beta_3 d^2 \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right] \quad . \quad (\text{I.17})$$

$$5) \left[\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \sqrt{2d}^{-3/2} \vec{\nabla} d + \frac{\nabla^2 \xi_1}{d} \sqrt{\frac{2}{d}} + \frac{\vec{\nabla} \xi_1 \vec{\nabla} d}{d^2} \cdot 2\sqrt{\frac{2}{d}} \right] \cdot \pi n \cdot \cos \frac{(z - \xi_1) \pi n}{d}, \quad (\text{I.18})$$

$$\beta_4 = \left(\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \sqrt{2d}^{-3/2} \vec{\nabla} d + \frac{\nabla^2 \xi_1}{d} \sqrt{\frac{2}{d}} + \frac{\vec{\nabla} \xi_1 \vec{\nabla} d}{d^2} \cdot 2\sqrt{\frac{2}{d}} \right) \cdot \pi n \quad (\text{I.19})$$

O quinto componente do integral será :

$$I_4 = \beta_4 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} \cos \frac{(z - \xi_1) \pi n}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi l}{d} dz, \quad (\text{I.20})$$

$$I_4 = \beta_4 \frac{1}{d} \int_0^d \text{sen} \frac{2\pi x n}{d} dx = \beta_4 \frac{1}{d} \left[-\frac{d}{2\pi n} \cdot \cos 2\pi n + \frac{d}{2\pi n} \right] = 0 \quad (\text{I.21})$$

Somando estes resultados de integração, obtém-se a equação (3.14).

II. Cálculo dos elementos não diagonais, para $n \neq l$.

Usando a seqüência dos cálculos anteriores ter-se-á o seguinte:

$$1) \quad I_0 = \frac{2\beta_0}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi n}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi l}{d} dz, \quad (\text{II.1})$$

$$I_0 = -\frac{\beta_0}{d} \left[\frac{d}{\pi(n+l)} \text{sen}(n+l)\pi - \frac{d}{\pi(n-l)} \text{sen}(n-l)\pi \right] = 0 \quad (\text{II.2})$$

$$2) \quad I_1 = \beta_1 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} (z - \xi_1) \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi n}{d} \cdot \cos \frac{(z - \xi_1) \pi l}{d} dz, \quad (\text{II.3})$$

$$I_1 = \frac{\beta_1}{d} \left[\int_0^d x \cdot \text{sen} \frac{(n+l)\pi x}{d} dx + \int_0^d x \cdot \text{sen} \frac{(n-l)\pi x}{d} dx \right], \quad (\text{II.4})$$

$$I_1 = -\frac{\beta_1 d}{\pi} \left[\frac{(-1)^{n+l}}{n+l} + \frac{(-1)^{n-l}}{n-l} \right] = -\frac{2\beta_1 d}{\pi} \cdot \frac{n}{n^2 - l^2} (-1)^{n+l} \quad (\text{II.5})$$

$$3) \quad I_2 = \beta_2 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} (z - \xi_1)^2 \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi n}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi l}{d} dz, \quad (\text{II.6})$$

$$I_2 = -\frac{\beta_2}{d} \left[\int_0^d x \cos \frac{(n+l)\pi x}{d} dx - \int_0^d x \cos \frac{(n-l)\pi x}{d} dx \right], \quad (\text{II.7})$$

$$I_2 = -\frac{\beta_2}{d} \left[\frac{d^2}{\pi^2(n+l)^2} \cdot \cos(n+l)\pi - \frac{d^2}{\pi^2(n+l)^2} - \frac{d^2}{\pi^2(n-l)^2} \cdot \cos(n-l)\pi + \frac{d^2}{\pi^2(n-l)^2} \right], \quad (\text{II.8})$$

$$I_2 = \frac{\beta_2 d}{\pi^2} \left[\frac{1 - (-1)^{n+l}}{(n+l)^2} - \frac{1 - (-1)^{n-l}}{(n-l)^2} \right]. \quad (\text{II.9})$$

4)
$$I_3 = \frac{2\beta_3}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} (z - \xi_1)^2 \operatorname{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \cdot \operatorname{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi l}{d} dz, \quad (\text{II.10})$$

$$I_3 = -\frac{\beta_3}{d} \left[\int_0^d x^2 \cos \frac{(n+l)\pi x}{d} dx - \int_0^d x^2 \cos \frac{(n-l)\pi x}{d} dx \right], \quad (\text{II.11})$$

$$I_3 = -\frac{\beta_3}{d} \left[\frac{2d^3}{\pi^2(n+l)^2} \cos(n+l)\pi - \frac{2d^3}{\pi^2(n-l)^2} \cos(n-l)\pi \right], \quad (\text{II.12})$$

$$I_3 = -\frac{2\beta_3 d^2}{\pi^2} \left[\frac{(-1)^{n+l}}{(n+l)^2} - \frac{(-1)^{n-l}}{(n-l)^2} \right] = \frac{8\beta_3 d^2}{\pi^2} (-1)^{n+l} \cdot \frac{nl}{(n^2 - l^2)^2}. \quad (\text{II.13})$$

5)
$$I_4 = \frac{2\beta_4}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} \operatorname{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi l}{d} dz, \quad (\text{II.14})$$

$$I_4 = \frac{\beta_4}{d} \left[\int_0^d \operatorname{sen} \frac{(n+l)\pi x}{d} dx + \int_0^d \operatorname{sen} \frac{(n-l)\pi x}{d} dx \right], \quad (\text{II.15})$$

$$I_4 = \frac{\beta_4}{d} \left[-\frac{d}{\pi(n+l)} \cdot \cos(n+l)\pi + \frac{d}{\pi(n+l)} - \frac{d}{\pi(n-l)} \cdot \cos(n-l)\pi + \frac{d}{\pi(n-l)} \right], \quad (\text{II.16})$$

$$I_4 = \frac{\beta_4}{\pi} \left[\frac{1 - (-1)^{n+l}}{n+l} + \frac{1 - (-1)^{n-l}}{n-l} \right]. \quad (\text{II.17})$$

Somando estes resultados de integração, obtém-se a equação (3.15).

ANEXO2.

5. Dedução da equação secular.

Para simplificar a dedução tomamos o produto das matrizes de transferência com seguintes elementos:

$$\hat{T}(k; -b; -d) = \hat{T}(k; b; d) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{11} \end{pmatrix}, \quad (5.a)$$

$$\hat{T}(\chi; -b; -a) \cdot \hat{T}(k; -a; a) \cdot \hat{T}(\chi; a; b) = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}, \quad (5.b)$$

$$\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi ch \chi \Delta & -sh \chi \Delta \\ -\chi^2 sh \chi \Delta & \chi ch \chi \Delta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} k \cos 2ka & -sen 2ka \\ k^2 sen 2ka & k \cos 2ka \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \chi ch \chi \Delta & -sh \chi \Delta \\ \chi^2 sh \chi \Delta & \chi ch \chi \Delta \end{pmatrix}, \quad (5.c)$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k \cos k\Delta_1 & -sen k\Delta_1 \\ k^2 sen k\Delta_1 & k \cos k\Delta_1 \end{pmatrix}. \quad (5.d)$$

Então, substituindo estas relações à equação (5.21), a matriz determinante apresentar-se-á de tal modo:

$$\left\| \frac{1}{k} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{11} \end{pmatrix} - \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^2 k^2} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{pmatrix} \right\| = 0 \quad (5.e)$$

Desenvolvendo, o determinante terá seguinte composição :

$$\left\| \begin{array}{cc} \frac{a_{11}}{k} - \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^2 k^2} (b_{11} \cdot a_{11} - b_{12} \cdot a_{21}) & \frac{a_{12}}{k} - \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^2 k^2} (-b_{11} \cdot a_{12} + b_{12} \cdot a_{11}) \\ \frac{a_{21}}{k} - \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^2 k^2} (b_{21} \cdot a_{11} - b_{22} \cdot a_{21}) & \frac{a_{11}}{k} - \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^2 k^2} (-b_{21} \cdot a_{12} + b_{22} \cdot a_{11}) \end{array} \right\| = 0 \quad (5.f)$$

O resultado a encontrar nesta transformação será :

$$\begin{aligned} & \frac{a^2_{11} - a_{21} \cdot a_{12}}{k^2} \cdot \exp(2iqd) + \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^4 k^4} \cdot \\ & \cdot [(b_{11} a_{11} - b_{12} a_{21}) \cdot (b_{22} a_{11} - b_{21} a_{12}) - (b_{12} a_{11} - b_{11} a_{12}) \cdot (b_{21} a_{11} - b_{22} a_{21})] = \\ & = \frac{1}{\chi^2 k^3} \cdot [(b_{22} + b_{11}) \cdot (a^2_{11} + a_{12} a_{21}) - 2a_{11} b_{21} a_{12} - 2a_{11} b_{12} a_{21}] \end{aligned} \quad (5.g)$$

Para tornar o cálculo mais simples, pode se tomar a equação (5.g) em partes, sendo: A parte direita, desta equação depois de substituir pelos elementos equivalentes da matriz (5.d), obtêm-se a equação :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\chi^2 k^3} \cdot [(b_{22} + b_{11}) \cdot (a^2_{11} + a_{12} a_{21}) - 2a_{11} b_{21} a_{12} - 2a_{11} b_{12} a_{21}] = \\ & = \frac{1}{\chi^2 k} \cdot \left[(b_{22} + b_{11}) \cdot \cos 2k\Delta_1 + \left(\frac{b_{21}}{k} - kb_{12} \right) \cdot \text{sen } 2k\Delta_1 \right] \end{aligned} \quad (5.h)$$

Sabe-se que , da equação (5.c), cada elemento de matriz é :

$$\begin{aligned} b_{11} &= b_{22} = \chi^2 k \text{ch } 2\chi\Delta \cdot \cos 2ka + \frac{1}{2}(\chi^3 - \chi k^2) \cdot \text{sh } 2\chi\Delta \cdot \text{sen } 2ka \\ b_{12} &= -\chi k \text{sh } 2\chi\Delta \cdot \cos 2ka + (k^2 \text{sh}^2 \chi\Delta - \chi^2 \text{ch}^2 \chi\Delta) \cdot \text{sen } 2ka \\ b_{21} &= -\chi^3 k \text{sh } 2\chi\Delta \cdot \cos 2ka + (\chi^2 k^2 \text{ch}^2 \chi\Delta - \chi^4 \text{sh}^2 \chi\Delta) \cdot \text{sen } 2ka \end{aligned} \quad (5.i)$$

Separando parte direita da equação (5.h) em dois aditivos e substituir para cada as relações (5.i) obtêm-se

$$\frac{1}{\chi^2 k} (b_{22} + b_{11}) \cdot \cos 2k\Delta_1 = 2 \cdot \left(\text{ch } 2\chi\Delta \cdot \cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \cdot \text{sh } 2\chi\Delta \cdot \text{sen } 2ka \right) \cdot \cos 2k\Delta_1, \quad (5.j)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\chi^2 k} \left(\frac{b_{21}}{k} - kb_{12} \right) \cdot \text{sen } 2k\Delta_1 = \\ & = 2 \cdot \left[\frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \cdot \text{sh } 2\chi\Delta \cdot \cos 2ka - \left(\text{ch}^2 \chi\Delta - \frac{\chi^4 + k^4}{2\chi^2 k^2} \cdot \text{sh}^2 \chi\Delta \right) \cdot \text{sen } 2ka \right] \cdot \text{sen } 2k\Delta_1 \end{aligned} \quad (5.l)$$

Encontradas as soluções dos dois aditivos, substituir à equação (5.h) obtêm-se:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\chi^2 k} \left[(b_{22} + b_{11}) \cdot \cos 2k\Delta_1 + \left(\frac{b_{21}}{k} - kb_{12} \right) \cdot \operatorname{sen} 2k\Delta_1 \right] = \\ & = 2 \cdot \left\{ \left(\operatorname{ch} 2\chi\Delta \cdot \cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \cdot \operatorname{sh} 2\chi\Delta \cdot \operatorname{sen} 2ka \right) \cdot \cos 2k\Delta_1 - \right. \\ & \left. - \left[\frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \cdot \operatorname{sh} 2\chi\Delta \cdot \cos 2ka - \left(\operatorname{ch}^2 \chi\Delta - \frac{\chi^4 + k^4}{2\chi^2 k^2} \cdot \operatorname{sh}^2 \chi\Delta \right) \cdot \operatorname{sen} 2ka \right] \cdot \operatorname{sen} 2k\Delta_1 \right\} . \end{aligned} \quad (5.m)$$

Por analogia e considerando os elementos (5.i) das matrizes, tomando em conta que:

$$\frac{a^2_{11} - a_{21}a_{12}}{k^2} = 1 , \quad (5.o)$$

$$\operatorname{ch}^2 \chi\Delta = \frac{1}{2}(\operatorname{ch} 2\chi\Delta + 1) , \quad (5.p)$$

$$\operatorname{sh}^2 \chi\Delta = \frac{1}{2}(\operatorname{ch} 2\chi\Delta - 1) . \quad (5.q)$$

O membro esquerdo da equação (5.g) será:

$$\begin{aligned} & (a^2_{11} - a_{21}a_{12}) \frac{\exp(2iqd)}{k^2} + \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^4 k^4} [(b_{11}a_{11} - b_{12}a_{21}) \cdot (b_{22}a_{11} - b_{21}a_{12}) - \\ & - (b_{12}a_{11} - b_{11}a_{12}) \cdot (b_{21}a_{11} - b_{22}a_{21})] = \exp(2iqd) + \exp(-2iqd) = 2 \cdot \cos 2qd . \end{aligned} \quad (5.r)$$

Realizadas as operações, substituindo as equações (5.m) e (5.r) à equação (5.g), obtêm-se a equação secular procurada:

$$\begin{aligned} & \left\{ \left(\operatorname{ch} 2\chi\Delta \cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sh} 2\chi\Delta \operatorname{sen} 2ka \right) \cos 2k\Delta_1 - \left[\frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sh} 2\chi\Delta \cos 2ka - \right. \right. \\ & \left. \left. - \left(\operatorname{ch}^2 \chi\Delta - \frac{\chi^4 + k^4}{2\chi^2 k^2} \operatorname{sh}^2 \chi\Delta \right) \operatorname{sen} 2ka \right] \operatorname{sen} 2k\Delta_1 \right\} = \cos 2qd . \end{aligned} \quad (5.s) \Leftrightarrow (5.22)$$

ANEXO3

Programa para o cálculo numérico do primeiro membro da equação (5.22) em função da energia adimensional normalizada.

```

PROGRAM Macamo;
uses printer,crt;
const
  a=2.0E-10;b=5.0E-10;d=2.0E-9;s=5.0E-10;n=1;pi=3.14;

var
  x,y1,y2,y3,y4,fx:real;

begin
  clrscr;

  x:=0.06;
  while x<=1 do
  begin

    y1:=((2*pi*n*s)*sqrt(1-x))/d;
    y2:=((2*pi*n*s*a)*sqrt(x))/(d*(b-a));

    y3:=((2*pi*n*s*(d-b))*sqrt(x))/(d*(b-a));

    y4:=((pi*n*s)*sqrt(1-x))/d;

    fx:=(((exp(y1)+exp(-y1))/2)*cos(y2)+
      (1-2*x)/(2*sqrt(x*(1-x)))*
      ((exp(y1)-exp(-y1))/2)*sin(y2))*cos(y3)+
      (((1-2*x)/(2*sqrt(x*(1-x))))*((exp(y1)-exp(-y1))/2)*
      cos(y2)-(sqr((exp(y4)+exp(-y4))/2)-
      (1-2*x+2*sqr(x))/(2*x*(1-x))*
      sqr((exp(y4)-exp(-y4))/2))*sin(y2))*sin(y3);

    write('x=',x:4:4);write(' y1=',y1:4:4);write(' y2=',y2:4:4);
    write(' y3=',y3:4:4);write(' y4=',y4:4:4);write(' fx=',fx:4:4);

    x:=x+0.005;
    writeln;
    end;
  readln;
  End.

```


ANEXO4

Resultados do cálculo numérico da função de energia adimensional normalizada para valores razoáveis (escolhidos) dos parâmetros geométricos dos filmes, de acordo com o programa em anexo3.

| | | | | | |
|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|------------|
| x=0.0600 | y1=1.5222 | y2=0.2564 | y3=1.9228 | y4=0.7611 | fx=3.4226 |
| x=0.0650 | y1=1.5181 | y2=0.2668 | y3=2.0014 | y4=0.7591 | fx=2.7736 |
| x=0.0700 | y1=1.5141 | y2=0.2769 | y3=2.0769 | y4=0.7570 | fx=2.1720 |
| x=0.0750 | y1=1.5100 | y2=0.2866 | y3=2.1498 | y4=0.7550 | fx=1.6154 |
| x=0.0800 | y1=1.5059 | y2=0.2960 | y3=2.2203 | y4=0.7529 | fx=1.1016 |
| x=0.0850 | y1=1.5018 | y2=0.3052 | y3=2.2886 | y4=0.7509 | fx=0.6285 |
| x=0.0900 | y1=1.4977 | y2=0.3140 | y3=2.3550 | y4=0.7488 | fx=0.1943 |
| x=0.0950 | y1=1.4936 | y2=0.3226 | y3=2.4195 | y4=0.7468 | fx=-0.2032 |
| x=0.1000 | y1=1.4894 | y2=0.3310 | y3=2.4824 | y4=0.7447 | fx=-0.5657 |
| x=0.1050 | y1=1.4853 | y2=0.3392 | y3=2.5437 | y4=0.7426 | fx=-0.8951 |
| x=0.1100 | y1=1.4811 | y2=0.3471 | y3=2.6036 | y4=0.7406 | fx=-1.1931 |
| x=0.1150 | y1=1.4770 | y2=0.3549 | y3=2.6621 | y4=0.7385 | fx=-1.4613 |
| x=0.1200 | y1=1.4728 | y2=0.3626 | y3=2.7193 | y4=0.7364 | fx=-1.7013 |
| x=0.1250 | y1=1.4686 | y2=0.3701 | y3=2.7754 | y4=0.7343 | fx=-1.9148 |
| x=0.1300 | y1=1.4644 | y2=0.3774 | y3=2.8304 | y4=0.7322 | fx=-2.1032 |
| x=0.1350 | y1=1.4602 | y2=0.3846 | y3=2.8843 | y4=0.7301 | fx=-2.2678 |
| x=0.1400 | y1=1.4560 | y2=0.3916 | y3=2.9372 | y4=0.7280 | fx=-2.4101 |
| x=0.1450 | y1=1.4517 | y2=0.3986 | y3=2.9892 | y4=0.7259 | fx=-2.5315 |
| x=0.1500 | y1=1.4475 | y2=0.4054 | y3=3.0403 | y4=0.7237 | fx=-2.6330 |
| x=0.1550 | y1=1.4432 | y2=0.4121 | y3=3.0905 | y4=0.7216 | fx=-2.7161 |
| x=0.1600 | y1=1.4389 | y2=0.4187 | y3=3.1400 | y4=0.7195 | fx=-2.7818 |
| x=0.1650 | y1=1.4346 | y2=0.4252 | y3=3.1887 | y4=0.7173 | fx=-2.8312 |
| x=0.1700 | y1=1.4303 | y2=0.4316 | y3=3.2366 | y4=0.7152 | fx=-2.8654 |
| x=0.1750 | y1=1.4260 | y2=0.4379 | y3=3.2839 | y4=0.7130 | fx=-2.8855 |
| x=0.1800 | y1=1.4217 | y2=0.4441 | y3=3.3305 | y4=0.7108 | fx=-2.8924 |
| x=0.1850 | y1=1.4174 | y2=0.4502 | y3=3.3764 | y4=0.7087 | fx=-2.8870 |
| x=0.1900 | y1=1.4130 | y2=0.4562 | y3=3.4217 | y4=0.7065 | fx=-2.8703 |
| x=0.1950 | y1=1.4086 | y2=0.4622 | y3=3.4665 | y4=0.7043 | fx=-2.8431 |
| x=0.2000 | y1=1.4043 | y2=0.4681 | y3=3.5106 | y4=0.7021 | fx=-2.8063 |
| x=0.2050 | y1=1.3999 | y2=0.4739 | y3=3.5542 | y4=0.6999 | fx=-2.7605 |
| x=0.2100 | y1=1.3954 | y2=0.4796 | y3=3.5973 | y4=0.6977 | fx=-2.7067 |
| x=0.2150 | y1=1.3910 | y2=0.4853 | y3=3.6399 | y4=0.6955 | fx=-2.6454 |
| x=0.2200 | y1=1.3866 | y2=0.4909 | y3=3.6820 | y4=0.6933 | fx=-2.5773 |
| x=0.2250 | y1=1.3821 | y2=0.4965 | y3=3.7236 | y4=0.6911 | fx=-2.5032 |
| x=0.2300 | y1=1.3777 | y2=0.5020 | y3=3.7647 | y4=0.6888 | fx=-2.4235 |
| x=0.2350 | y1=1.3732 | y2=0.5074 | y3=3.8054 | y4=0.6866 | fx=-2.3390 |
| x=0.2400 | y1=1.3687 | y2=0.5128 | y3=3.8457 | y4=0.6843 | fx=-2.2502 |
| x=0.2450 | y1=1.3642 | y2=0.5181 | y3=3.8856 | y4=0.6821 | fx=-2.1575 |
| x=0.2500 | y1=1.3597 | y2=0.5233 | y3=3.9250 | y4=0.6798 | fx=-2.0615 |
| x=0.2550 | y1=1.3551 | y2=0.5285 | y3=3.9641 | y4=0.6776 | fx=-1.9627 |
| x=0.2600 | y1=1.3506 | y2=0.5337 | y3=4.0027 | y4=0.6753 | fx=-1.8615 |
| x=0.2650 | y1=1.3460 | y2=0.5388 | y3=4.0410 | y4=0.6730 | fx=-1.7584 |
| x=0.2700 | y1=1.3414 | y2=0.5439 | y3=4.0790 | y4=0.6707 | fx=-1.6536 |
| x=0.2750 | y1=1.3368 | y2=0.5489 | y3=4.1166 | y4=0.6684 | fx=-1.5478 |
| x=0.2800 | y1=1.3322 | y2=0.5538 | y3=4.1538 | y4=0.6661 | fx=-1.4411 |
| x=0.2850 | y1=1.3276 | y2=0.5588 | y3=4.1908 | y4=0.6638 | fx=-1.3339 |
| x=0.2900 | y1=1.3229 | y2=0.5636 | y3=4.2274 | y4=0.6615 | fx=-1.2266 |
| x=0.2950 | y1=1.3182 | y2=0.5685 | y3=4.2636 | y4=0.6591 | fx=-1.1194 |

| | | | | | |
|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|------------|
| x=0.3000 | y1=1.3136 | y2=0.5733 | y3=4.2996 | y4=0.6568 | fx=-1.0126 |
| x=0.3050 | y1=1.3089 | y2=0.5780 | y3=4.3353 | y4=0.6544 | fx=-0.9065 |
| x=0.3100 | y1=1.3041 | y2=0.5828 | y3=4.3707 | y4=0.6521 | fx=-0.8013 |
| x=0.3150 | y1=1.2994 | y2=0.5874 | y3=4.4058 | y4=0.6497 | fx=-0.6972 |
| x=0.3200 | y1=1.2947 | y2=0.5921 | y3=4.4406 | y4=0.6473 | fx=-0.5945 |
| x=0.3250 | y1=1.2899 | y2=0.5967 | y3=4.4752 | y4=0.6449 | fx=-0.4934 |
| x=0.3300 | y1=1.2851 | y2=0.6013 | y3=4.5095 | y4=0.6426 | fx=-0.3940 |
| x=0.3350 | y1=1.2803 | y2=0.6058 | y3=4.5435 | y4=0.6401 | fx=-0.2965 |
| x=0.3400 | y1=1.2755 | y2=0.6103 | y3=4.5773 | y4=0.6377 | fx=-0.2011 |
| x=0.3450 | y1=1.2706 | y2=0.6148 | y3=4.6108 | y4=0.6353 | fx=-0.1078 |
| x=0.3500 | y1=1.2658 | y2=0.6192 | y3=4.6441 | y4=0.6329 | fx=-0.0169 |
| x=0.3550 | y1=1.2609 | y2=0.6236 | y3=4.6772 | y4=0.6304 | fx=0.0716 |
| x=0.3600 | y1=1.2560 | y2=0.6280 | y3=4.7100 | y4=0.6280 | fx=0.1575 |
| x=0.3650 | y1=1.2511 | y2=0.6323 | y3=4.7426 | y4=0.6255 | fx=0.2409 |
| x=0.3700 | y1=1.2461 | y2=0.6367 | y3=4.7750 | y4=0.6231 | fx=0.3214 |
| x=0.3750 | y1=1.2412 | y2=0.6409 | y3=4.8071 | y4=0.6206 | fx=0.3992 |
| x=0.3800 | y1=1.2362 | y2=0.6452 | y3=4.8391 | y4=0.6181 | fx=0.4741 |
| x=0.3850 | y1=1.2312 | y2=0.6494 | y3=4.8708 | y4=0.6156 | fx=0.5462 |
| x=0.3900 | y1=1.2262 | y2=0.6536 | y3=4.9023 | y4=0.6131 | fx=0.6152 |
| x=0.3950 | y1=1.2212 | y2=0.6578 | y3=4.9336 | y4=0.6106 | fx=0.6813 |
| x=0.4000 | y1=1.2161 | y2=0.6620 | y3=4.9648 | y4=0.6081 | fx=0.7443 |
| x=0.4050 | y1=1.2110 | y2=0.6661 | y3=4.9957 | y4=0.6055 | fx=0.8042 |
| x=0.4100 | y1=1.2059 | y2=0.6702 | y3=5.0265 | y4=0.6030 | fx=0.8611 |
| x=0.4150 | y1=1.2008 | y2=0.6743 | y3=5.0570 | y4=0.6004 | fx=0.9149 |
| x=0.4200 | y1=1.1957 | y2=0.6783 | y3=5.0874 | y4=0.5978 | fx=0.9657 |
| x=0.4250 | y1=1.1905 | y2=0.6823 | y3=5.1176 | y4=0.5953 | fx=1.0133 |
| x=0.4300 | y1=1.1853 | y2=0.6863 | y3=5.1476 | y4=0.5927 | fx=1.0579 |
| x=0.4350 | y1=1.1801 | y2=0.6903 | y3=5.1774 | y4=0.5901 | fx=1.0994 |
| x=0.4400 | y1=1.1749 | y2=0.6943 | y3=5.2071 | y4=0.5874 | fx=1.1378 |
| x=0.4450 | y1=1.1696 | y2=0.6982 | y3=5.2366 | y4=0.5848 | fx=1.1733 |
| x=0.4500 | y1=1.1643 | y2=0.7021 | y3=5.2659 | y4=0.5822 | fx=1.2057 |
| x=0.4550 | y1=1.1590 | y2=0.7060 | y3=5.2951 | y4=0.5795 | fx=1.2352 |
| x=0.4600 | y1=1.1537 | y2=0.7099 | y3=5.3241 | y4=0.5769 | fx=1.2618 |
| x=0.4650 | y1=1.1484 | y2=0.7137 | y3=5.3530 | y4=0.5742 | fx=1.2855 |
| x=0.4700 | y1=1.1430 | y2=0.7176 | y3=5.3817 | y4=0.5715 | fx=1.3063 |
| x=0.4750 | y1=1.1376 | y2=0.7214 | y3=5.4102 | y4=0.5688 | fx=1.3244 |
| x=0.4800 | y1=1.1321 | y2=0.7252 | y3=5.4386 | y4=0.5661 | fx=1.3397 |
| x=0.4850 | y1=1.1267 | y2=0.7289 | y3=5.4669 | y4=0.5633 | fx=1.3523 |
| x=0.4900 | y1=1.1212 | y2=0.7327 | y3=5.4950 | y4=0.5606 | fx=1.3623 |
| x=0.4950 | y1=1.1157 | y2=0.7364 | y3=5.5230 | y4=0.5578 | fx=1.3697 |
| x=0.5000 | y1=1.1102 | y2=0.7401 | y3=5.5508 | y4=0.5551 | fx=1.3745 |
| x=0.5050 | y1=1.1046 | y2=0.7438 | y3=5.5785 | y4=0.5523 | fx=1.3769 |
| x=0.5100 | y1=1.0990 | y2=0.7475 | y3=5.6060 | y4=0.5495 | fx=1.3769 |
| x=0.5150 | y1=1.0934 | y2=0.7511 | y3=5.6334 | y4=0.5467 | fx=1.3745 |
| x=0.5200 | y1=1.0877 | y2=0.7548 | y3=5.6607 | y4=0.5439 | fx=1.3699 |
| x=0.5250 | y1=1.0820 | y2=0.7584 | y3=5.6879 | y4=0.5410 | fx=1.3631 |
| x=0.5300 | y1=1.0763 | y2=0.7620 | y3=5.7149 | y4=0.5382 | fx=1.3541 |
| x=0.5350 | y1=1.0706 | y2=0.7656 | y3=5.7418 | y4=0.5353 | fx=1.3430 |

| | | | | | |
|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|------------|
| x=0.5400 | y1=1.0648 | y2=0.7691 | y3=5.7685 | y4=0.5324 | fx=1.3300 |
| x=0.5450 | y1=1.0590 | y2=0.7727 | y3=5.7952 | y4=0.5295 | fx=1.3150 |
| x=0.5500 | y1=1.0532 | y2=0.7762 | y3=5.8217 | y4=0.5266 | fx=1.2981 |
| x=0.5550 | y1=1.0473 | y2=0.7797 | y3=5.8481 | y4=0.5237 | fx=1.2795 |
| x=0.5600 | y1=1.0414 | y2=0.7833 | y3=5.8744 | y4=0.5207 | fx=1.2591 |
| x=0.5650 | y1=1.0355 | y2=0.7867 | y3=5.9006 | y4=0.5177 | fx=1.2371 |
| x=0.5700 | y1=1.0295 | y2=0.7902 | y3=5.9266 | y4=0.5148 | fx=1.2135 |
| x=0.5750 | y1=1.0235 | y2=0.7937 | y3=5.9526 | y4=0.5118 | fx=1.1883 |
| x=0.5800 | y1=1.0175 | y2=0.7971 | y3=5.9784 | y4=0.5087 | fx=1.1618 |
| x=0.5850 | y1=1.0114 | y2=0.8005 | y3=6.0041 | y4=0.5057 | fx=1.1339 |
| x=0.5900 | y1=1.0053 | y2=0.8040 | y3=6.0297 | y4=0.5026 | fx=1.1047 |
| x=0.5950 | y1=0.9991 | y2=0.8074 | y3=6.0552 | y4=0.4996 | fx=1.0742 |
| x=0.6000 | y1=0.9930 | y2=0.8107 | y3=6.0806 | y4=0.4965 | fx=1.0426 |
| x=0.6050 | y1=0.9867 | y2=0.8141 | y3=6.1059 | y4=0.4934 | fx=1.0099 |
| x=0.6100 | y1=0.9805 | y2=0.8175 | y3=6.1310 | y4=0.4902 | fx=0.9762 |
| x=0.6150 | y1=0.9742 | y2=0.8208 | y3=6.1561 | y4=0.4871 | fx=0.9416 |
| x=0.6200 | y1=0.9678 | y2=0.8241 | y3=6.1811 | y4=0.4839 | fx=0.9060 |
| x=0.6250 | y1=0.9614 | y2=0.8275 | y3=6.2060 | y4=0.4807 | fx=0.8697 |
| x=0.6300 | y1=0.9550 | y2=0.8308 | y3=6.2307 | y4=0.4775 | fx=0.8326 |
| x=0.6350 | y1=0.9485 | y2=0.8341 | y3=6.2554 | y4=0.4743 | fx=0.7948 |
| x=0.6400 | y1=0.9420 | y2=0.8373 | y3=6.2800 | y4=0.4710 | fx=0.7564 |
| x=0.6450 | y1=0.9354 | y2=0.8406 | y3=6.3045 | y4=0.4677 | fx=0.7174 |
| x=0.6500 | y1=0.9288 | y2=0.8438 | y3=6.3289 | y4=0.4644 | fx=0.6779 |
| x=0.6550 | y1=0.9222 | y2=0.8471 | y3=6.3532 | y4=0.4611 | fx=0.6380 |
| x=0.6600 | y1=0.9155 | y2=0.8503 | y3=6.3774 | y4=0.4577 | fx=0.5978 |
| x=0.6650 | y1=0.9087 | y2=0.8535 | y3=6.4015 | y4=0.4544 | fx=0.5572 |
| x=0.6700 | y1=0.9019 | y2=0.8567 | y3=6.4255 | y4=0.4509 | fx=0.5163 |
| x=0.6750 | y1=0.8950 | y2=0.8599 | y3=6.4494 | y4=0.4475 | fx=0.4752 |
| x=0.6800 | y1=0.8881 | y2=0.8631 | y3=6.4733 | y4=0.4441 | fx=0.4340 |
| x=0.6850 | y1=0.8812 | y2=0.8663 | y3=6.4970 | y4=0.4406 | fx=0.3927 |
| x=0.6900 | y1=0.8741 | y2=0.8694 | y3=6.5207 | y4=0.4371 | fx=0.3513 |
| x=0.6950 | y1=0.8671 | y2=0.8726 | y3=6.5443 | y4=0.4335 | fx=0.3100 |
| x=0.7000 | y1=0.8599 | y2=0.8757 | y3=6.5678 | y4=0.4300 | fx=0.2687 |
| x=0.7050 | y1=0.8527 | y2=0.8788 | y3=6.5912 | y4=0.4264 | fx=0.2275 |
| x=0.7100 | y1=0.8455 | y2=0.8819 | y3=6.6145 | y4=0.4227 | fx=0.1865 |
| x=0.7150 | y1=0.8382 | y2=0.8850 | y3=6.6378 | y4=0.4191 | fx=0.1457 |
| x=0.7200 | y1=0.8308 | y2=0.8881 | y3=6.6609 | y4=0.4154 | fx=0.1051 |
| x=0.7250 | y1=0.8233 | y2=0.8912 | y3=6.6840 | y4=0.4117 | fx=0.0648 |
| x=0.7300 | y1=0.8158 | y2=0.8943 | y3=6.7070 | y4=0.4079 | fx=0.0248 |
| x=0.7350 | y1=0.8082 | y2=0.8973 | y3=6.7300 | y4=0.4041 | fx=-0.0148 |
| x=0.7400 | y1=0.8005 | y2=0.9004 | y3=6.7528 | y4=0.4003 | fx=-0.0540 |
| x=0.7450 | y1=0.7928 | y2=0.9034 | y3=6.7756 | y4=0.3964 | fx=-0.0928 |
| x=0.7500 | y1=0.7850 | y2=0.9064 | y3=6.7983 | y4=0.3925 | fx=-0.1311 |
| x=0.7550 | y1=0.7771 | y2=0.9095 | y3=6.8209 | y4=0.3886 | fx=-0.1688 |
| x=0.7600 | y1=0.7691 | y2=0.9125 | y3=6.8435 | y4=0.3846 | fx=-0.2060 |
| x=0.7650 | y1=0.7611 | y2=0.9155 | y3=6.8659 | y4=0.3805 | fx=-0.2426 |
| x=0.7700 | y1=0.7529 | y2=0.9184 | y3=6.8883 | y4=0.3765 | fx=-0.2787 |
| x=0.7750 | y1=0.7447 | y2=0.9214 | y3=6.9107 | y4=0.3724 | fx=-0.3140 |

| | | | | | |
|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|------------|
| x=0.7800 | y1=0.7364 | y2=0.9244 | y3=6.9329 | y4=0.3682 | fx=-0.3487 |
| x=0.7850 | y1=0.7280 | y2=0.9273 | y3=6.9551 | y4=0.3640 | fx=-0.3827 |
| x=0.7900 | y1=0.7195 | y2=0.9303 | y3=6.9772 | y4=0.3597 | fx=-0.4160 |
| x=0.7950 | y1=0.7108 | y2=0.9332 | y3=6.9993 | y4=0.3554 | fx=-0.4485 |
| x=0.8000 | y1=0.7021 | y2=0.9362 | y3=7.0213 | y4=0.3511 | fx=-0.4803 |
| x=0.8050 | y1=0.6933 | y2=0.9391 | y3=7.0432 | y4=0.3466 | fx=-0.5112 |
| x=0.8100 | y1=0.6843 | y2=0.9420 | y3=7.0650 | y4=0.3422 | fx=-0.5414 |
| x=0.8150 | y1=0.6753 | y2=0.9449 | y3=7.0868 | y4=0.3376 | fx=-0.5707 |
| x=0.8200 | y1=0.6661 | y2=0.9478 | y3=7.1085 | y4=0.3330 | fx=-0.5991 |
| x=0.8250 | y1=0.6568 | y2=0.9507 | y3=7.1301 | y4=0.3284 | fx=-0.6267 |
| x=0.8300 | y1=0.6473 | y2=0.9536 | y3=7.1517 | y4=0.3237 | fx=-0.6534 |
| x=0.8350 | y1=0.6377 | y2=0.9564 | y3=7.1732 | y4=0.3189 | fx=-0.6792 |
| x=0.8400 | y1=0.6280 | y2=0.9593 | y3=7.1946 | y4=0.3140 | fx=-0.7041 |
| x=0.8450 | y1=0.6181 | y2=0.9621 | y3=7.2160 | y4=0.3091 | fx=-0.7281 |
| x=0.8500 | y1=0.6081 | y2=0.9650 | y3=7.2373 | y4=0.3040 | fx=-0.7511 |
| x=0.8550 | y1=0.5978 | y2=0.9678 | y3=7.2586 | y4=0.2989 | fx=-0.7732 |
| x=0.8600 | y1=0.5874 | y2=0.9706 | y3=7.2798 | y4=0.2937 | fx=-0.7943 |
| x=0.8650 | y1=0.5769 | y2=0.9735 | y3=7.3009 | y4=0.2884 | fx=-0.8145 |
| x=0.8700 | y1=0.5661 | y2=0.9763 | y3=7.3220 | y4=0.2830 | fx=-0.8337 |
| x=0.8750 | y1=0.5551 | y2=0.9791 | y3=7.3430 | y4=0.2775 | fx=-0.8519 |
| x=0.8800 | y1=0.5439 | y2=0.9819 | y3=7.3640 | y4=0.2719 | fx=-0.8692 |
| x=0.8850 | y1=0.5324 | y2=0.9846 | y3=7.3848 | y4=0.2662 | fx=-0.8855 |
| x=0.8900 | y1=0.5207 | y2=0.9874 | y3=7.4057 | y4=0.2604 | fx=-0.9007 |
| x=0.8950 | y1=0.5087 | y2=0.9902 | y3=7.4264 | y4=0.2544 | fx=-0.9150 |
| x=0.9000 | y1=0.4965 | y2=0.9930 | y3=7.4472 | y4=0.2482 | fx=-0.9283 |
| x=0.9050 | y1=0.4839 | y2=0.9957 | y3=7.4678 | y4=0.2420 | fx=-0.9406 |
| x=0.9100 | y1=0.4710 | y2=0.9985 | y3=7.4884 | y4=0.2355 | fx=-0.9520 |
| x=0.9150 | y1=0.4577 | y2=1.0012 | y3=7.5090 | y4=0.2289 | fx=-0.9623 |
| x=0.9200 | y1=0.4441 | y2=1.0039 | y3=7.5295 | y4=0.2220 | fx=-0.9717 |
| x=0.9250 | y1=0.4300 | y2=1.0067 | y3=7.5499 | y4=0.2150 | fx=-0.9800 |
| x=0.9300 | y1=0.4154 | y2=1.0094 | y3=7.5703 | y4=0.2077 | fx=-0.9874 |
| x=0.9350 | y1=0.4003 | y2=1.0121 | y3=7.5906 | y4=0.2001 | fx=-0.9939 |
| x=0.9400 | y1=0.3846 | y2=1.0148 | y3=7.6109 | y4=0.1923 | fx=-0.9993 |
| x=0.9450 | y1=0.3682 | y2=1.0175 | y3=7.6311 | y4=0.1841 | fx=-1.0038 |
| x=0.9500 | y1=0.3511 | y2=1.0202 | y3=7.6512 | y4=0.1755 | fx=-1.0074 |
| x=0.9550 | y1=0.3330 | y2=1.0228 | y3=7.6713 | y4=0.1665 | fx=-1.0100 |
| x=0.9600 | y1=0.3140 | y2=1.0255 | y3=7.6914 | y4=0.1570 | fx=-1.0117 |
| x=0.9650 | y1=0.2937 | y2=1.0282 | y3=7.7114 | y4=0.1469 | fx=-1.0124 |
| x=0.9700 | y1=0.2719 | y2=1.0308 | y3=7.7314 | y4=0.1360 | fx=-1.0122 |
| x=0.9750 | y1=0.2482 | y2=1.0335 | y3=7.7513 | y4=0.1241 | fx=-1.0112 |
| x=0.9800 | y1=0.2220 | y2=1.0361 | y3=7.7711 | y4=0.1110 | fx=-1.0092 |
| x=0.9850 | y1=0.1923 | y2=1.0388 | y3=7.7909 | y4=0.0961 | fx=-1.0063 |
| x=0.9900 | y1=0.1570 | y2=1.0414 | y3=7.8107 | y4=0.0785 | fx=-1.0026 |
| x=0.9950 | y1=0.1110 | y2=1.0440 | y3=7.8304 | y4=0.0555 | fx=-0.9980 |