

UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE
FACULDADE DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

FIS-40

TRABALHO DE LICENCIATURA

Absorção da Luz Por Filmes de Superfícies Congruentes

AUTOR:
JOÃO DE LIMA ALBINO JÚNIOR
MAPUTO, AGOSTO DE 2001



**UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE
FACULDADE DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA**

TRABALHO DE LICENCIATURA

Absorção da Luz Por Filmes de Superfícies Congruentes

**SUPERVISOR:
PROF. DOUTOR VOLODYMYR BURDEYNYY
MAPUTO, AGOSTO DE 2001**

Dedicatória

*'A memória de João de Lima Albino
e de
Conceição João de Lima Albino*

Agradecimentos.

Uma vez findo o trabalho resta agradecer a todos que ajudaram-me a torná-lo uma realidade.

Ao Prof. Doutor Burdeynny V. M., meu supervisor, por ter estado sempre comigo, pelas suas palavras sábias o meu sincero e profundo reconhecimento de gratidão.

Ao director do curso Prof. Doutor Inocente Vasco, ao chefe do departamento dr. Hermínio Tembe e ao Prof. Doutor Rogério Utúi pela pela disponibilidade em resolver os problemas surgidos durante o processamento informático dos dados, muito obrigado.

A todos os docentes do departamento de Física, em particular ao prof. Doutor Chernysh V. e ao Prof. Doutor Rakov Y. obrigado por terem apostado em mim.

Aos doutores Vítor Saíde, Genito e Cumbane, pela ajuda por eles prestada obrigado.

Aos doutores Tomo F., Saíde A. O., Sinibaldo, Tomo, Nhanala, Uaissone, Cândida Inês e Cândida Aurora, aos meus colegas Obadias, Jonas, Taela, Tomás, Brizito e Elsídio por todo o apoio prestado ao longo do curso, o meu reconhecimento.

A todo o pessoal da CTA, Etelvina, Otília, Rosa, Baptista, Santos, Saúl, Narciso, o meu agradecimento pelos serviços e ajuda por vós prestados.

A toda a minha família, e em particular à minha mãe, pelos seus ensinamentos, à minha irmã Maria Assunção e esposo por todo o tipo de incentivos e auxílio prestados durante toda a minha formação; ao meu tio Jacinto Albino pela inestimável assistência prestada na fase final do meu curso, à tia Paula Vaz e esposo pela sua amizade, sinceridade e sobretudo por todo o tipo de assistência que me foi dada durante o curso, vai o meu reconhecimento de imensa gratidão.

Aos amigos de infância dr. Constâncio T. , aos candidatos a Engenheiro e a doutor, Cássimo O. e Rábio N. respectivamente, obrigado por serem sempre os mesmos.

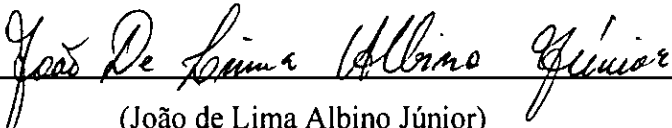
Ao senhor Romão, que pela sua disponibilidade em permitir o livre acesso ao seu PC, permitiu a correcção deste trabalho; muito obrigado.

DECLARAÇÃO DE HONRA

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

Maputo, Agosto de 2001

O autor



(João de Lima Albino Júnior)

Resumo

Pretende-se calcular o coeficiente de absorção da luz em função da frequência, por filmes quânticos com superfícies congruentes(FSC).

Realizaram-se pesquisas bibliográficas referentes às possibilidades tecnológicas, espectro energético dos portadores, efeito de quantificação dimensional(QSE) e efeitos ópticos nos FSC. Foi calculada a amplitude de transições quânticas, deduzidas as regras de selecção e foram consideradas apenas as transições directas permitidas pelas regras de selecção.

É aplicada a aproximação de massa eficaz para cada uma das bandas, a banda de valência(BV) e a banda de condução(BC).

Foi calculado o coeficiente de absorção em função da frequência, a densidade combinada de estados em função da frequência e foram feitas análises desta grandeza perto dos pontos críticos.

Índice

Dedicatória	I
Agradecimentos	II
Declaração de honra	III
Resumo	IV
Introdução	1
1 Teoria geral de absorção da luz	2
2 Operador de perturbação	4
3 Perturbação referente á onda plana monocromática	6
4 Amplitude de transições quânticas	7
5 Transições directas entre as sub-bandas. Regras de selecção	12
6 Form-factor das transições directas	15
7 Densidade combinada de estados em função da frequência	25
8 Comportamento do coeficiente de absorção perto dos pontos críticos	29
9 Discussão de resultados	33
10 Conclusões e Recomendações	34
11 Referências bibliográficas	35
12 Apêndices	37
12.1 Apêndice 1	38
12.2 Apêndice 2	42

Introdução

Até aos anos 50 a investigação de filmes não atingira a sua plenitude mesmo que a teoria já tivesse sido elaborada e prevesse mais possibilidades tecnológicas. Este facto deveu-se á atenção dos investigadores em estudar filmes de metais e de semicondutores maciços de estrutura e simetria cristalina já conhecidas. A tendência de substituir os dispositivos vácuo-electrónicos por outros de semicondutores impulsionou as pesquisas relacionadas com os semicondutores maciços, embora as tecnologias para fabricar filmes com parâmetros exigidos não fosse bastante evoluída. No início dos anos 70, a necessidade de aumentar a velocidade de elaboração de informação e a densidade do seu fluxo mudou esta situação.

De acordo com [1] a passagem para a tecnologia de película que pudesse aumentar a densidade dos elementos básicos e criar novos dispositivos microelectrónicos possibilitou a elaboração de métodos sofisticados de crescimento de cristais tais como; a epitaxia de feixe molecular(M.B.E), a deposição química de vapor(C.V.D) , a deposição física de vapor(P.V.D) a electrodeposição, etc. Destacar que dentre as técnicas de crescimento antes citadas a M.B.E é a que reproduz e controla durante o processo de crescimento, com maior segurança e precisão as especificações da tecnológicas a saber; os parâmetros geométricos dos filmes, a composição e a concentração dos portadores.

O presente trabalho de licenciatura dedica-se ao cálculo do coeficiente de absorção da luz em função da frequência, num modelo de filmes, os FSC com espessuras variáveis.

Uma vez conhecido o coeficiente de absorção em função da frequência pode-se obter outros parâmetros importantes dos filmes tais como; a permissividade dieléctrica em função da frequência $\epsilon(\omega)$, os coeficientes de reflexão e de transmissão, o índice de refração, etc.

De acordo com as pesquisas bibliográficas realizadas [2] e [3], uma vez conhecido o coeficiente de absorção em função da frequência , pode-se criar novos dispositivos ou melhorar os já existentes, criar novas estruturas como as heterojunções tensas , sistemas bidimensionais com poços quânticos, composição de filmes estratificadas. Existem também outros dispositivos cujo funcionamento pode rigorosamente ligado ao gás bidimensional de electrões devido ao surgimento dos níveis de

quantificação dimensional. Os MESFET, D-MESFET, lasers para fibras ópticas usados nas telecomunicações, lasers com dupla heteroestrutura e sensores magnéticos.

Enquadrada nos esforços que o departamento de Física da UEM na área de energia solar está a realizar, a presente tese de licenciatura insere-se no projecto denominado “Investigação das Propriedades e Modelação Computacional dos Sistemas Físicos” com vista a prognosticar as propriedades dos materiais com o objectivo da transformação da energia e os resultados desta podem ser uma contribuição modesta para o mesmo.

No capítulo 1 apresenta-se a teoria geral de absorção da luz, no capítulo 2 é calculado o operador de perturbação e especifica-se o tipo de perturbação usada nesta investigação no capítulo 3. O capítulo 4 é dedicado ao cálculo da amplitude de transição quântica. No capítulo 5 estabelece-se os tipos de transições entre as sub-bandas e apresenta-se as regras de selecção que norteiam as transições quânticas entre as mesmas. No capítulo 6 é calculado o form-factor das transições directas sendo o capítulo 7 dedicado ao calculo da densidade combinada de estados em função da frequência . É feita a análise do comportamento do coeficiente de absorção perto dos pontos críticos no capítulo 8. Faz-se uma discussão de resultados no capítulo 9 e por fim no capítulo 10 são dadas as conclusões gerais e as recomendações deste trabalho. Este trabalho é composto ainda por dois apêndices onde são apresentados todas as informações com maior detalhes cujo enquadramento no texto principal não foi possível.

§1 Teoria geral de absorção da luz

Quando a luz interage com a matéria , pode provocar alterações á nível das propriedades ópticas, electromagnéticas e nos fenómenos de transporte ; e em particular se for considerada a interacção com um cristal semiconductor esta pode induzir transições quânticas entre os estados electrónicos do cristal. Deste ponto de vista pode-se observar a passagem de portadores de carga(electrões) de um estado da banda de valência (BV) para outro da banda de condução (BC) ou o contrário, isto é, a passagem dos portadores da BC para da BV. No caso concreto que é objecto de estudo neste trabalho, os FSC,

podem realizar-se transições quânticas entre as sub-bandas surgidas devido ao QSE. Quando os portadores transitam para outros estados das bandas ou sub-bandas sem passar por um outro estado metastável então a transição é directa e no caso contrário será virtual(indirecta). Existem dois tipos de transições directas a saber; transições verticais (seta 1 da figura 1) quando o quase-impulso do electrão é omitido e a transição não vertical (seta 2 da figura 1) quando é tido em conta o quase-impulso do electrão. Nesta tese estudam-se as transições verticais permitidas pelas regras de selecção que serão posteriormente estabelecidas para o modelo escolhido do filme.

Quando um electrão transita de um nível excitado com um valor de energia maior, para outro nível com energia menor, há libertação de energia. Chama-se a esse fenómeno emissão. A emissão pode ser espontânea, ou estimulada. No caso contrário ao anterior, isto é, ao incremento de energia ao electrão para que este transite de um estado de energia menor para outro de energia maior, chama-se absorção.

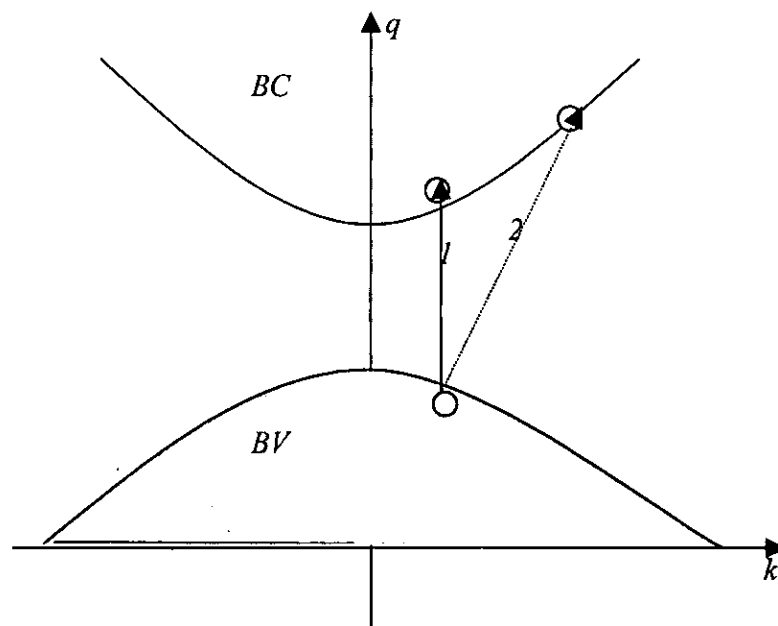


Figura 1 Tipos de transições directas. Transição vertical, seta 1, e não vertical, seta 2.

No caso da interacção da radiação electromagnética de baixa intensidade com a matéria não ocorre alteração a nível dos estados electrónicos desta mas pode estimular transições de electrões do estado inicial i para o estado final f . De acordo com a MQ [21] é necessário considerar a equação de Schrödinger não estacionária, pois as funções de onda dos estados inicial e final dependem do tempo através dos coeficientes de desenvolvimento e para além disso, de acordo com o modelo considerado a radiação electromagnética é uma onda plana que depende da frequência ω e do tempo t

obtendo-se uma equação diferencial linear da primeira ordem em relação aos coeficientes de desenvolvimento $C_{\alpha\beta}^{if}$. Usando a correcção da segunda ordem da teoria de perturbação para o modo eléctrico da onda electromagnética e multiplicando-o pelas funções de onda e sua função de onda complexo conjugada obter-se-á a amplitude de transições quânticas que é apresentada na sua forma final pela relação (6.18). A probabilidade de transição por unidade de tempo (1.1) multiplicada pelas funções de distribuição dos estados inicial e final dá a probabilidade de um electrão passar de um estado qualquer da BV para outro estado da BC e esta fórmula vem sendo dada pela relação (7.1).

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle i | \hat{H}_{int} | f \rangle \right|^2 \delta[E_f - E_i \pm \hbar\omega] \quad (1.1)$$

Nesta relação o sinal $+\hbar\omega$ no argumento da delta função de Dirac representa a probabilidade de emissão e $-\hbar\omega$ a probabilidade de absorção de um electrão respectivamente. O argumento da delta função de Dirac apresenta também a lei de conservação da energia e do momento e por se tratar apenas da absorção será considerado somente o sinal $-$ (negativo) no referido argumento da delta função.

§2 Operador de perturbação

Define-se o campo electromagnético em termos do potencial $\vec{A}(\vec{r}, t)$ que satisfaz ás equações de Maxwell. A intensidade do campo é determinada do modo:

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (2.1)$$

onde o potencial vectorial \vec{A} pode ser submetido a uma condição adicional. Aplicando a condição de Lorentz escreve-se:

$$\text{div} \vec{A} = 0 \quad (2.2)$$

Conforme a MQ e a Ecl para estabelecer a forma explícita do operador de Hamilton referente a acção do campo electromagnético é suficiente substituir o operador $\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A}$ no lugar do operador \vec{P} , obtendo-se a relação:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\vec{r}) \quad (2.3)$$

Tomando em conta a relação de comutação $[\vec{P}, \vec{A}] = -i\hbar \vec{\nabla} \vec{A}$ e a condição de Lorentz (2.2) transforma-se o operador (2.3) para a forma:

$$\hat{H} = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{r}) + \frac{e}{mc} \vec{A} \hat{P} + \frac{1}{2m} \frac{e^2}{c^2} A^2 \quad (2.4)$$

Sendo evidente que os dois últimos aditivos correspondem a perturbação relacionada com a acção do campo electromagnético. Avaliando a relação destes termos, encontra-se:

$$\frac{H_{int2}}{H_{int1}} \approx \frac{e}{c} \frac{|\vec{A}|}{P} \quad (2.5)$$

Determina-se a amplitude do potencial vectorial \vec{A} a partir da fórmula (2.1). É óbvio que :

$$A_0 = \frac{cE_0}{\omega} \quad (2.6)$$

Por sua vez, pode-se exprimir a amplitude E_0 através da densidade do fluxo de energia S pois:

$$S = \frac{c}{8\pi} |E_0|^2 \quad (2.7)$$

Combinando as fórmulas (2.5), (2.6) e (2.7) escreve-se a relação mais cómoda do ponto de vista da avaliação que se pretende estabelecer. Assim resulta:

$$\frac{H_{int2}}{H_{int1}} \approx \frac{c}{\omega P} \left(\frac{8\pi S}{c} \right)^{1/2} \quad (2.8)$$

Substituindo os valores típicos de $S \sim 10^3 \text{ W/cm}^2$ (este valor é dez vezes maior que a densidade de fluxo de energia solar na atmosfera), $\omega \sim 10^{14} \text{ 1/s}$ (frequência referente a luz infravermelha) e $P = \hbar \kappa \approx 10^{-20} \text{ gcm/s}$ (impulso térmico correspondente a temperatura $T=300\text{k}$) verifica-se que :

$$\frac{H_{int2}}{H_{int1}} \approx 10^{-4} \quad (2.9)$$

Então, pode-se com recurso significantemente, desprezar o termo quadrático da perturbação, tendo afinal:

$$H_{int} = -\frac{ie\hbar}{mc} \vec{A} \vec{\nabla} \quad (2.10)$$

§3- Perturbação referente a onda plana monocromática.

Em geral a relação (2.10) é válida para campos electromagnéticos com distribuição espacial e temporal arbitrárias que satisfazem às equações de Maxwell. No entanto, para aplicações práticas é importante conhecer o coeficiente de absorção em função da frequência. Como o potencial vectorial pode ser apresentado sob a forma de integral de Fourier é suficiente prestar atenção a uma só harmónica, isto é, àquela referente a onda plana monocromática de frequência ω . De acordo com a definição:

$$\vec{E} = \vec{e} E_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \quad (3.1)$$

Nesta relação \vec{e} é o vector unitário de polarização, \vec{k} é o vector de onda relacionado com o impulso do fotão \vec{P}_f por via da relação de deBroglie:

$$\vec{P}_f = \hbar \vec{k} \quad (3.2)$$

Das fórmulas (2.1) e (3.1) resulta a forma explícita do operador de perturbação respectivo a onda plana monocromática.

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{e\hbar}{m\omega} E_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} (\vec{e} \cdot \vec{\nabla}) \quad (3.3)$$

É de sublinhar que a definição de onda plana dada pela relação (3.1) corresponde à onda que se propaga num meio ilimitado e uniforme. Neste trabalho pretende-se investigar a absorção pelo filme com fronteiras de forma especial. Por isso é preciso avaliar o papel que o relevo das fronteiras possa desempenhar. Em primeiro lugar, o campo resultante reduz-se à sobreposição da onda plana definida conforme a fórmula (3.1) e as ondas espalhadas pelas irregularidades da superfície. Como as fronteiras são fixas, isto é, estáticas não possuem qualquer grau de liberdade do movimento interno. Então tem lugar o espalhamento de Rayleigh. A intensidade das ondas espalhadas é proporcional ao factor $\left(\frac{\xi}{\lambda}\right)^4$, onde λ é o comprimento de onda e ξ o tamanho característico do centro de espalhamento. Conforme o modelo do filme quântico o valor de ξ em ordem de grandeza é nanométrico. Quanto a λ o seu valor atinge as centenas de nanómetros mesmo que a luz pertença a faixa ultravioleta do espectro das ondas electromagnéticas. Ao tomar para avaliações numéricas $\xi \sim 50\text{nm}$ e $\lambda \sim 400\text{nm}$, verifica-se que o factor em questão é cerca de 10^{-5} , Consequentemente o papel do espalhamento é desprezível. Daí decorre que a forma

explícita do operador de perturbação dada pela relação (3.3) é aplicável para tratar os problemas de absorção da luz por um filme quântico num vasto diapasão de frequências, a saber: desde o ultravioleta ao infravermelho .

Para finalizar o parágrafo presta-se atenção ao vector de polarização \vec{e} . Atendendo á condição de Lorentz (2.2) e a relação (3.1) conclui-se que os vectores \vec{e} e \vec{k} são mutuamente perpendiculares, isto é:

$$\vec{e} \cdot \vec{k} = 0 \quad (3.4)$$

A investigação posterior referir-se-á a dois casos :

- O primeiro é o de que a onda polarizada no plano se propaga ao longo do eixo z. Neste caso $\vec{k} = (0,0,\kappa)$ e da relação (3.4) resulta que o vector da polarização \vec{e} , fica no plano (x,y) possuindo duas componentes e_x e e_y .
- O segundo caso refere-se à onda que se propaga no plano (x,y) . O vector de onda \vec{k} é $\vec{k} = (\kappa_x, \kappa_y, 0)$. De (3.4) , ao vector \vec{e} tem que ser atribuída uma só componente $e_z = 1$.

§4 Amplitude de transição quântica.

Conforme a teoria geral ,os resultados fundamentais da qual foram concentrados no §1, a probabilidade de transição determina-se por meio da amplitude de transição $\langle i | H_{\text{int}} | f \rangle$. É óbvio que o cálculo da amplitude só pode ser feito se forem especificadas as autofunções dos estados entre os quais se efectua a transição quântica. Antes de acertar estas funções é de sublinhar que um dos índices i ou f corresponde ao conjunto de todos os números quânticos que determinam completamente o estado quântico dos portadores. Por sua vez os representantes deste conjunto bem como as autofunções correspondentes podem ser especificados com base na resolução da equação de Schrödinger. A equação referente aos filmes de superfícies congruentes foi resolvida por A. Macamo [1]. Adoptando os resultados deste trabalho conclui-se que o estado do electrão, além do índice de banda energética respectiva ao cristal ideal, determina-se por três números quânticos , a saber, o número referido ao movimento transversal, o número que corresponde ao movimento que se realiza ao longo do eixo x o número que descreve o movimento livre relacionado com o eixo y.

Designemos por $\Psi_{\alpha}^i(\vec{r})$ a autofunção respectiva a α -ésima banda e i -ésimo estado quântico. Como se pretende aplicar métodos bem elaborados para os cristais ideais é conveniente desenvolver a função $\Psi_{\alpha}^i(\vec{r})$ por funções de Bloch[17]. O desenvolvimento proposto pode ser feito pois como se sabe[17], as funções de Bloch criam um conjunto completo de funções ortonormalizadas. Então obtém-se:

$$\Psi_{\alpha}^i(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} C_{\alpha\vec{k}}^i \Psi_{\alpha\vec{k}}(\vec{r}) \quad (4.1)$$

Onde $\Psi_{\alpha\vec{k}}(\vec{r})$ é função de Bloch assim definida [17]:

$$\Psi_{\alpha\vec{k}}(\vec{r}) = U_{\alpha\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (4.2)$$

Quanto aos coeficientes $C_{\alpha\vec{k}}^i$ da expansão (4.1) não precisam de ser especificados uma vez que serão excluídos durante a consideração posterior.

Ao combinar as relações (4.1), (4.2) e a forma explícita do operador \hat{H}_P definida de acordo com a expressão (3.3) obtém-se:

$$\langle \alpha_i | H_P | \beta_f \rangle = \frac{e\hbar E_0 e^{-i\alpha t}}{m\omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'}^{*i} C_{\alpha\vec{k}}^f C_{\beta\vec{k}'}^i \int U_{\alpha\vec{k}} \left[e^{-i\vec{k}\vec{r}} \nabla U_{\beta\vec{k}'} + i e^{-i\vec{k}\vec{r}} U_{\beta\vec{k}'} \right] e^{-i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{\kappa})\vec{r}} d\vec{r} \quad (4.3)$$

Atendendo a periodicidade da função $U_{\alpha\vec{k}}(\vec{r})$ transforma-se a relação (4.3) para a forma que inclui o somatório por vectores \vec{a}_m da rede cristalina e a integração pelo volume Ω_0 da célula elementar resultando:

$$\langle \alpha_i | H_P | \beta_f \rangle = \frac{e\hbar E_0 e^{-i\alpha t}}{m\omega} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', m}^{*i} C_{\alpha\vec{k}}^f C_{\beta\vec{k}'}^i e^{i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{\kappa})\vec{a}_m} \int_{\Omega_0} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{\kappa})\vec{r}} U_{\alpha\vec{k}} \left[e^{-i\vec{k}\vec{r}} \nabla U_{\beta\vec{k}'} + i e^{-i\vec{k}\vec{r}} U_{\beta\vec{k}'} \right] d\vec{r} \quad (4.4)$$

O somatório por m reduz-se ao delta de Cronecker de modo que :

$$\sum_m e^{i(\vec{k}-\vec{k}'-\vec{\kappa})\vec{a}_m} = N \delta_{\vec{k}-\vec{k}'-\vec{\kappa}+\vec{q}_q, 0} \quad (4.5)$$

Onde N é o número total de células elementares, $\vec{\kappa}$ é o vector de onda relacionado com o impulso do fóton, \vec{k} é o vector de onda do electrão e \vec{q}_q é um vector inteiro da rede inversa. Como os vectores \vec{k} e \vec{k}' mantêm-se na primeira zona de Brillouin é permissível atribuir o valor 0 ao vector \vec{q}_q da rede inversa. Importa também realçar que o vector de onda $\vec{\kappa}$ é muitas vezes menor do que os valores

típicos de \vec{k} que entram em jogo durante a absorção da luz. De facto, o valor típico de $|\vec{k}|$ é de $2 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1}$ (correspondente a luz verde). Quanto a $|\vec{k}'|$ o seu valor é compatível, em ordem de grandeza, com o vector de onda respectivo ao impulso térmico do portador, isto é, $|\vec{k}'| \sim \sqrt{\frac{2k_B T m}{\hbar}} \approx 10^9 \text{ m}^{-1}$.

Então, conclui-se que a soma por vectores da rede cristalina definida de acordo com a fórmula (4.5) reduz-se ao factor $N \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$. Sendo assim, é fácil realizar o somatório por \vec{k}' que tem lugar na fórmula (4.4). Vê-se que a função exponencial é igual a um. Portanto, obtém-se:

$$\langle \alpha_i | \hat{H}_P | \beta_f \rangle = \frac{e\hbar E_0 e^{-i\alpha t}}{m\omega} N \sum_{\vec{k}} C_{\alpha\vec{k}}^{*i} C_{\beta\vec{k}}^f \int_{\Omega_0} U_{\alpha\vec{k}}^* (\vec{e} \cdot \vec{\nabla} U_{\beta\vec{k}} + i\vec{e}\vec{k} U_{\beta\vec{k}}) d\vec{r} \quad (4.6)$$

Introduzindo o vector $\vec{P}_{\alpha\beta}(\vec{k})$ conforme a definição :

$$\vec{P}_{\alpha\beta}(\vec{k}) = -\frac{i\hbar}{\Omega_0} \int_{\Omega_0} U_{\alpha\vec{k}}^* \vec{\nabla} U_{\beta\vec{k}} d\vec{r} \quad (4.7)$$

e tomando em conta que as funções $U_{\alpha\vec{k}}(\vec{r})$ são ortogonais, transforma-se a relação (4.6) para a forma:

$$\langle \alpha_i | \hat{H}_P | \beta_f \rangle = \frac{e\hbar E_0 e^{-i\alpha t}}{m\omega} N \Omega_0 \sum_{\vec{k}} C_{\alpha\vec{k}}^{*i} C_{\beta\vec{k}}^f \left[\frac{i}{\hbar} \vec{P}_{\alpha\beta}(\vec{k}) \vec{e} + i\vec{e}\vec{k} \delta_{\alpha\beta} \right] \quad (4.8)$$

A relação (4.8) inclui os coeficientes $C_{\alpha\vec{k}}$ que podem ser expressos em termos das autofunções correspondentes à aproximação de massa eficaz as chamadas funções de Luttinger-Cohn designadas por $\Phi_{\alpha}^i(\vec{r})$. De sublinhar que a forma explícita destas funções, são determinadas completamente através da resolução da equação de Schrödinger referente a aproximação atrás mencionada e decorre dos resultados estabelecidos pelo autor do trabalho [1]. Aplicando as ideias da teoria geral dos sólidos [17] escreve-se:

$$\Psi_{\alpha}^i(\vec{r}) = \sum_m \Phi_{\alpha}^i(\vec{a}_m) \varphi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{a}_m) \quad (4.9)$$

Nesta expansão $\varphi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{a}_m)$ é função de Wannier correspondente a α -ésima banda energética. A função de Wannier também pode ser exprimida através das funções de Bloch por via da série [17].

$$\varphi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{a}_m) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{a}_m} \Psi_{\alpha\vec{k}}(\vec{r}) \quad (4.10)$$

Combinando as relações (4.9) e (10) é fácil encontrar:

$$\Psi_{\alpha}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m,\vec{k}} \Phi_{\alpha}^i(\vec{a}_m) e^{-i\vec{k}\vec{a}_m} \Psi_{\alpha\vec{k}}(\vec{r}) \quad (4.11)$$

Atendendo a que as funções de Bloch criam um sistema completo de autofunções, das relações (4.11) e (4.1) resultam os coeficientes $C_{\alpha\vec{k}}^i$. assim:

$$C_{\alpha\vec{k}}^i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m e^{-i\vec{k}\vec{a}_m} \Phi_{\alpha}^i(\vec{a}_m) \quad (4.12)$$

Daí que os coeficientes exprimem-se em termos das funções $\Phi_{\alpha}^i(\vec{a}_m)$, por meio da fórmula (4.12). Por isso torna-se possível especificar a amplitude dada pela fórmula (4.8) substituindo nestas, as expressões (4.12):

$$\langle \alpha_i | \hat{H}_p | \beta_f \rangle = \frac{e\hbar E_0 e^{-i\omega t}}{m\omega} \Omega_0 \sum_{\vec{k},m,l} \dot{\Phi}_{\alpha}^i(\vec{a}_m) \Phi_{\beta}^f(\vec{a}_l) e^{i\vec{k}(\vec{a}_m - \vec{a}_l)} \left[\frac{i}{\hbar} \vec{P}_{\alpha\beta}(\vec{k}) \vec{e} + i\vec{e}\vec{k} \delta_{\alpha\beta} \right] \quad (4.13)$$

Antes de apresentar o resultado geral deste parágrafo é preciso prestar atenção à algumas particularidades do método de massa eficaz. Um electrão do cristal é submetido a acção de campos potenciais para os quais, em regra, tem lugar os dois tipos qualitativamente diferentes, de comportamento espacial. O primeiro corresponde ao campo que os iões da rede cristalina criam, este campo é periódico com a periodicidade do cristal. O potencial do campo cristalino varia bruscamente dentro de uma só célula elementar. É óbvio que, a medida natural da variação espacial deste potencial em ordem de grandeza, é compatível com a constante da rede cristalina. O segundo tipo de comportamento refere-se aos campos externos, campos criados por impurezas “pouco fundas” e por outra espécie de defeitos. O raio de alcance destes campos devido ao efeito de blindagem é da ordem do raio de Debye-Hukkel, em regra o raio de blindagem é muitas vezes maior do que a constante da rede cristalina. Portanto o potencial em questão varia gradualmente dentro da célula elementar. Conforme a teoria dos sólidos[17] a aproximação de massa eficaz permite excluir o potencial com a variação brusca no espaço, isto é, o potencial cristalino, à custa da modificação da massa do electrão livre. Assim obtém-se a equação de Schrödinger referente a função de Luttinger-Cohn. Esta equação inclui por si o potencial gradual. No entanto a variação espacial das autofunções reflecte de uma certa maneira o comportamento espacial da energia potencial[17]. Dai conclui-se que uma determinada autofunção em termos da aproximação de massa eficaz, varia lentamente na escala da célula elementar.

Quanto aos filmes quânticos, sublinha-se que para além do raio de Debye , entram em jogo os tamanhos lineares das distorções, o período da subrede , etc. Estes atingem as dezenas de nanómetros e superam em muitas vezes a constante da rede cristalina.

A análise pormenorizada do método de massa eficaz acima feita, permite transformar o somatório por vectores da rede cristalina, que se realiza na fórmula (4.13), para a integração por volume através da relação:

$$\sum_m f(\vec{a}_m) \Phi_\alpha^i(\vec{a}_m) = \frac{1}{\Omega_0} \int f(\vec{r}) \Phi_\alpha^i(\vec{r}) d\vec{r} \quad (4.14)$$

Onde $f(\vec{r})$ é uma função suficientemente lisa.

Tomando em conta as relações (4.13) e (4.14) escreve-se o resultado básico deste parágrafo.

$$\langle \alpha_i | \hat{H}_p | \beta_f \rangle = \frac{e\hbar E_0 e^{-i\omega t}}{m\omega\Omega_0} \sum_{\vec{k}} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \Phi_\alpha^* (\vec{r}) \Phi_\beta^f(\vec{r}') e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} \left[\frac{i}{\hbar} \vec{e} \vec{P}_{\alpha\beta}(\vec{k}) + i\delta_{\alpha\beta} \vec{e} \vec{k} \right] \quad (4.15)$$

Como a expansão (4.15) colocar-se-á na base de posterior investigação, torna-se importante verificá-la considerando alguns casos de limite. Neste contexto, concentrar-se-á atenção sobre o caso referente ao cristal ideal pois neste caso, é bem conhecida a amplitude de transição.

A autofunção correspondente a aproximação de massa eficaz reduz-se a onda plana, isto é:

$$\Phi_\alpha^i(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{q}\vec{r}} \quad (4.16)$$

Onde V é o volume do cristal e \vec{q} o quase-vector de onda.

$$\text{Atendendo a que } \frac{1}{V} \int e^{-i(\vec{q}-\vec{k})\vec{r}} d\vec{r} = \delta_{\vec{q}\vec{k}}. \quad (4.17)$$

Transforma-se a relação (4.15) para a forma:

$$\langle \alpha\vec{q} | \hat{H}_p | \beta\vec{q}' \rangle = \frac{e\hbar E_0 e^{-i\omega t}}{m\omega\Omega_0} V \sum_{\vec{k}} \delta_{\vec{q},\vec{k}} \delta_{\vec{k},\vec{q}'} \left[\frac{i}{\hbar} \vec{e} \vec{P}_{\alpha\beta}(\vec{k}) + i\delta_{\alpha\beta} \vec{e} \vec{k} \right] \quad (4.18)$$

depois de se realizar o somatório obtém-se:

$$\langle \alpha\vec{q} | \hat{H}_p | \beta\vec{q}' \rangle = \frac{e\hbar E_0 e^{-i\omega t}}{m\omega} N \delta_{\vec{q}\vec{q}'} \left[\frac{i}{\hbar} \vec{e} \vec{P}_{\alpha\beta}(\vec{q}) + i\delta_{\alpha\beta} \vec{e} \vec{q} \right] \quad (4.19)$$

O resultado exprimido pela expressão (4.19) coincide plenamente com a amplitude de transição referente ao cristal ideal. Daí a conclusão de que a relação (4.15) não contradiz às ideias básicas da teoria e comprovou-se a sua aplicabilidade para tratar os problemas relacionados com a absorção da luz pelo filme quântico.

Resumindo os resultados deste capítulo:

- 1- Foi deduzida a fórmula geral (4.15) respectiva a amplitude de transição.
- 2- Observa-se que a amplitude inclui parâmetros fundamentais do cristal ideal a saber: o momento dipolar de transição $\bar{P}_{\alpha\beta}(\vec{k})$, bem como a informação referente a modificação da amplitude estimulada pelos factores geométricos do filme.
- 3- O resultado (4.15) foi confirmado pela análise de um caso limite correspondente ao cristal ideal.

§5 Transições directas entre as sub-bandas. Regras de selecção.

Neste capítulo estabelece-se a amplitude correspondente as transições entre as sub-bandas originadas pela banda de valência e de condução. Seja α o índice da banda de valência e β o da banda de condução, então o segundo aditivo da equação (4.15) se anulará, reduzindo-se para a forma:

$$\langle vi|\hat{H}_P|cf\rangle = \frac{ieE_0e^{-\omega t}}{m\alpha\Omega_0} \sum_{\vec{k}} \int d\vec{r}d\vec{r}' \Phi_v^*(\vec{r})\Phi_c^f(\vec{r}')e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} \bar{P}_{vc}(\vec{k}) \quad (5.1)$$

De acordo com a definição dada pela expressão (4.7) o vector $\bar{P}_{vc}(\vec{k})$ é uma função monótona com argumento \vec{k} . Sejam os extremos das bandas localizados no ponto $\Gamma(\vec{k}_0=0)$ da zona de Brillouin. Tendo em conta que a aproximação de massa eficaz, em que se baseia esta investigação, só é válida para valores baixos de $|\vec{k}|$ é admissível a expansão do vector $\bar{P}_{vc}(\vec{k})$ em série. Então obtém-se:

$$\bar{P}_{vc}(\vec{k}) \approx \bar{P}_{vc}(0) + e_\alpha \left(\frac{\partial P_{vc}^\alpha}{\partial k_\beta} \right)_0 k_\beta \quad (5.2)$$

De notar que foi aplicada a regra de somatório de Einstein.

O primeiro aditivo de (5.2) é responsável pelas transições chamadas permitidas. Seja este aditivo diferente de zero, conforme os dados experimentais neste caso este factor é dominante na expansão (5.2). Então para as transições permitidas das relações(5.1) e(5.2) decorre:

$$\langle vi|H_P|cf\rangle = \frac{ieE_0e^{-\omega t}}{m\alpha\Omega_0} \bar{P}_{vc}(0) \sum_{\vec{k}} \int d\vec{r}d\vec{r}' \Phi_v^*(\vec{r})\Phi_c^f(\vec{r}')e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} \quad (5.3)$$

Vista a regra de somatório pelo quase-vector de onda \vec{k} :

$\sum_{\vec{k}} \dots = \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}$ e a representação integral da δ -função de Dirac $\frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')} d\vec{k} = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$ da expressão (5.3) resulta:

$$\langle vi | \hat{H}_p | cf \rangle = \frac{ieE_0 e^{-i\alpha t}}{m\omega} \bar{e} \bar{P}_{vc}(0) \int d\vec{r} \Phi_v^* (\vec{r}) \Phi_c^f (\vec{r}) \quad (5.4)$$

Em relação a fórmula (5.4) importa sublinhar que foi feita a transformação da amplitude de transição de modo que esta incluisse o parâmetro fundamental $\bar{P}_{vc}(0)$ e o form-factor relacionado com a especificidade das autofunções da equação de Schrödinger. Para calcular este factor expresso pela integral da expressão(5.4) é preciso acertar os números quânticos bem como as autofunções correspondentes. De acordo com os resultados do trabalho [1] concentrados no apêndice 1, o estado quântico do electrão num FSC, determina o número respectivo ao estado de quantização dimensional, número quântico correspondente ao movimento quase-livre ao longo do eixo y e dois números referentes ao movimento ao longo do eixo da rede relacionada com o relevo periódico das superfícies. Um destes , permite enumerar as sub-bandas e o outro corresponde aos estados quânticos responsáveis pelo movimento de translação ao longo do eixo x (eixo da rede).

Tendo em conta as designações dadas no apêndice 1 escreve-se:

$$\left. \begin{aligned} \Phi_v^i(\vec{r}) &= \left(\frac{2}{Ld_0} \right)^{1/2} e^{ik_y y} \text{sen} \frac{\pi n}{d_0} z \Phi_{v,n,k_y,r,q}(x) \\ \Phi_c^f(\vec{r}) &= \left(\frac{2}{Ld_0} \right)^{1/2} e^{ik'_y y} \text{sen} \frac{\pi m}{d_0} z \Phi_{c,m,k'_y,s,q'}(x') \end{aligned} \right\} \quad (5.5)$$

Observa-se que os números quânticos n, k_y, r e q referem-se ao estado inicial "i" ao passo que m, k'_y, s e q' ao estado final "f". Repara-se também que a função $\Phi_{\alpha,n,k_y,r,q}(x)$ devido a simetria periódica da superrede admite a representação de Bloch, isto é,:

$$\Phi_{\alpha,n,k_y,r,q}(x) = \frac{1}{\sqrt{N_x}} e^{iqx} \chi_{\alpha,n,k_y,r,q}(x) \quad (5.6)$$

Onde N_x é o número de "células" elementares da superrede. Quanto a função $\chi \dots(x)$ é periódica, com período $2d$. Sublinhar ainda que, esta função foi determinada no trabalho [1] sob a forma geral(ver apêndice2)

Atendendo às relações (5.5) e (5.6) transforma-se a integral (5.4) do modo:

$$\int d\vec{r} \Phi_v^{*i}(\vec{r}) \Phi_c^f(\vec{r}) = \frac{2}{Ld_0} \int_0^{d_0} dz \int_{-L/2}^{L/2} dy \int dx e^{i(k_y - k'_y)y} \operatorname{sen} \frac{\pi mz}{d_0} \operatorname{sen} \frac{\pi mz}{d_0} \Phi_{v,n,k_y,r,q}^*(x) \Phi_{c,m,k'_y,s,q}(x) \quad (5.7)$$

Transforma-se a integral referente a x -coordenada de acordo com o teorema de Bloch, a saber, por meio do somatório por vectores inteiros da superrede e de integração por uma célula elementar desta rede. A soma em questão, por analogia com a expressão (4.5) reduz-se ao factor $N_x \delta_{q,q'+b}$. Desprezando o vector inteiro da superrede inversa b , o que é permissível pois q e q' só percorrem valores da primeira zona de Brillouin, vem que:

$$\int dx \Phi_{v,n,k_y,r,q}^*(x) \Phi_{c,m,k'_y,s,q'}(x) = \delta_{qq'} \int_{-d}^d \chi_{vnk_y,rq}^*(x) \chi_{cmk'_y,sq'}(x) dx \quad (5.8)$$

Visto que: $\frac{1}{L} \int dy e^{i(k_y - k'_y)y} = \delta_{k_y k'_y}$ (5.9)

$$\frac{2}{d_0} \int_0^{d_0} \operatorname{sen} \frac{\pi mz}{d_0} \operatorname{sen} \frac{\pi mz}{d_0} dz = \delta_{nm} \quad (5.10)$$

e combinando as relações desde (5.7) até (5.10) encontra-se:

$$\langle vi | \hat{H}_p | cf \rangle = \frac{ieE_0 e^{-iax}}{m\omega} \bar{e} \bar{P}_{vc}(0) \delta_{k_y k'_y} \delta_{nm} \delta_{qq'} \int_{-d}^d \chi_{vnk_y,rq}^*(x) \chi_{cmk'_y,sq'}(x) dx \quad (5.11)$$

A relação (5.11) permite estabelecer algumas regras de selecção, das transições quânticas responsáveis pela absorção da radiação electromagnética na aproximação dipolar da teoria de perturbação. Da fórmula (5.11) observa-se que a amplitude de transição não se anula se forem satisfeitas simultaneamente as três seguintes condições:

$$n=m \quad k_y=k'_y \quad q=q' \quad (5.12)$$

A primeira das regras de selecção (5.12) leva a concluir que a absorção da luz só se realiza, no caso de a transição do electrão entre as sub-bandas corresponder ao mesmo valor do número quântico de quantização dimensional. Quanto as restantes regras, fazem com que o quase-vector de onda seja invariável devido a transição. Conforme a terminologia habitual, as transições seleccionadas pelas condições (5.12) denominam-se directas ou verticais. As regras de selecção que foram aqui discutidas, estão relacionadas com a forma explícita das autofunções, propriedades de simetria periódica e o facto de que o quase-vector de onda seja desprezível. Entretanto, não há razões gerais deste tipo que permitam estabelecer regras de selecção correspondentes às sub-bandas r e s originadas pelo movimento de translação ao longo do eixo x da superrede. A única regra de selecção neste contexto

resulta da lei de conservação da energia . Para tirar conclusões mais concretas é preciso fazer o cálculo da integral de recobrimento da fórmula (5.11), que serão apresentados no parágrafo posterior.

Resumindo os resultados principais deste capítulo:

1- Foi deduzida a fórmula (5.4) respectiva a amplitude de transições permitidas .Por via desta relação comprovou-se que a amplitude de transições contem dois factores um dos quais $\bar{P}_{ve}(0)$, correspondente ao cristal ideal ao passo que o outro é responsável por efeitos dimensionais.

2- Estabeleceram-se regras de selecção dadas pelas relações(5.12). Observa-se que não existem regras especiais de selecção para as transições entre as sub-bandas r e s excepto aquela que decorre da lei de conservação da energia.

§6- Form-factor das transições directas.

Segundo a relação (5.12) a amplitude de transição vertical inclui por si o factor:

$$\Lambda_{nsr}(q) = \int_{-d}^{d} \chi_{nsq}(x) \chi_{nrq}(x) dx \quad (6.1)$$

Chamado form-factor. Conforme a definição (6.1) $\Lambda_{nsr}(q)$ é no fundo a integral de recobrimento das autofunções, das quais uma corresponde á s -ésima sub-banda e a outra à r -ésima sub-banda. Observa-se que o form-factor é o único parâmetro da amplitude de transição que assume todas as responsabilidades pela especificidade do filme relacionada com a forma geométrica, relevo, etc., sendo inevitável o seu cálculo.

Antes de mais nada presta-se atenção à dependência da função $\chi_{nsq}(x)$ em relação ao quase-vector de onda q . Atendendo aos resultados estabelecidos na tese [1] conclui-se que $\chi_{nsq}(x)$ depende de q por intermédio de duas grandezas:

$$k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \quad \text{e} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(U_n - \varepsilon)}{\hbar^2}} \quad (6.2)$$

Onde m é a massa eficaz, U_n a energia potencial eficaz, ε a solução da equação secular correspondente a s -ésima sub-banda. Sabe-se que ;

$$\varepsilon = E_s + I_s(1 - \cos 2qd) \quad (6.3)$$

Importa salientar que a integral de recobrimento I_s possui ordem exponencial em relação ao primeiro aditivo da fórmula (6.3), isto é:

$$I_s \ll E_s \quad (6.4)$$

Vista a desigualdade (6.4) despreza-se a contribuição do movimento de translação em cada uma das fórmulas (6.2). Então vê-se que, os parâmetros k e κ tornar-se-ão independentes do quase-vector de onda q .

A aproximação deste modo feita é crucial para o cálculo do form-factor, e enquadra-se plenamente na teoria geral de perturbação [19] e [21]. Segundo a tese anteriormente mencionada [1], o resultado (6.3) foi estabelecido na aproximação da segunda ordem desta teoria. No entanto, sabe-se que a correcção da segunda ordem para a energia, resulta da correcção de primeira ordem para a autofunção. É por isso que deve-se desprezar a contribuição em questão para não superar artificialmente a precisão do cálculo das autofunções.

Resumindo, conclui-se que as funções $\chi_{nsq}(x)$, juntamente com a integral de recobrimento são dadas pela fórmula (6.1), não dependem do quase-vector de onda q . Para terminar, realçar que esta conclusão mantém-se válida em relação as integrais de recobrimento apropriadas para qualquer tipo de transição quântica.

A outra particularidade das funções $\chi_{nsq}(x)$ resultante da aproximação acima feita é de esta que não possui paridade. O caso é que a função $\Phi_{nsq}(x)$ é autofunção da equação de Schrödinger correspondente a energia potencial especificada no trabalho [1]. Segundo [1] a energia eficaz referente ao modelo do FSC é função par da coordenada x . Conforme a teoria quântica, as autofunções nomeadamente $\Phi_{nsq}(x)$, podem ser classificadas de modo que algumas delas sejam pares em relação a permutação x por $-x$ ao passo que outras sejam ímpares. Então cada uma das funções $\Phi_{nsq}(x)$ tem a paridade bem determinada. Quanto as funções de Bloch definidas pela fórmula (5.6), é evidente que não são pares nem ímpares. O caso é que a equação de Schrödinger referente a função $\chi_{nsq}(x)$ vai incluir mais dois aditivos relacionados com o operador de Laplace, um destes será proporcional a q ; o primeiro é par enquanto que o segundo é ímpar em relação a coordenada x .

Entretanto uma combinação das funções de paridade diferente não possuirá paridade bem determinada. Consequentemente, a energia eficaz incluída na equação de Schrödinger, tem que perder a sua simetria antes sublinhada. É por isso que as funções $\chi_{nsq}(x)$ não se classificam com base na simetria da equação de Schrödinger, pois esta última não tem de facto simetria definitivamente dada. Aceitando a aproximação decorrente da relação (6.4), omitem-se os aditivos que dependeriam do quase-vector de

onda q . Desprezando-os chega-se a equação de Schrödinger cujas autofunções $\chi_{nsq}(x)$ já podem ser classificadas em termos da paridade determinada univocamente.

Desta aproximação resulta mais uma regra de selecção referente às transições entre as sub-bandas s e r . É óbvio que o form-factor $\Lambda_{nsr}(q)$ anula-se se as funções $\chi_{nsq}^*(x)$ e $\chi_{nrq}(x)$ tiverem paridade diferente. Neste caso obter-se-à a integral simétrica da função ímpar, e este tipo de integrais reduzem-se a zero. Portanto só se efectuam transições quânticas entre sub-bandas cujas autofunções possuam a mesma paridade.

Vista a forma explícita de cada uma das funções $\chi_{nrq}(x)$ reproduzida no apêndice 1 do modo:

$$\chi_r(x) = \begin{cases} A_{1r}e^{ik_r x} + B_{1r}e^{-ik_r x} & -d \leq x \leq -b \\ A_{2r}e^{\kappa_r x} + B_{2r}e^{-\kappa_r x} & -b < x < -a \\ A_{3r}e^{ik_r x} + B_{3r}e^{-ik_r x} & -a \leq x \leq a \\ A_{4r}e^{\kappa_r x} + B_{4r}e^{-\kappa_r x} & a < x \leq b \\ A_{5r}e^{ik_r x} + B_{5r}e^{-ik_r x} & b < x \leq d \end{cases} \quad (6.5)$$

e tomando em conta a paridade destas funções, é fácil escrever:

$$\Lambda_{nsr}(q) = 2 \left\{ \begin{aligned} & \frac{A_{1s} A_{1r}}{i(k_s - k_r)} \left[e^{i(k_s - k_r)d} - e^{i(k_s - k_r)b} \right] + \frac{A_{1s} B_{1r}}{i(k_s + k_r)} \left[e^{i(k_s + k_r)d} - e^{i(k_s + k_r)b} \right] + \frac{B_{1s} A_{1r}}{i(k_s + k_r)} \left[e^{-i(k_s + k_r)b} - e^{-i(k_s + k_r)d} \right] + \\ & \frac{B_{1s} B_{1r}}{i(k_r - k_s)} \left[e^{i(k_r - k_s)d} - e^{i(k_r - k_s)b} \right] + \frac{A_{2s} A_{2r}}{\kappa_r + \kappa_s} \left[e^{-(\kappa_r + \kappa_s)a} - e^{-(\kappa_r + \kappa_s)b} \right] + \frac{A_{2s} B_{2r}}{\kappa_s - \kappa_r} \left[e^{-(\kappa_s - \kappa_r)a} - e^{-(\kappa_s - \kappa_r)b} \right] + \\ & \frac{B_{2s} A_{2r}}{\kappa_s - \kappa_r} \left[e^{(\kappa_s - \kappa_r)b} - e^{(\kappa_s - \kappa_r)a} \right] + \frac{B_{2s} B_{2r}}{\kappa_s + \kappa_r} \left[e^{(\kappa_s + \kappa_r)b} - e^{(\kappa_s + \kappa_r)a} \right] + 2A_{3s} A_{3r} \left[\frac{\text{sen}(k_s - k_r)a}{k_s - k_r} + \frac{\text{sen}(k_s + k_r)a}{k_s + k_r} \right] \end{aligned} \right\} \quad (6.6)$$

Todos os coeficientes na expressão (6.6) podem ser exprimidos através de um só coeficiente A_3 , tal como foi feito no apêndice 2. Aplicando as relações (A2.14) e (A2.15) chega-se ao resultado:

$$\Lambda_{nsr}(q) = 2A_{3s} A_{3r} \left\{ \begin{aligned} & 2 \left[\frac{\text{sen}(k_s - k_r)a}{k_s - k_r} + \frac{\text{sen}(k_s + k_r)a}{k_s + k_r} \right] + 2|f_s||f_r| \left[\frac{\text{sen}(k_s - k_r)\Delta_1}{k_s - k_r} + \frac{\text{sen}(k_s + k_r)\Delta_1}{k_s + k_r} \right] + \\ & \frac{1}{\kappa_s - \kappa_r} \left[\varphi_s \psi_r \left(e^{-(\kappa_s - \kappa_r)a} - e^{-(\kappa_s - \kappa_r)b} \right) + \psi_s \varphi_r \left(e^{(\kappa_s - \kappa_r)b} - e^{(\kappa_s - \kappa_r)a} \right) \right] + \\ & \frac{1}{\kappa_s + \kappa_r} \left[\varphi_s \varphi_r \left(e^{-(\kappa_s + \kappa_r)a} - e^{-(\kappa_s + \kappa_r)b} \right) + \psi_s \psi_r \left(e^{(\kappa_s + \kappa_r)b} + e^{(\kappa_s + \kappa_r)a} \right) \right] \end{aligned} \right\} \quad (6.7)$$

Para verificar a fórmula (6.7) considera-se um caso especial correspondente aos estados s e r que sejam idênticos. Este caso nada tem a ver com a absorção da luz, mas permite confirmar as transformações intermediárias que conduzem á relação (6.7). Se os estados quânticos s e r , forem idênticos, a fórmula (6.1) reduz-se à condição de normalização, isto é, será igual a $2d$, substituindo na expressão (6.7) $\kappa_s = \kappa_r = \kappa$ e $k_s = k_r = k$. Ao comparar o resultado que se obtiver, com a fórmula (A2.18) conclui-se que o factor $\Lambda_{nsr}(q)$ neste caso de limite de facto reduz-se a $2d$, confirmando-se assim a validade da fórmula (6.7).

Segundo os dados da investigação [1], a energia potencial eficaz em função da coordenada x reduz-se à composição de dois poços rectangulares, um dos quais de largura a e o outro de largura Δ_1 . Entretanto os termos entre as chavetas da fórmula (6.7) ainda não possui simetria respectiva aos parâmetros a e Δ_1 . A referida simetria será restituída se se tomar em conta as relações (A2.30) (A2.31) bem como a equação secular dada pela expressão (A2.25). Excluindo cada uma das funções f_s e f_r de acordo com (A2.32), φ_s, φ_r conforme (A2.30) e ψ_s, ψ_r conforme (A2.31) obtém-se:

$$\Lambda_{nsr}(q) = \frac{2 A_{3s} A_{3r}}{\left[\Gamma_s(\Delta_1) P_s(\Delta_1) \Gamma_r(\Delta_1) P_r(\Delta_1) \right]^{1/2}} \left\{ \begin{aligned} & 2 \left[\frac{\text{sen}(k_s - k_r) a}{k_s - k_r} + \frac{\text{sen}(k_s + k_r) a}{k_s + k_r} \right] \left[\Gamma_s(\Delta_1) P_s(\Delta_1) \Gamma_r(\Delta_1) P_r(\Delta_1) \right]^{1/2} + \\ & 2 \left[\frac{\text{sen}(k_s - k_r) \Delta_1}{k_s - k_r} + \frac{\text{sen}(k_s + k_r) \Delta_1}{k_s + k_r} \right] \left[\Gamma_s(a) P_s(a) \Gamma_r(a) P_r(a) \right]^{1/2} + \\ & \frac{1}{(\kappa_s - \kappa_r) \kappa_s \kappa_r} \left[(P_s(a) \Gamma_r(a) - \Gamma_s(a) P_r(a)) \left[\Gamma_s(a) P_s(a) \Gamma_r(a) P_r(a) \right]^{1/2} + \right. \\ & \left. + (P_s(\Delta_1) \Gamma_r(\Delta_1) - P_r(\Delta_1) \Gamma_s(\Delta_1)) \left[\Gamma_s(a) P_s(a) \Gamma_r(a) P_r(a) \right]^{1/2} \right] + \\ & \frac{1}{(\kappa_s + \kappa_r) \kappa_s \kappa_r} \left[(P_s(a) P_r(a) - \Gamma_s(a) \Gamma_r(a)) \left[\Gamma_s(\Delta_1) P_s(\Delta_1) \Gamma_r(\Delta_1) P_r(\Delta_1) \right]^{1/2} + \right. \\ & \left. + (P_s(\Delta_1) P_r(\Delta_1) - \Gamma_s(\Delta_1) \Gamma_r(\Delta_1)) \left[\Gamma_s(a) P_s(a) \Gamma_r(a) P_r(a) \right]^{1/2} \right] \end{aligned} \right\} \quad (6.8)$$

O form-factor respectivo às funções ímpares decorre da relação geral (6.1) e da forma explícita das autofunções dadas pela expressão (6.5). Os coeficientes da função $\chi_r(x)$ satisfazem à condição de paridade (A2.31). Atendendo às condições (A2.38) que estabelecem o relacionamento entre os coeficientes e integrando a fórmula (6.1) obtém-se:

$$\Lambda_{nsr}(q) = 2 \left\{ \begin{aligned} & \frac{A_{1s} A_{1r}}{i(k_s - k_r)} \left[e^{i(k_s - k_r)d} - e^{i(k_s - k_r)b} \right] - \frac{B_{1s} B_{1r}}{i(k_s - k_r)} \left[e^{-i(k_s - k_r)d} - e^{-i(k_s - k_r)b} \right] + \\ & + \frac{A_{1s} B_{1r}}{i(k_s + k_r)} \left[e^{i(k_s + k_r)d} - e^{i(k_s + k_r)b} \right] - \\ & - \frac{B_{1s} A_{1r}}{i(k_s + k_r)} \left[e^{-i(k_s + k_r)d} - e^{-i(k_s + k_r)b} \right] + 2 A_{3s} A_{2r} \left[\frac{\text{sen}(k_s - k_r)a}{k_s - k_r} - \frac{\text{sen}(k_s + k_r)a}{k_s + k_r} \right] + \\ & + \frac{A_{2s} B_{2r}}{\kappa_s - \kappa_r} \left[e^{-(\kappa_s - \kappa_r)a} - e^{-(\kappa_s - \kappa_r)b} \right] - \\ & - \frac{B_{2s} A_{2r}}{\kappa_s - \kappa_r} \left[e^{(\kappa_s - \kappa_r)a} - e^{(\kappa_s - \kappa_r)b} \right] + \frac{A_{2s} A_{2r}}{\kappa_s + \kappa_r} \left[e^{-(\kappa_s + \kappa_r)a} - e^{-(\kappa_s + \kappa_r)b} \right] - \\ & - \frac{B_{2s} B_{2r}}{\kappa_s + \kappa_r} \left[e^{(\kappa_s + \kappa_r)a} - e^{(\kappa_s + \kappa_r)b} \right] \end{aligned} \right\} \quad (6.9)$$

Como todos os coeficientes foram expressos através de um só, isto é, A_3 é lógico substituir as relações correspondentes, (A2.42); na fórmula (6.9). A transformação de todos os aditivos, excepto aqueles relacionados com os coeficientes A_1 e B_1 , é óbvia; a sua modificação é mais sofisticada. Para esclarecer as transformações mencionadas, destacam-se os dois primeiros aditivos cuja contribuição designar-se-á por S .

$$S = A_{3s} A_{3r} \left\{ \frac{f_{1s} f_{1r}}{i(k_s - k_r)} \left[e^{i(k_s - k_r)d} - e^{i(k_s - k_r)b} \right] - \frac{f_{1s} f_{1r}}{i(k_s - k_r)} \left[e^{-i(k_s - k_r)d} - e^{-i(k_s - k_r)b} \right] \right\}$$

Agora tiram-se fora dos colchetes os aditivos exponenciais $e^{\pm i(k_s - k_r)d}$ obtém-se:

$$S = \frac{A_{3s} A_{3r}}{i(k_s - k_r)} \left\{ f_{1s} f_{1r} e^{i(k_s - k_r)d} \left[1 - e^{-i(k_s - k_r)\Delta_1} \right] - f_{1s} f_{1r} e^{-i(k_s - k_r)d} \left[1 - e^{i(k_s - k_r)\Delta_1} \right] \right\}$$

A ideia da transformação posterior inspira-se pela relação (A2.48).

$$f_1 = -e^{ikd} \left[\frac{N(a)M(a)}{N(\Delta_1)M(\Delta_1)} \right]^{1/2} = e^{ikd} |f_1|$$

Da substituição desta fórmula na expressão anterior resulta:

$$S = \frac{A_{3s} A_{3r}}{i(k_s - k_r)} \left\{ f_{1s} \| f_{1r} \left[\left| 1 - e^{-i(k_s - k_r)\Delta_1} \right| \right] - |f_{1s}| \| f_{1r} \left[\left| 1 - e^{i(k_s + k_r)\Delta_1} \right| \right] \right\} \text{ e finalmente obtém-se:}$$

$$S = \frac{2A_{3s} A_{3r}}{k_s - k_r} |f_{1s}| |f_{1r}| \operatorname{sen}(k_s - k_r) \Delta_1.$$

Mais dois aditivos posteriores que também incluem os coeficientes A_1 , B_1 devem ser transformados do mesmo modo, obtendo-se:

$$\Lambda_{nsr}(q) = 2A_{3s} A_{3r} \left\{ \begin{aligned} & 2 \left[\frac{\operatorname{sen}(k_s - k_r)a}{k_s - k_r} - \frac{\operatorname{sen}(k_s + k_r)a}{k_s + k_r} \right] + \frac{\varphi_{1s} \psi_{1r}}{\kappa_s - \kappa_r} \left[e^{-(\kappa_s - \kappa_r)a} - e^{-(\kappa_s - \kappa_r)b} \right] + \\ & + \frac{\psi_{1s} \varphi_{1r}}{\kappa_s - \kappa_r} \left[e^{(\kappa_s - \kappa_r)b} - e^{(\kappa_s - \kappa_r)a} \right] + \frac{\varphi_{1s} \varphi_{1r}}{\kappa_s + \kappa_r} \left[e^{-(\kappa_s + \kappa_r)a} - e^{-(\kappa_s + \kappa_r)b} \right] + \\ & + \frac{\psi_{1s} \psi_{1r}}{\kappa_s + \kappa_r} \left[e^{(\kappa_s + \kappa_r)b} - e^{(\kappa_s + \kappa_r)a} \right] + 2|f_{1s}| |f_{1r}| \left[\frac{\operatorname{sen}(k_s - k_r)\Delta_1}{k_s - k_r} - \frac{\operatorname{sen}(k_s + k_r)\Delta_1}{k_s + k_r} \right] \end{aligned} \right\} \quad (6.10)$$

Obviamente que o form-factor dado pela fórmula (6.10) no limite $k_s = k_r$, $\kappa_s = \kappa_r$, tende para $2d$ tal como devia ser, de acordo com a condição de normalização. Esta observação permite concluir que a fórmula (6.10) dá a confirmação indirecta da sua validade. De referir também que o form-factor referente aos estados ímpares (6.10) bem como o referente aos estados pares (6.6) satisfaz à condição $\Lambda_{nsr}(q) = \Lambda_{nsr}^*(q)$, o que mais uma vez confirma a validade das relações (6.10) e (6.6).

Entretanto, é preciso transformar a relação (6.10) para a forma mais simétrica em relação aos tamanhos lineares a e Δ_1 dos poços potenciais. Para concepção do método das transformações,

destaca-se um dos aditivos que se designará por Θ , obtendo-se: $\Theta = \frac{\varphi_{1s} \psi_{1r}}{\kappa_s - \kappa_r} \left[e^{-(\kappa_s - \kappa_r)a} - e^{-(\kappa_s - \kappa_r)b} \right]$.

Exprimindo φ_1 e ψ_1 por meio das relações (A2.48) seguirá que:

$$\Theta = \frac{N(a)M(a)}{(\kappa_s - \kappa_r)\kappa_s\kappa_r} \left[1 - e^{-(\kappa_s - \kappa_r)\Delta} \right]. \text{ Por sua vez da equação secular (A2.47) vem que: } e^{-\kappa\Delta} = \left[\frac{M(a)M(\Delta_1)}{N(a)N(\Delta_1)} \right]^{1/2}.$$

Esta relação faz com que os factores exponenciais possam ser excluídos da fórmula anterior, é por isso

$$\text{que: } \Theta = \frac{N_s(a)M_r(a)}{(\kappa_s - \kappa_r)\kappa_s\kappa_r} \left\{ 1 - \left[\frac{M_s(a)M_s(\Delta_1)N_r(a)N_r(\Delta_1)}{N_s(a)N_s(\Delta_1)M_r(a)M_r(\Delta_1)} \right]^{1/2} \right\} \text{ resultando que:}$$

$$\Theta = \frac{1}{(\kappa_s - \kappa_r)\kappa_s\kappa_r} \left[\frac{N_s(a)M_r(a)}{N_s(\Delta_1)M_r(\Delta_1)} \right]^{1/2} \left\{ (N_s(a)N_s(\Delta_1)M_r(a)M_r(\Delta_1))^{1/2} - (M_s(a)M_s(\Delta_1)N_r(a)N_r(\Delta_1))^{1/2} \right\}$$

Transformando deste modo todos os aditivos da fórmula (6.10) obter-se-á um resultado simétrico em relação aos parâmetros a e Δ_1 , a saber:

$$\Lambda_{nsr}(q) = \frac{2 A_{3s} A_{3r}}{[N_s(\Delta_1)M_s(\Delta_1)N_r(\Delta_1)M_r(\Delta_1)]^{1/2}} \left\{ \begin{aligned} & 2 \left[\frac{\text{sen}(k_s - k_r)a}{k_s - k_r} - \frac{\text{sen}(k_s + k_r)a}{k_s + k_r} \right] [N_s(\Delta_1)M_r(\Delta_1)N_r(\Delta_1)M_s(\Delta_1)]^{1/2} \\ & + 2 \left[\frac{\text{sen}(k_s - k_r)\Delta_1}{k_s - k_r} - \frac{\text{sen}(k_s + k_r)\Delta_1}{k_s + k_r} \right] [N_s(a)M_s(a)N_r(a)M_r(a)] \\ & + \frac{1}{\kappa_s \kappa_r} \left[\frac{N_s(a)M_r(a) - M_s(a)N_r(a)}{\kappa_s - \kappa_r} + \frac{N_s(a)M_r(a) - N_r(a)M_s(a)}{\kappa_s + \kappa_r} \right] \\ & \cdot [M_s(\Delta_1)N_s(\Delta_1)M_r(\Delta_1)N_r(\Delta_1)]^{1/2} + \\ & + \frac{1}{\kappa_s \kappa_r} \left[\frac{N_s(\Delta_1)M_r(\Delta_1)N_r(\Delta_1)M_s(\Delta_1)}{\kappa_s - \kappa_r} + \frac{N_s(\Delta_1)M_r(\Delta_1)N_r(\Delta_1)}{\kappa_s + \kappa_r} \right] \\ & \cdot [M_s(a)N_s(a)M_r(a)N_r(a)]^{1/2} \end{aligned} \right\} \quad (6.11)$$

Sublinhar que os coeficientes A_{3s} e A_{3r} nesta relação correspondem as autofunções ímpares e são dados pela fórmula (A2.50) ao passo que os coeficientes da expressão (6.8) referem-se às autofunções pares e por isso determina-se pela fórmula (A2.37).

Cada uma das relações (6.11) e (6.8) admite relação mais simples e simétrica, tendo como base as transformações que usam as definições das funções $\Gamma(\xi)$, $P(\xi)$, $N(\xi)$ e $M(\xi)$, atendendo às formulas (A2.46) obtém-se:

$$\begin{aligned} N_s(\xi)M_r(\xi) - M_s(\xi)N_r(\xi) &= \frac{\kappa_s \kappa_r + k_s \kappa_r}{\kappa_s - \kappa_r} \text{sen}(k_s - k_r)\xi - \frac{\kappa_s \kappa_r - \kappa_s k_r}{\kappa_s - \kappa_r} \text{sen}(k_s + k_r)\xi \\ N_s(\xi)N_r(\xi) - M_s(\xi)M_r(\xi) &= \frac{\kappa_r k_s - \kappa_s k_r}{\kappa_s + \kappa_r} \text{sen}(k_s - k_r)\xi - \frac{\kappa_s k_r + k_s \kappa_r}{\kappa_s + \kappa_r} \text{sen}(k_s + k_r)\xi \end{aligned}$$

Agora faz-se a substituição dessas relações na fórmula (6.11) e agrupam-se os termos proporcionais a $\text{sen}(k_s - k_r)\xi$ num grupo e os que forem proporcionais a $\text{sen}(k_s + k_r)\xi$ noutro, após os cálculos seguirá que:

$$\Lambda_{nsr}(q) = \frac{4 A_{3s} A_{3r}}{[N_s(\Delta_1)M_s(\Delta_1)N_r(\Delta_1)M_r(\Delta_1)]^{1/2}} \frac{\kappa_s^2 + k_s^2 - \kappa_r^2 - k_r^2}{\kappa_s^2 - \kappa_r^2} \left\{ \begin{aligned} & \left[\frac{\text{sen}(k_s - k_r)a}{k_s - k_r} - \frac{\text{sen}(k_s + k_r)a}{k_s + k_r} \right] \\ & [N_s(\Delta_1)M_s(\Delta_1)N_r(\Delta_1)M_r(\Delta_1)]^{1/2} + \\ & + \left[\frac{\text{sen}(k_s - k_r)\Delta_1}{k_s - k_r} - \frac{\text{sen}(k_s + k_r)\Delta_1}{k_s + k_r} \right] \\ & [N_s(a)M_s(a)N_r(a)M_r(a)]^{1/2} \end{aligned} \right\} \quad (6.12)$$

Quanto ao form-factor $\Lambda_{nsr}(q)$ respectivo as funções pares, obtém-se das transformações análogas àquelas aplicadas para (6.11):

$$\Lambda_{nsr}(q) = \frac{4 A_{3s} A_{3r}}{[\Gamma_s(\Delta_1)P_s(\Delta_1)\Gamma_r(\Delta_1)P_r(\Delta_1)]^{1/2}} \frac{\kappa_s^2 + k_s^2 - \kappa_r^2 - k_r^2}{\kappa_s^2 - \kappa_r^2} \left\{ \begin{aligned} & \left[\frac{\text{sen}(k_s - k_r)a}{k_s - k_r} + \frac{\text{sen}(k_s + k_r)a}{k_s + k_r} \right] \\ & [\Gamma_s(\Delta_1)P_s(\Delta_1)\Gamma_r(\Delta_1)P_r(\Delta_1)]^{1/2} + \\ & + \left[\frac{\text{sen}(k_s - k_r)\Delta_1}{k_s - k_r} + \frac{\text{sen}(k_s + k_r)\Delta_1}{k_s + k_r} \right] \\ & [\Gamma_s(a)P_s(a)\Gamma_r(a)P_r(a)]^{1/2} \end{aligned} \right\} \quad (6.13)$$

É de realçar que as fórmulas (6.12) e (6.13) são exactas no sentido de que se baseiam nas soluções exactas da equação de Schrödinger e além disso para deduzir as formulas não foi feita qualquer aproximação que ficasse fora do modelo do filme quântico. Neste contexto a única restrição ,a que se refere a energia potencial, deve ser satisfeita. A energia potencial eficaz em função da coordenada x tem que possuir o comportamento espacial na figura 2. Vê-se que cada uma das funções $U_c(x)$ e $U_v(x)$ corresponde ao sistema periódico dos poços rectangulares e para além disso têm a mesma distribuição espacial do potencial atractivo respectivo aos electrões bem como as lacunas electrónicas. Quanto as profundidades dos poços U_v e U_c , em geral, podem ser diferentes entre si e arbitrárias. Os valores dos parâmetros geométricos a e Δ_1 , e a constante da subrede d , podem ser variáveis dentro dos limites razoáveis que sejam compatíveis com a suposição de que se realiza o caso o filme quântico.

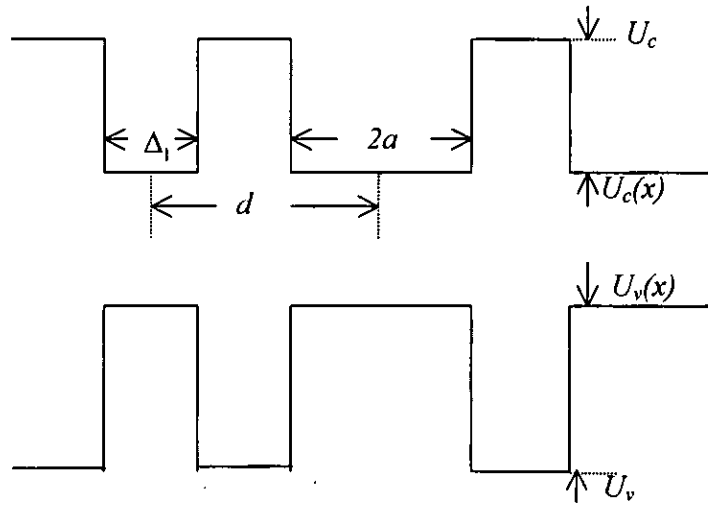


Figura 2- Energia potencial eficaz $U_{c,v}(x)$ em função da coordenada.

Das fórmulas deduzidas e dadas pelas relações (6.12) e (6.13) decorrem algumas conclusões gerais que se referem ao filme quântico em cuja subrede se cria a energia potencial esboçada na figura 2, segundo as designações (6.2) tem lugar a identidade:

$$\kappa_s^2 + k_s^2 - (\kappa_r^2 + k_r^2) = \frac{2m_p}{\hbar^2} U_v - \frac{2m_n}{\hbar^2} U_c \quad (6.14)$$

Onde m_p e m_n são a massa eficaz das lacunas e dos electrões respectivamente. O segundo membro da identidade (6.14) num caso geral não se anula, sendo por isso que não se anula o form-factor $\Lambda_{nsr}(q)$ determinado conforme as expressões (6.12) e (6.13). Dai resulta que todas as transições quânticas que fiquem de acordo com a lei de conservação da energia, tornam-se permitidas e não existe qualquer preferência de uma combinação dos números quânticos s e r em relação a outra.

É óbvio, que o anulamento acidental da integral de recobrimento $\Lambda_{nsr}(q)$ relacionado com o factor dentro de chavetas nas fórmulas (6.12) e (6.13) é desprezível devido a sua exclusividade e não influi sobre a conclusão geral acima feita.

Quanto ao FSC o comportamento do form-factor $\Lambda_{nsr}(q)$ é completamente diferente. O caso é que as profundidades dos poços correspondente ao mesmo número quântico de quantização transversal n , segundo [1] são relacionados do modo:

$$\frac{U_n}{U_v} = \frac{m_p}{m_n} \quad (6.15)$$

Então das relações (6.14) e (6.15) resulta:

$$\Lambda_{nsr}(q) = 0 \quad (6.16)$$

Entretanto a expressão (6.16) só é válida se os números quânticos k_s e k_r forem diferentes. No caso contrário, ($k_s=k_r$) cada uma das relações (6.12) e (6.13) reduzem-se a indeterminação do tipo $\frac{0}{0}$. Portanto os cálculos dos limites devem ser feitos partindo das fórmulas (6.6) e (6.10), como já foi referido neste caso obtém-se:

$$\Lambda_{nsr}(q) = 2d \quad (6.17)$$

Consequentemente no caso do FSC das relações (6.12), até (6.15) decorre o resultado fundamental correspondente a integral de recobrimento.

$$\Lambda_{nsr}(q) = 2d\delta_{sr} \quad (6.18)$$

A relação (6.18) possui uma importância extraordinária devido a duas razões; a primeira é de que a expressão (6.18) permite escrever sob forma explícita e definitiva a amplitude de transição quântica; combinando as fórmulas (5.11) e (6.18) obtém-se:

$$\langle vi | \hat{H}_P | cf \rangle = \frac{ieE_0 e^{i\omega t}}{m\omega} \bar{e} \bar{P}_{vc}(0) \delta_{nm} \delta_{qq'} 2d\delta_{sr} \quad (6.19)$$

A segunda é que a relação (6.18) estabelece a regra de selecção respectiva às transições entre as sub-bandas que tenham o mesmo valor do número quântico k_s .

Então os resultados deste capítulo podem ser resumidos do modo:

- 1- Foram feitos cálculos do form-factor $\Lambda_{nsr}(q)$ que se reduzem às fórmulas gerais (6.12) e (6.13).
- 2- Foi deduzida a forma explícita (6.18) referente a integral de recobrimento peculiar ao FSC.
- 3- Foi estabelecida a regra de selecção conforme a qual só se realizam transições entre as sub-bandas com a mesma paridade espacial das autofunções e com o mesmo valor do número quântico k_s .

§7 Densidade combinada de estados em função da frequência.

Os resultados dos capítulos anteriores reduzidos a forma mais compacta ,relação (6.19), junto à teoria geral finalizada pela expressão (1.1) permitem especificar o coeficiente de absorção do modo:

$$\alpha(\omega) = 2 \frac{2\pi e^2 E_0^2 n}{\hbar m^2 \omega^2 N_f c} \left| \bar{e} \bar{P}_{vc}(0) \right|^2 \sum_{k_y, q, n, s} f(E_i) [1 - f(E_f)] \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (7.1)$$

onde n é o índice de refração, $N_f c/n$ é o fluxo de fótons, $f(E_i)$ é a função de distribuição dos estados iniciais e $f(E_f)$ é a dos estados finais.

Daqui em diante considerar-se-à a luz de intensidade relativamente baixa, para que sejam desprezíveis as transições forçadas por um lado, e seja irrelevante a perturbação das funções de distribuição. Esta condição não é extraordinária e em regra é habitual para a prática das investigações experimentais. Então, cada uma das funções de distribuição mantém a sua forma explícita correspondente ao equilíbrio, isto é, aquela que se reduz a função de Fermi-Dirac. Mais uma observação diz respeito ao grau de degeneração estatística dos portadores. A investigação posterior refere-se ao semiconductor não degenerado. Há várias razões para justificar esta suposição insignificante do ponto de vista teórico. O caso é, em particular ,que num semiconductor não degenerado a quantidade de estados finais vazios , bem como a dos iniciais preenchidos será mais alta. Obviamente que este vai favorecer a absorção mais notável, mais eficiente. Para além disso torna-se possível evitar a absorção por portadores livres, isto é, o efeito que pode disfarçar a estrutura das faixas e por este meio dificultar a sua interpretação e a elaboração de recomendações tecnológicas.

Vistas as observações referentes a distribuição dos portadores resulta que uma das funções , nomeadamente $f(E_i)$, vem sendo igual a unidade ao passo que a outra $f(E_f)$, reduz-se a zero. Ao expressar a intensidade do campo eléctrico E_0 do modo:

$$E_0^2 = \frac{2\pi N_f}{V n^2} \hbar\omega$$

e substituindo os valores atribuídos a função de distribuição , da fórmula (7.1) obtém-se:

$$\alpha(\omega) = \frac{8\pi^2 e^2}{c n \omega m^2} \left| \bar{e} \bar{P}_{vc}(0) \right|^2 \frac{1}{V} \sum_{k_y, q, n, s} \delta[E_{cns}(k_y, q) - E_{vns}(k_y, q) - \hbar\omega] \quad (7.2)$$

Onde foram também especificados os números quânticos dos estados iniciais e finais.

Por analogia com a teoria respectiva aos cristais tridimensionais é conveniente introduzir a função chamada densidade combinada de estados $Z_{ns}(\omega)$ definida pela relação:

$$Z_{ns}(\omega) = \frac{2}{V} \sum_{k_y, q} \delta[E_{cns}(k_y, q) - E_{vns}(k_y, q) - \hbar\omega] \quad (7.3)$$

Evidentemente que esta função é responsável pela dependência em relação a frequência do coeficiente de absorção, portanto é imprescindível o seu cálculo. Para realizar estes cálculos devem ser escritos sob forma explícita as energias dos estados entre os quais se efectua a transição quântica. Atendendo aos resultados adoptados de [1] obtém-se:

$$E_{cns}(k_y, q) = E_c + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_n d_0^2} + E_{ns}^c + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_n} + I_{ns}^c (1 - \cos 2qd) \quad (7.4)$$

$$E_{vns}(k_y, q) = E_v + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_p d_0^2} - E_{ns}^v - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_p} - I_{ns}^v (1 - \cos 2qd) \quad (7.5)$$

O significado físico dos termos que constituem as relações (7.4) e (7.5) se releva das figuras 3a) e 3b). A primeira destas refere-se ao diagrama energético, enquanto que a figura 3b) representa a lei de dispersão em função do quase vector q .

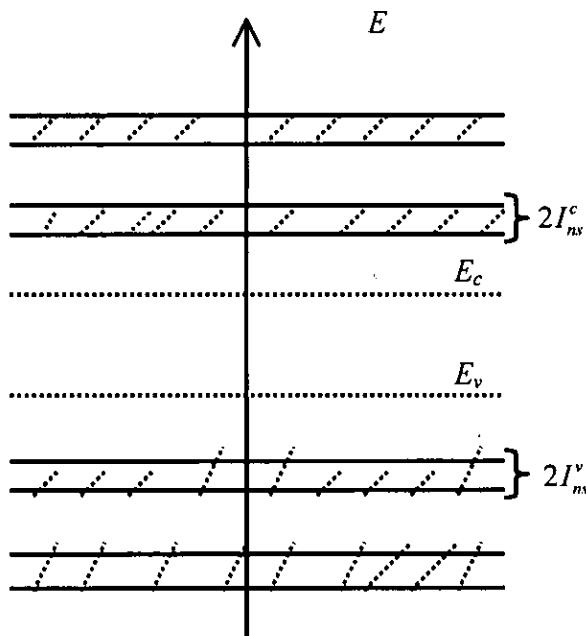


Figura 3a) Diagrama energético.

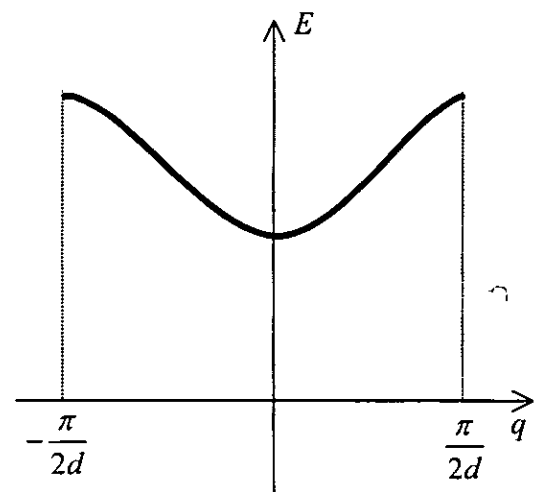


Figura 3b) Lei de dispersão em função do quase-vector q .

Daqui observa-se que E_c é a energia correspondente ao fundo da banda de condução do cristal ideal, o segundo termo da fórmula (7.4), designado na figura 3a), por E_{ns}^c , é a energia respectiva ao n ésimo

nível de quantização dimensional, o termo E_{ns}^c determina a posição energética do fundo da sub-banda respectiva a quantização do movimento ao longo do eixo da subrede com o relevo periódico do FSC. O quarto aditivo descreve o movimento quase-livre na direcção perpendicular ao eixo da subrede. O último termo corresponde ao movimento de translação ao longo do eixo da subrede. De sublinhar que este aditivo assume a responsabilidade pela especificidade do FSC, por meio da integral de recobrimento I_{ns}^c . Após a introdução das designações:

$$E_g(ns) = E_c - E_v + E_{ns}^c + E_{ns}^v + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2Md_0^2} \quad (7.6)$$

$$I_{ns} = I_{ns}^c + I_{ns}^v \quad (7.7)$$

$$M = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p} \quad (7.8)$$

Onde $E_g(ns)$ desempenha o papel de largura da banda proibida, M é a massa reduzida, I_{ns} é a largura total das sub-bandas; a relação (7.3) aceitará a forma:

$$Z_{ns}(\omega) = \frac{1}{2\pi^2 d_0} \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\pi/2d}^{\pi/2d} dq \delta \left[E_g(ns) + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2M} + I_{ns}(1 - \cos 2qd) - \hbar\omega \right] \quad (7.9)$$

A integração por k_y , que se baseia nas propriedades de δ -função, conduz á relação:

$$Z_{ns}(\omega) = \frac{1}{2\pi^2 d_0} \left(\frac{2M}{\hbar^2} \right)^{1/2} \begin{cases} 0 & \text{se } \hbar\omega - E_g(n,s) - I_{ns}(1 - \cos 2qd) < 0 \\ \int dq [\hbar\omega - E_g(n,s) - I_{ns} + I_{ns} \cos 2qd]^{1/2}, & \text{se } \hbar\omega - E_g(n,s) - I_{ns}(1 - \cos 2qd) \geq 0 \end{cases} \quad (7.10)$$

em que as desigualdades estabelecem os limites correspondentes á variável q . A integral em (7.10) admite redução para a forma;

$$I = \int_0^{\pi} \frac{dx}{\sqrt{\Omega + \cos x}}$$

onde Ω é um parâmetro independente de x . Trocando a variável x do modo $x = 2\xi$ obtém-se:

$$I = 2 \int_0^{\pi/2} \frac{d\xi}{\sqrt{\Omega + \cos 2\xi}} \quad . \text{ Esta fórmula pode ser expressa assim:}$$

$$I = \frac{2}{\sqrt{\Omega + 1}} \int_0^{\pi/2} \frac{d\xi}{\sqrt{1 - \frac{2}{\Omega + 1} \text{sen}^2 \xi}}$$

Esta integral é bem conhecida na teoria de funções especiais[26] e [27] e apresenta por si a integral elíptica do primeiro $K(k)$ tipo definida pela relação:

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\xi}{\sqrt{1 - k^2 \text{sen}^2 \xi}}$$

Vista a definição da integral elíptica a fórmula anterior vem sendo transformada para a expressão:

$$I = \frac{2}{\sqrt{\Omega + 1}} K\left(\sqrt{\frac{2}{\Omega + 1}}\right)$$

Integrando na relação (7.10) segundo o método acima exposto, obtém-se:

$$Z_{ns}(\omega) = \frac{1}{\pi^2 d d_0} \left(\frac{2M}{\hbar^2}\right)^{1/2} \begin{cases} 0, & \hbar\omega < E_g(ns) & (7.11a) \\ \frac{1}{\sqrt{2I_{ns}}} K\left(\sqrt{\frac{\hbar\omega - E_g(ns)}{2I_{ns}}}\right), & E_g(ns) \leq \hbar\omega \leq E_g(ns) + 2I_{ns} & (7.11b) \\ \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega - E_g(ns)}} K\left(\sqrt{\frac{2I_{ns}}{\hbar\omega - E_g(ns)}}\right), & \hbar\omega \geq E_g(ns) + 2I_{ns} & (7.11c) \end{cases}$$

O senso do resultado expresso pela fórmula (7.11) é evidente e este constata o facto de que os fotões de energia $\hbar\omega$ menor que a largura da banda proibida $E_g(ns)$ não podem causar transições do electrão de uma sub-banda para outra pois, esta transição caso seja feita ,vai contradizer a lei de conservação de energia. Para interpretar as relações (7.11b) e (7.11c) é oportuno observar as trajectórias de fase no espaço do quase-vector de onda (k_y, q) apresentadas na figura 4. Nesta figura as trajectórias de fase enumeradas por 1,2 e3 correspondem aos fotões cujas energias satisfazem às condições da fórmula (7.11b) ao passo que as linhas 5 e 6 exemplificam as trajectórias de fase que se referem as energias maiores que $E_g(ns) + 2I_{ns}$. Quanto á curva 4, corresponde a energia $E_g(ns) + 2I_{ns}$ e chama-se separatriz, pois separa as trajectórias abertas (5 e 6). No entanto sob energia $\hbar\omega$ só se efectuam transições entre estados que estão localizados na trajectória de fase respectiva a essa energia. Consequentemente, a fórmula (7.11b) determina a contribuição das trajectórias fechadas enquanto que (7.11c) refere-se à contribuição das trajectórias abertas .

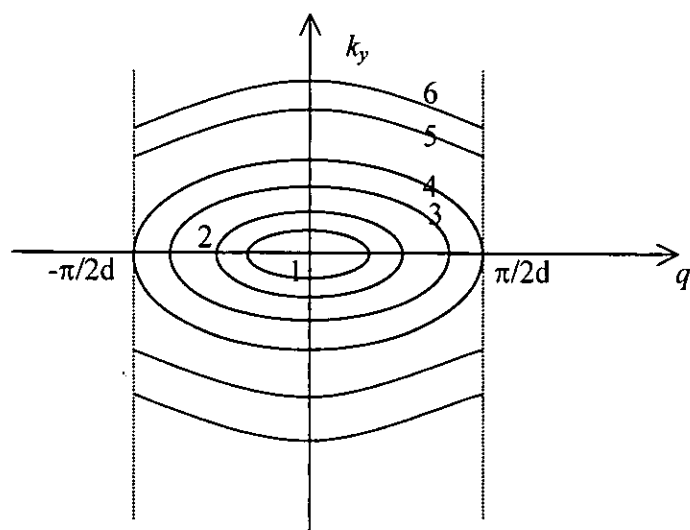


Figura 4- Trajetórias de fase do quase-vector de onda.

A relação (7.1) bem como as fórmulas (7.11) correspondem às transições entre as subbandas originadas por particularidades do relevo geométrico do FSC. Entretanto, a partir da energia dos fótons que é igual a $E_g + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2M} + (U_n^c + U_n^v)$ tornar-se-ão permitidas as transições entre os estados do espectro contínuo. Para tomar em conta a contribuição do espectro contínuo é suficiente estender o somatório por todos os estados incluindo aqueles que pertencem a faixa contínua do espectro. A densidade combinada dos estados $Z_{ns}(\omega)$ pode ser definida por analogia com a fórmula (7.3). A função $Z_{ns}(\omega)$ já foi bem investigada por várias razões relacionadas com os sistemas bidimensionais. Adoptando os resultados do artigo [3] a função $Z_{ns}(\omega)$ é determinada do modo:

$$Z_n(\omega) = \frac{1}{2\pi d_0} \left(\frac{2M}{\hbar^2} \right) \Theta(\hbar\omega - E_g(n)) \quad (7.12)$$

Onde $\Theta(x)$ é a Θ -função de Heaviside e $E_g(n)$ é a energia introduzida pela definição $E_g(n) = E_g + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2M} + U_n^c + U_n^v$

Atendendo a observação acima feita e a definição (7.3) o coeficiente de absorção $\alpha(\omega)$, que surge devido as transições directas, obtém-se sob a seguinte forma final:

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{c n \omega m^2} \left| \bar{e} \bar{P}_{vc}(0) \right|^2 \left\{ \sum_{ns} Z_{ns}(\omega) + \sum_n Z_n(\omega) \right\} \quad (7.13)$$

A relação (7.13) é o resultado principal deste trabalho. Nota-se das expressões (7.4) e (7.5) que as fórmulas (7.11) correspondem às transições entre os estados pares. Quanto aos estados ímpares, estes

também se descrevem pelas fórmulas (7.4) e (7.5) com a única diferença de que as integrais de recobrimento I_{ns} vêm sendo definidas como grandezas negativas.

Os cálculos análogos àqueles que foram feitos em relação aos estados pares, conduzem às fórmulas (7.11) em que se entende o módulo da integral de recobrimento sob a designação I_{ns} .

Importa realçar neste capítulo:

- 1- Foi deduzida a densidade combinada de estados relacionada com as contribuições parciais das sub-bandas para o coeficiente de absorção.
- 2- Foi deduzida a forma analítica respectiva a densidade dos estados em função da frequência e dos parâmetros fundamentais do modelo, (massa eficaz e integral de recobrimento).
- 3- Foi deduzida a fórmula final que diz respeito a absorção da luz por via das transições directas.

§8 Comportamento do coeficiente de absorção perto dos pontos críticos.

A expressão (7.13) junto com as fórmulas (7.11) e (7.12) restitui totalmente o coeficiente de absorção $\alpha(\omega)$ em função da frequência. É de facto assim, pois as integrais elípticas $K(x)$ estão devidamente tabeladas no compêndio [27]. Aproveitando estas tabelas e as relações acima mencionadas, é fácil calcular o valor numérico de $\alpha(\omega)$ para qualquer que seja a frequência ω da radiação electromagnética se forem conhecidos os restantes parâmetros tais como I_{ns} , $E_g(ns)$ que por sua vez resultam da resolução, quer analítica quer numérica, da equação secular.

Entretanto, para as aplicações é importante conhecer o comportamento do coeficiente de absorção na vizinhança dos pontos críticos que são classificados segundo a monografia [3] e [4]. Vista a definição [3] e [4], verifica-se obviamente que o centro da zona de Brillouin é um ponto crítico, pois nele tem lugar a igualdade:

$$\bar{V}_{q,k_y} [E_{cns}(k_y, q) - E_{vns}(k_y, q)] = 0 \quad (8.1)$$

para todos os ramos do espectro energético. Importa realçar, que o comportamento do coeficiente de absorção perto do ponto crítico é altamente informativo no sentido de que comparando as previsões teóricas com os resultados experimentais se torna possível reconstruir ou confirmar a lei de dispersão, pelo menos na vizinhança deste ponto, e para além disso, comprovar ou rejeitar as regras de selecção.

No contexto deste trabalho é dedicada uma atenção especial ao comportamento do coeficiente de absorção que diz respeito aos estados pertencentes a separatriz dada na figura 4. O caso é que estes estados, não sendo críticos no próprio sentido da definição, podem conduzir para certas particularidades que sejam relacionadas com o facto de ter lugar a modificação qualitativa da trajectória de fase segundo a qual, esta passa de fechada para aberta.

Atendendo a forma aditiva da expressão (7.13) é oportuno destacar um só termo desta relação a fim de especificar o coeficiente de absorção na vizinhança dos pontos acima definidos. Definindo o coeficiente parcial de absorção relacionado com a s-ésima sub-banda do modo:

$$\tilde{\alpha}_{ns}(\omega) = \frac{Z_{ns}(\omega)}{Z_n(\omega)} \quad (8.2)$$

e vistas as fórmulas (7.11) e (7.12) no que diz respeito ao coeficiente $\tilde{\alpha}_{ns}(\omega)$ introduzido como grandeza adimensional, obtém-se:

$$\tilde{\alpha}_{ns}(\omega) = \frac{2}{\pi d} \left(\frac{\hbar^2}{2M} \right)^{1/2} \begin{cases} 0 & ; \hbar\omega < E_g(n,s) \quad (8.3a) \\ \frac{1}{\sqrt{2I_{ns}}} K \left(\sqrt{\frac{\hbar\omega - E_g(n,s)}{2I_{ns}}} \right) ; & E_g(n,s) \leq \hbar\omega \leq E_g(n,s) + 2I_{ns} \quad (8.3b) \\ \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega - E_g(n,s)}} K \left(\sqrt{\frac{2I_{ns}}{\hbar\omega - E_g(n,s)}} \right) ; & E_g(n,s) + 2I_{ns} \leq \hbar\omega \quad (8.3c) \end{cases}$$

Repara-se que a segunda das relações (8.3), isto é, a expressão (8.3b) assume a responsabilidade por transições correspondentes às trajectórias fechadas. Na vizinhança deste ponto crítico o módulo da integral elíptica satisfaz à condição:

$$\left(\frac{\hbar\omega - E_g(n,s)}{2I_{ns}} \right)^{1/2} \ll 1 \quad (8.4)$$

Aproveitando a assintótica respectiva da integral elíptica, que é dada pela aproximação [27]

$$K(x) \approx \frac{\pi}{2} \quad ; x \ll 1 \quad (8.4)$$

sob a condição (8.4) resulta:

$$\tilde{\alpha}_{ns}(\omega) \approx \frac{1}{d} \left(\frac{\hbar^2}{2M} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2I_{ns}}} \quad (8.6)$$

Constata-se que o coeficiente parcial de absorção perto do ponto crítico não depende da frequência. Entretanto essa particularidade é peculiar [3] ao gás bidimensional dos portadores. É por isso que decorre a conclusão de que na vizinhança do ponto crítico as sub-bandas energéticas revelam as suas propriedades bidimensionais. A interpretação dessa conclusão é óbvia, é que a condição (8.4) é equivalente à suposição de que o excesso da energia do fóton só possibilita a excitação dos estados perto do tecto da sub-banda $E_{vns}(k_y, q)$ e a transição quântica para os estados perto do fundo da sub-banda $E_{cns}(k_y, q)$. Sendo assim torna-se aceitável a aproximação de massa eficaz de que decorre o comportamento puramente bidimensional dos portadores.

Admitindo a condição:

$$\left[\frac{\hbar\omega - E_g(n, s)}{2I_{ns}} \right]^{1/2} \leq 1 \quad (8.7)$$

que destaca as transições correspondentes às trajectórias fechadas e próximas da separatriz, é preciso aproveitar a assintótica dada do modo [27]:

$$K(x) \approx \ln \frac{4}{\sqrt{1-x^2}} \quad x \leq 1 \quad (8.8)$$

Vistas as aproximações (8.8) e a relação (8.3b) o coeficiente parcial de absorção $\tilde{\alpha}_{ns}(\omega)$ vem sendo determinado conforme a expressão:

$$\tilde{\alpha}_{ns}(\omega) \approx \frac{1}{\pi d} \left(\frac{\hbar^2}{2M} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2I_{ns}}} \ln \frac{32I_{ns}}{E_g(n, s) + 2I_{ns} - \hbar\omega} \quad (8.9)$$

A fórmula (8.9) faz concluir que o coeficiente de absorção sofre uma modificação considerável tendendo ao infinito na medida do crescimento da frequência ou à medida da aproximação das trajectórias fechadas para a separatriz e manifestando a particularidade logarítmica para a frequência ω dada do modo: $\hbar\omega = E_g(n, s) + 2I_{ns}$. Para interpretar esse comportamento é necessário tomar em conta que o afastamento do centro da zona de Brillouin dada na figura 4 faz com que se torne reduzida a relevância do movimento ao longo da superrede, pois as sub-bandas correspondentes têm largura $2I_{ns}$ bastante limitada. Nestas circunstâncias cresce a relevância do

movimento quase-livre ao longo do eixo y . Então tem lugar a redução da dimensão eficaz no sentido de que o movimento assume os traços do movimento unidimensional. Como se sabe [17] as particularidades de Van-Hove, neste caso tornam-se mais distintas. No entanto, o movimento ao longo do eixo x atenua estas particularidades baixando o grau de divergência.

Segundo as observações que acompanham a figura 4 a relação (8.3c) corresponde as transições entre os estados pertencentes às trajectórias abertas. No caso das trajectórias abertas das assintóticas (8.5) e (8.8) resultam as fórmulas aproximadas:

$$\tilde{\alpha}_{ns}(\omega) \approx \frac{1}{\pi d} \left(\frac{\hbar^2}{2M} \right)^{1/2} [\hbar\omega - E_g(n,s)]^{-1/2} \ln \frac{16[\hbar\omega - E_g(n,s)]}{\hbar\omega - E_g(n,s) - 2I_{ns}}, \quad \left[\frac{\hbar\omega - E_g(n,s)}{2I_{ns}} \right]^{1/2} \geq 1 \quad (8.10)$$

$$\tilde{\alpha}_{ns}(\omega) \approx \frac{1}{d} \left(\frac{\hbar^2}{2M} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega - E_g(n,s)}} \quad ; \quad \left[\frac{\hbar\omega - E_g(n,s)}{2I_{ns}} \right]^{1/2} \gg 1 \quad (8.11)$$

§9 Discussão de resultados

O coeficiente de absorção dado pela relação (7.13) é o resultado fundamental deste trabalho.

Para uma análise elucidativa, é conveniente introduzir o coeficiente parcial de absorção como uma grandeza adimensional e proceder à análise de alguns casos limite, equação (8.3). A equação (8.3b) é a equação correspondente às trajetórias fechadas (linhas 1, 2 e 3 da fig.4), a análise do extremo da sub-banda $0 \leq \hbar\omega - E_g(n,s) \ll 2I_{ns}$ permite concluir[3] que o coeficiente de absorção na vizinhança do ponto crítico não depende da frequência, este comportamento é peculiar ao gás bidimensional de portadores e pode ser observado na figura 5 [7], que apresenta o resultado experimental do espectro de absorção duma amostra de GaAs.

Para $\hbar\omega - E_g(n,s) \gg 2I_{ns}$ observa-se uma "cauda" de absorção [3] que é característica para estruturas de bandas unidimensionais, o coeficiente de absorção sofre uma modificação considerável, uma vez que tende para o infinito à medida em que as trajetórias fechadas se aproximam da separatriz (fig.4) e manifestam uma divergência logarítmica, quando $\hbar\omega - E_g(n,s) = 2I_{ns}$.

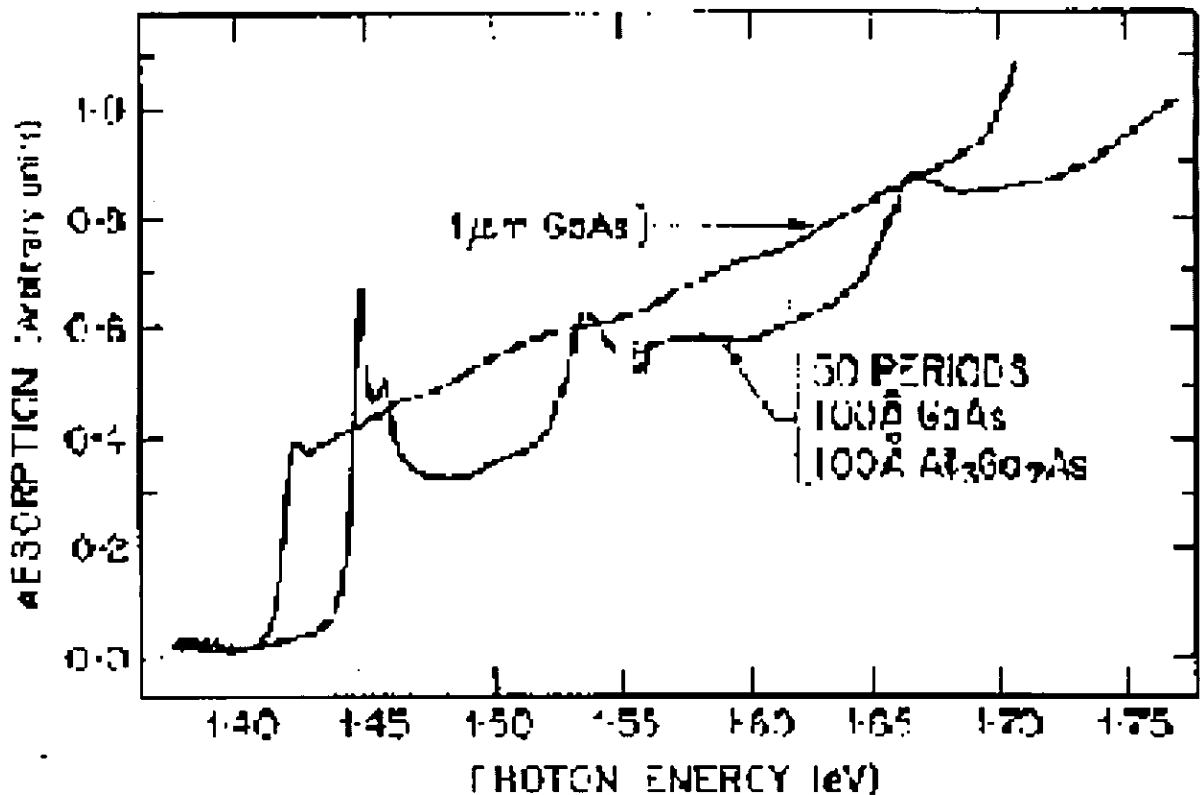


Figura 5 Espectro de absorção do GaAs.

§10 Conclusões e Recomendações.

De acordo com os objectivos traçados e de acordo com a pesquisa bibliográfica realizada permitem concluir que:

A fórmula geral (4.15) deduzida inclui parâmetros fundamentais do cristal ideal ; o momento dipolar de transições $\vec{P}_{\alpha\beta}(\vec{k})$ e a informação referente á modificação da amplitude estimulada pelos parâmetros geométricos do filme, sendo que esta equação foi confirmada pela análise de um caso limite correspondente ao cristal ideal.

A amplitude das transições permitidas dada pela expressão (5.4); contém dois factores um dos quais $\vec{P}_{vc}(0)$ correspondente ao cristal ideal enquanto que o outro refere-se aos efeitos dimensionais.

Foi calculado o form-factor $\Lambda_{nr}(q)$ que é finalizado pelas fórmulas gerais (6.12) e (6.13) sendo que a forma explícita da integral de recobrimento peculiar ao FSC é dada pela expressão (6.18).

Foram estabelecidas regras de selecção (5.12) das transições directas. Conclui-se que não existem regras especiais de selecção para as transições entre as sub-bandas s e r excepto aquela que decorre da lei de conservação da energia. A outra regra de selecção diz que só se realizam transições entre as sub-bandas com a mesma paridade espacial das autofunções e com o mesmo valor do número quântico k_s .

Foi calculado o coeficiente de absorção em função da frequência. A análise de alguns casos de limite permite concluir que o coeficiente de absorção nos extremos é bastante sensível à geometria do filme.

Na sequência dos resultados decorrentes deste trabalho recomenda-se a implementação dos FSC na tecnologia para fabricar filtros ópticos selectivos.

Continuar a investigar os fenómenos de transporte nos FSC.

§11 Referências bibliográficas.

- [1] Alberto J. Macamo (1999), "Estrutura do espectro dos portadores em filmes de superfícies congruentes." Tese de licenciatura, UEM.
- [2] F. Abelês, "Optical properties of solids" NY, Toronto, pp 3-43, 285-293.
- [3] Bassani and P. Parravicini(1975), "Electronic states and optical transitions in solids" pp 149-163. Pergamon press.
- [4] R. Cingolani and K. Ploog(1991), "Radiative recombination processes" Adv. In Physics. Vol 40 N^o5 pp 540-546.
- [5] A.D. Yoffe(1993), "Low dimensional systems: quantum size effects and electronic properties of semiconductor microcrystallites(zero-dimensional systems and some quasi-two-dimensional systems" Adv. In Physics pp 175-189 vol 42 N^o2.
- [6] B.Y. Jin and J.B. Ketterson(1989), "Artificial metallic superlattices" Adv. In Physics pp 195-204 e 225-226, vol38 N^o3.
- [7] S. Schmitt-Rink.(1989), "Linear and nonlinear optical properties of semiconductor quantum wells" Adv. In Physics pg 89-91, 94 e 102 vol N^o2.
- [8] Zangwill A. (1988), "Physics of surfaces" Cambr. Univ. Prees. pp 438.
- [9] Gibbs J. W. (1948), "The equilibrium of heterogenous substances" Collect. Works vol.1, New Haven, Yale.
- [10] Scheibken J., Germer, Martman (1960), "Low energy diffraction(LEED)" Rev. Sci. Inst. pp 112, Vol. 31.
- [11] S. M. Sze, (1981), "Physics of semiconductor device", John Wiley and Son Inc. NY, pp 573.
- [12] J. C. Dymant(1985), "III_V compound Semiconductors for communications", Can. Jor. Physics. 63, N^o6 pp 651-661.
- [13] B. A. Tavger, V. Ya. Demikhovskii, (1969), "Quantum size effect", Sov. Physics-Usp. 11 pp 644-654.

- [14] A. I. Anselm, (1982), "Introduction to semiconductor theory", Ams.pp. 622.
- [15] V. A. Volkov, T. N. Prisker, (1971), "Quantum size effect in variable-thickness films", Sov. Phys-solid state, 13, pp 1138-1140.
- [16] J. V. Chaplick, (1975), "Localized states in films with geometrical superficial defects.", Sov. Phys.JETP, 68,pp 1242-1252.
- [17] J. M. Ziman (1964). "Principle of the theory of the solid", Cambr.Press. pp 48.
- [18] V.G. Kogan, V. Z. Kresin, (1970), "Interband absorption in size-quantified films" Sov. Phys.-solid state, 11 pp 2618-2622.
- [19] J. M. Ziman (1975), "Modern quantum theory", NY Perg. Press.
- [20] Ando T., Fowler A., Stern F. (1982), "Electronic properties of two-dimensional systems." NY Perg. Press.
- [21] Landau L. Lifshitz E., (1985), "Mecânica quântica" (pp) 294 Moskov, Mir.
- [22] Lifshitz I. M., Kaganov M. I, Kosevich A. K. (1974), "Electron theory of metals", NY, Acad. Press.
- [23] Morse P. M. , Feshbach J. (1953), "Methods of theoretical Physics". NY, MC Gorw Hill.
- [24] Alferov J. I., Shimaev Y. V., Shmartzev Y. M. (1971), "Physics and technics semiconductor." Vol.5 pp 96.
- [25] Born M., Wolf E. (1959), "Principle of optics" Landom, Perg. Press.
- [26] Wong Guo (1989), "Special functions" pp 456, 510, 552, 553 world scien. Publ.
- [27] Harris Hancock (1917), "Elliptic integrals" pp 9-23, 92-101, NY.

Apêndices

§12.1 Apêndice 1

O presente trabalho de licenciatura é uma continuação lógica da investigação iniciada pelo autor [1] que deduziu e resolveu a equação secular do modelo de FSC que apresenta o comportamento e a estrutura do seu espectro electrónico. Assim, passo a transcrever alguns resultados que são imprescindíveis para esta tese.

No modelo do FSC considera-se $Z_i = \chi(\vec{r})$ a equação da superfície inferior da película e $Z_s = \chi(\vec{r}) + d_0$ a equação da superfície superior e d a distância correspondente aos pontos com o mesmo vector de posição \vec{r} que permanecem constante em função a este vector:

$$d = z_s - z_i = d_0 + \chi(\vec{r}) - \chi(\vec{r}) = d_0 = \text{const} \quad (\text{A1.1})$$

e chama-se ás superfícies com esta propriedade, superfícies congruentes. De acordo com esta definição(A1.1) são validas as relações:

$$\bar{\nabla}d = 0 ; \nabla^2 d = 0 \quad (\text{A1.2})$$

a forma explícita da energia potencial relativa ao movimento bidimensional no plano xoy será:

$$U_e = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2} (\bar{\nabla}\chi)^2. \quad (\text{A1.3})$$

Consequentemente a equação de Schrödinger relativa ao movimento longitudinal para um filme de fronteiras congruentes será:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_n + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2} (\bar{\nabla}\chi)^2 \Psi_n = \left(E - \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2} \right) \Psi_n. \quad (\text{A1.4})$$

A equação que descreve a superfície de uma só película congruente é:

$$\chi(x+2ld) = \chi(x) = \begin{cases} \chi_0 & ; \quad |x| \leq a \\ -\frac{\chi_0}{b-a}(x-b) & ; \quad a < x \leq b \\ \frac{\chi_0}{b-a}(x+b) & ; \quad -b \leq x < a \\ 0 & ; \quad -d \leq x < -b ; b < x \leq d \end{cases} \quad (\text{A1.5})$$

tomando em consideração a forma explícita de $\chi(\vec{r})$ (A1.5) e a definição da energia potencial eficaz, obtém-se:

$$U_e = \begin{cases} 0, \text{ se } |x| \leq a \text{ ou } b \leq |x| \leq d \\ U_n & , \text{ se } a < |x| \leq b \end{cases} \quad (\text{A1.6})$$

$$U_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md_0^2} \text{tg}^2 \varphi ; \quad \text{tg} \varphi = \frac{\chi_0}{b-a} \quad (\text{A1.7})$$

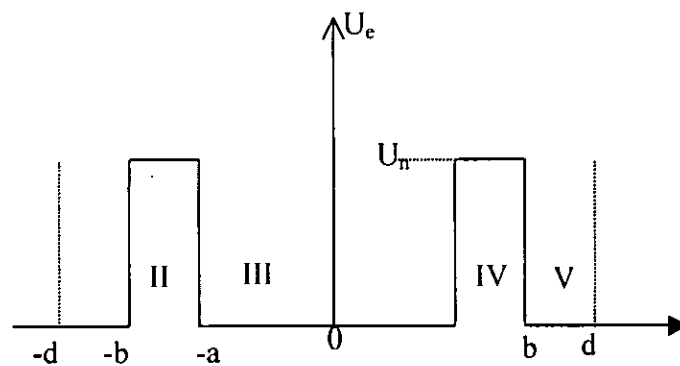


Fig.(A1.1) Energia potencial eficaz em função da coordenada.

Observando o gráfico vê-se que existem dois intervalos de energia diferentes, o primeiro corresponde a energia maior do que a altura da barreira de potencial U_n ; de acordo com a MQ [21], os autovalores da equação de Schrödinger formam um espectro contínuo e as funções respectivas devem ser ondas planas modificadas pelo potencial periódico $U_n(x)$. O outro intervalo refere-se às energias que vão desde $[0, U_n]$, e cada poço rectangular cria níveis locais. Estes níveis ampliam as sub-bandas devido a simetria

translacional, a largura de uma das sub-bandas é proporcional à integral de recobrimento que é função exponencial de período $2d$. O espectro consiste de bandas pouco largas e cada sub-banda de quantificação dimensional contém estados correspondentes ao movimento bidimensional e quase unidimensional.

Como a energia potencial U_e corresponde ao modelo mais simples e só depende da coordenada x , a equação de schrödinger admite separação de variáveis x e y , portanto a sua autofunção deve ser uma onda plana:

$$\Psi_n(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{iyk_y} \Psi(x) \quad (\text{A1.7})$$

onde L é o comprimento do filme, k_y é o quase-vector de onda. A equação de schrödinger será:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + u_e \Psi = \varepsilon \Psi \quad \text{e} \quad (\text{A1.8})$$

$$\varepsilon = E - \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md_0^2} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}$$

e a sua solução, equação secular, é:

$$\left(ch2\kappa\Delta \cos 2ka + \frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} sh2\kappa\Delta \text{sen} 2ka \right) \cos 2k\Delta_1 +$$

$$+ \left[\frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} sh2\kappa\Delta \cos 2ka - \left(ch^2\kappa\Delta - \frac{\kappa^4 + k^4}{2\kappa^2 k^2} sh^2\kappa\Delta \right) \text{sen} 2ka \right] \text{sen} 2k\Delta_1 = \cos 2qd. \quad (\text{A1.9})$$

Nesta equação, k e κ são definidos pela relação (6.2), $\Delta = b - a$ é a largura da barreira de potencial $\Delta_1 = d - b$ é a semi-largura do poço potencial.

A equação secular (A1.9) corresponde ao intervalo de energia $[0, U_n]$, onde a energia é menor que a altura da barreira de potencial. Assim cada uma das soluções expressas pelo quase-vector de onda q , determina a sub-banda energética respectiva; e os autovalores que se encontram fora deste intervalo pertencem ao espectro contínuo [21]. Para a energia maior do que U_n , a grandeza κ só tem valor

imaginário, e para achar a solução da equação secular basta substituir na equação (A1.9) o valor $i\kappa$ no lugar de κ e obter-se-á:

$$\left(\cos 2\kappa\Delta \cos 2ka - \frac{\kappa^2 + k^2}{2\kappa k} \operatorname{sen} 2\kappa\Delta \operatorname{sen} 2ka \right) \cos 2k\Delta_1 + \\ + \left[\left(\frac{\kappa^2 - k^2}{2\kappa k} \right)^2 \operatorname{sen} 2\kappa a - \frac{\kappa^2 + k^2}{2\kappa k} \left(\operatorname{sen} 2\kappa\Delta \cos 2ka + \frac{\kappa^2 + k^2}{2\kappa k} \cos 2\kappa\Delta \operatorname{sen} 2ka \right) \operatorname{sen} 2k\Delta_1 \right] = \cos 2qd.$$

(A1.10)

Assim o espectro energético dos elétrons é completamente abordado, isto é foram determinados os autovalores do intervalo $[0, U_n]$, a equação (A1.9) e o intervalo referente á energia $]U_n, +\infty[$, equação (A1.10).

As soluções das aproximadas das equações seculares (A1.9) e (A1.10) estão inseridas no texto principal deste trabalho e são dadas pelas relações (7.4) e (7.5).

§12.2 Apêndice 2

Os resultados do trabalho [1] concentrados no apêndice 1 determinam as autofunções $\chi(x)$ com precisão da constante de normalização. No entanto, esta constante inclui a informação respectiva a modificação do momento dipolar por factores geométricos do FSC. Portanto torna-se imprescindível o cálculo da constante em questão. A constante de normalização segundo a teoria dos sólidos [17] escreve-se do modo:

$$\int_{-d}^d |\chi(x)|^2 dx = 2d \quad (\text{A2.1})$$

Onde por enquanto foram omitidos os índices correspondentes aos números quânticos. Visto a forma explícita da função $\chi(x)$ dada no trabalho original [1] transforma-se a equação (A2.1) assim:

$$\int_{-d}^{-b} |\chi_1(x)|^2 dx + \int_{-b}^{-a} |\chi_2(x)|^2 dx + \int_{-a}^a |\chi_3(x)|^2 dx + \int_a^b |\chi_4(x)|^2 dx + \int_b^d |\chi_5(x)|^2 dx = 2d \quad (\text{A2.2})$$

Quanto às integrais da relação (A2.2) obtém-se:

$$\int_{-d}^{-b} |\chi_1(x)|^2 dx = (|A_1|^2 + |B_1|^2) \Delta_1 + \frac{A_1 B_1}{2ik} (e^{-2ikb} - e^{-2ikd}) - \frac{A_1 B_1}{2ik} (e^{2ikb} - e^{2ikd}) \quad (\text{A2.3})$$

$$\int_{-b}^{-a} |\chi_2(x)|^2 dx = (A_2 B_2 + A_2 B_2) \Delta + \frac{|A_2|^2}{2\kappa} (e^{-2\kappa a} - e^{-2\kappa b}) - \frac{|B_2|^2}{2\kappa} (e^{2\kappa a} - e^{2\kappa b}) \quad (\text{A2.4})$$

$$\int_{-a}^a |\chi_3(x)|^2 dx = (|A_3|^2 + |B_3|^2) 2a + \frac{A_3 B_3}{2ik} (e^{2ika} - e^{-2ika}) - \frac{A_3 B_3}{2ik} (e^{-2ika} - e^{2ika}) \quad (\text{A2.5})$$

$$\int_a^b |\chi_4(x)|^2 dx = (A_4 B_4 + A_4 B_4) \Delta + \frac{|A_4|^2}{2\kappa} (e^{2\kappa b} - e^{2\kappa a}) - \frac{|B_4|^2}{2\kappa} (e^{-2\kappa b} - e^{-2\kappa a}) \quad (\text{A2.6})$$

$$\int_b^d |\chi_5(x)|^2 dx = (|A_5|^2 + |B_5|^2) \Delta_1 + \frac{A_5 B_5}{2ik} (e^{2ikd} - e^{2ikb}) - \frac{A_5 B_5}{2ik} (e^{-2ikd} - e^{-2ikb}) \quad (\text{A2.7})$$

Onde todas as designações são adoptadas de [1].

A ideia básica dos cálculos posteriores é simples; a partir das condições de continuidade e do teorema de Flocke [17] exprimem-se os nove coeficientes em função linear de um só. Consegue-se assim excluir os coeficientes em questão das relações (A2.3) até (A2.7) e depois de substituir as expressões que se obterão na condição de normalização (A2.2) encontra-se a equação em relação a um só coeficiente antes mencionada.

Importa realçar que os cálculos podem ser feitos de maneira mais simples e transparente se se aplicar a técnica matricial. Introduce-se as matrizes $\hat{D}(\xi)$ e $\hat{L}(\xi)$ com as seguintes definições:

$$\hat{D}(\xi) = \hat{V}^{-1}(\kappa, \xi) \hat{V}(k, \xi) \quad \hat{L}(\xi) = \hat{V}^{-1}(k, \xi) \hat{V}(\kappa, \xi) \quad (\text{A2.8})$$

Visto as definições [1]

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

das relações (A2.8) resulta:

$$\hat{D}(\xi) = \frac{1}{2\kappa} \begin{pmatrix} \gamma e^{-\gamma\xi} & \gamma e^{-\gamma\xi} \\ \gamma e^{\gamma\xi} & \gamma e^{\gamma\xi} \end{pmatrix} \quad \hat{L}(\xi) = \frac{1}{2ik} \begin{pmatrix} \gamma e^{\gamma\xi} & -\gamma e^{-\gamma\xi} \\ -\gamma e^{\gamma\xi} & \gamma e^{-\gamma\xi} \end{pmatrix} \quad (\text{A2.9})$$

Onde $\gamma = \kappa + ik$ (A2.10)

Então segundo as condições de continuidade obtém-se:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{L}(-b) \hat{D}(-a) \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \hat{D}(-a) \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix} = \hat{D}(a) \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} = \hat{L}(b) \hat{D}(a) \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \quad (\text{A2.11})$$

As relações (A2.11) correspondem parcialmente ao primeiro passo do programa anteriormente esclarecido, pois os coeficientes são exprimidos em função de A_3 e B_3 através delas.

A energia potencial do portador é função par da coordenada x . Por isso as autofunções da equação de Schrödinger podem ser classificadas de acordo com a sua paridade em relação a troca x por $-x$. A simetria da energia admite as autofunções pares e ímpares. É conveniente considerar estes dois casos separadamente.

a) Normalização da função par.

Verifica-se que a função de onda $\chi(x)$ será par se os coeficientes A_i, B_i satisfizerem às condições:

$$A_3 = B_3; A_2 = B_4; B_2 = A_4; A_1 = B_5 \text{ e } B_1 = A_5 \quad (\text{A2.12})$$

Ao combinar as relações (A2.11) e (A2.12) obtém-se:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{L}(-b) \hat{D}(-a) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} A_3; \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \hat{D}(-a) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} A_3; \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix} = \hat{D}(a) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} A_3; \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} = \hat{L}(b) \hat{D}(a) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} A_3 \quad (\text{A2.13})$$

Daqui observa-se que todos os coeficientes são dados em função de um só coeficiente A_3

Substituindo as matrizes (A2.9) estabelece-se os coeficientes do modo:

$$\begin{aligned}
 A_1 &= \frac{A_3}{4ik\kappa} \left[\gamma^2 e^{-\dot{\gamma}\Delta} - \gamma^2 e^{\dot{\gamma}\Delta} + |\gamma|^2 \left(e^{-\dot{\gamma}b + \dot{\gamma}a} - e^{\dot{\gamma}b - \dot{\gamma}a} \right) \right] \\
 B_1 &= \frac{A_3}{4ik\kappa} \left[\gamma^2 e^{\dot{\gamma}\Delta} - \gamma^2 e^{-\dot{\gamma}\Delta} + |\gamma|^2 \left(e^{\dot{\gamma}b - \dot{\gamma}a} - e^{-\dot{\gamma}b + \dot{\gamma}a} \right) \right] \\
 A_2 &= \frac{A_3}{2\kappa} \left(\gamma e^{\dot{\gamma}a} + \gamma^* e^{\dot{\gamma}a} \right) & B_2 &= \frac{A_3}{2\kappa} \left(\gamma e^{-\dot{\gamma}a} + \gamma^* e^{-\dot{\gamma}a} \right) \\
 A_4 &= \frac{A_3}{2\kappa} \left(\gamma e^{-\dot{\gamma}a} + \gamma^* e^{-\dot{\gamma}a} \right) & B_4 &= \frac{A_3}{2\kappa} \left(\gamma e^{\dot{\gamma}a} + \gamma^* e^{\dot{\gamma}a} \right) \\
 A_5 &= \frac{A_3}{4ik\kappa} \left[\gamma^2 e^{\dot{\gamma}\Delta} - \gamma^2 e^{-\dot{\gamma}\Delta} + |\gamma|^2 \left(e^{\dot{\gamma}b - \dot{\gamma}a} - e^{-\dot{\gamma}b + \dot{\gamma}a} \right) \right] \\
 B_5 &= \frac{A_3}{4ik\kappa} \left[\gamma^2 e^{-\dot{\gamma}\Delta} - \gamma^2 e^{\dot{\gamma}\Delta} + |\gamma|^2 \left(e^{-\dot{\gamma}b + \dot{\gamma}a} - e^{\dot{\gamma}b - \dot{\gamma}a} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{A2.14}$$

Obviamente que as relações (A2.14) satisfazem às condições de simetria (A2.12) e asseguram a paridade da autofunção $\chi(x)$.

Introduzindo as designações :

$$A_1 = A_3 f \quad A_2 = A_3 \varphi \quad B_2 = A_3 \psi \tag{A2.15}$$

Transforma-se a condição de normalização (A2.2) de modo que permita encontrar o coeficiente A_3 .

$$|A_3|^2 = 2d \left\{ 4a + \frac{2\text{sen}2ka}{k} + 2 \left(\varphi \dot{\psi} + \dot{\varphi} \psi \right) \Delta + \frac{|\varphi|^2}{\kappa} \left(e^{-2\kappa a} - e^{-2\kappa b} \right) - \frac{|\psi|^2}{\kappa} \left(e^{2\kappa a} - e^{2\kappa b} \right) + 4|f|^2 \Delta_1 + \right. \\
 \left. + \frac{f^2}{ik} \left(e^{2ikd} - e^{2ikb} \right) - \frac{f^2}{ik} \left(e^{-2ikd} - e^{-2ikb} \right) \right\}^{-1} \tag{A2.16}$$

A expressão (A2.16) admite uma forma analítica mais transparente que resulta das condições de fronteira. Atendendo às condições de Flocke [17] escreve-se:

$$\begin{aligned}
 A_1 e^{-ikd} + B_1 e^{ikd} &= e^{2iqd} \left(A_5 e^{ikd} + B_5 e^{-ikd} \right) \\
 A_1 e^{-ikd} - B_1 e^{ikd} &= e^{2iqd} \left(A_5 e^{ikd} - B_5 e^{-ikd} \right)
 \end{aligned}$$

para se tomar em conta só a função par atribui-se o valor zero ao quase-vector q . Visto as relações (A2.13) e (A2.15) vem que:

$$f e^{ikd} = f e^{-ikd} \tag{A2.17}$$

Então das relações (A2.16) e (A2.17) resulta:

$$|A_3|^2 = 2d \left\{ 4a + \frac{2\text{sen}2ka}{k} + 2 \left(\dot{\varphi}\dot{\psi} + \dot{\varphi}\dot{\psi} \right) \Delta + \frac{|\dot{\varphi}|^2}{\kappa} (e^{-2\kappa a} - e^{-2\kappa b}) - \frac{|\dot{\psi}|^2}{\kappa} (e^{2\kappa a} - e^{2\kappa b}) + 4|f|^2 \Delta_1 + \frac{2|f|^2}{k} \text{sen}2k\Delta \right\} \quad (\text{A2.18})$$

Atendendo as definições (A2.15) pode-se deduzir as formas explícitas referentes às funções

$\dot{\varphi}\dot{\psi} + \dot{\varphi}\dot{\psi}$, $|\dot{\varphi}|^2$, $|\dot{\psi}|^2$ e $|f|^2$, obtendo-se:

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}\dot{\psi} + \dot{\varphi}\dot{\psi} &= \frac{1}{4\kappa^2} \left[\left(\gamma e^{\dot{\gamma}a} + \dot{\gamma} e^{\gamma a} \right) \left(\gamma e^{-\dot{\gamma}a} + \dot{\gamma} e^{-\gamma a} \right) + \left(\dot{\gamma} e^{\gamma a} + \gamma e^{\dot{\gamma}a} \right) \left(\dot{\gamma} e^{-\gamma a} + \gamma e^{-\dot{\gamma}a} \right) \right] = \\ &= \frac{1}{2\kappa^2} \left[\gamma^2 + \dot{\gamma}^2 + |\gamma|^2 \left[e^{a(\gamma - \dot{\gamma})} + e^{-a(\gamma - \dot{\gamma})} \right] \right] = \frac{2}{\kappa^2} (\kappa \cos ka - k \text{sen}ka) (\kappa \cos ka + k \text{sen}ka) \quad (\text{A2.19}) \end{aligned}$$

$$|\dot{\varphi}|^2 = \frac{1}{4\kappa^2} \left[\left(\gamma e^{\dot{\gamma}a} + \dot{\gamma} e^{\gamma a} \right) \left(\dot{\gamma} e^{\gamma a} + \gamma e^{\dot{\gamma}a} \right) \right] = \frac{e^{2\kappa a}}{\kappa^2} (\kappa \cos ka + k \text{sen}ka)^2 \quad (\text{A2.20})$$

$$|\dot{\psi}|^2 = \frac{1}{4\kappa^2} \left[\left(\dot{\gamma} e^{-\gamma a} + \gamma e^{-\dot{\gamma}a} \right) \left(\gamma e^{-\dot{\gamma}a} + \dot{\gamma} e^{-\gamma a} \right) \right] = \frac{e^{-2\kappa a}}{\kappa^2} (\kappa \cos ka - k \text{sen}ka)^2 \quad (\text{A2.21})$$

$$|f|^2 = \frac{1}{8k^2\kappa^2} \left[(\kappa^4 + k^4) + (\kappa^4 - k^4) \cos 2ka (e^{-\kappa\Delta} - e^{\kappa\Delta})^2 + 2\kappa^2 k^2 (e^{-\kappa\Delta} + e^{\kappa\Delta})^2 + 2\kappa k (\kappa^2 + k^2) (e^{-2\kappa\Delta} - e^{2\kappa\Delta}) \text{sen}2ka \right]$$

Após reagrupar os termos proporcionais a $e^{-2\kappa\Delta}$ e $e^{2\kappa\Delta}$ e aplicando as propriedades das funções $\cos 2ka$ e $\text{sen}2ka$ a última expressão reduz-se para:

$$|f|^2 = \frac{1}{4k^2\kappa^2} \left\{ \kappa^2 \left[e^{-\kappa\Delta} (\kappa \cos ka + k \text{sen}ka) - e^{\kappa\Delta} (\kappa \cos ka - k \text{sen}ka) \right]^2 + \left[+ k^2 \left[e^{-\kappa\Delta} (\kappa \cos ka + k \text{sen}ka) + e^{\kappa\Delta} (\kappa \cos ka - k \text{sen}ka) \right]^2 \right] \right\} \quad (\text{A2.22})$$

Quanto a equação (A2.17) é transformada do modo:

$$\left(\dot{f} - f \right) \cos kd + i \left(\dot{f} + f \right) \text{sen}kd = 0$$

Visto a definição da função f decorre que:

$$(\kappa \cos ka - k \text{sen}ka) (\kappa \cos \Delta_1 - k \text{sen}k\Delta_1) - e^{-2\kappa\Delta} (\kappa \cos k\Delta_1 + k \text{sen}k\Delta_1) (\kappa \cos ka + k \text{sen}ka) = 0 \quad (\text{A2.23})$$

Introduzindo as designações:

$$\Gamma(\xi) = \kappa \cos k\xi - k \text{sen}k\xi \quad \text{e} \quad P(\xi) = \kappa \cos k\xi + k \text{sen}k\xi \quad (\text{A2.24})$$

Pode-se transformar a equação secular (A2.23) para a forma:

$$\Gamma(a)\Gamma(\Delta_1) - e^{-2\kappa\Delta} P(a)P(\Delta_1) = 0 \quad (\text{A2.25})$$

A equação secular (A2.25) permite simplificar cada uma das expressões (A2.19) até (A2.22) reduzindo-as para formas mais simétricas. Tendo em conta as definições (A2.24) obtém-se:

$$\varphi \dot{\psi} + \dot{\varphi} \psi = \frac{2}{\kappa^2} \Gamma(a)P(a) \quad (\text{A2.26})$$

Abrindo as chavetas e reagrupando os termos tem-se:

$$|f|^2 = \frac{1}{4k^2\kappa^2} \left\{ \kappa^2 + k^2 \left[e^{-2\kappa\Delta} P^2(a) + e^{2\kappa\Delta} \Gamma^2(a) \right] + 2(k^2 - \kappa^2) P(a)\Gamma(a) \right\}$$

substitui-se um dos factores P(a) e $\Gamma(a)$ entre as chavetas segundo a equação (A2.25) obtendo-se:

$$|f|^2 = \frac{1}{4k^2\kappa^2} \left\{ \kappa^2 + k^2 \left[P(a)\Gamma(a) \left(\frac{\Gamma(\Delta_1)}{P(\Delta_1)} + \frac{P(\Delta_1)}{\Gamma(\Delta_1)} \right) \right] + 2(k^2 - \kappa^2) P(a)\Gamma(a) \right\} \quad (\text{A2.27})$$

Dai decorre que:

$$\begin{aligned} |f|^2 &= \frac{\Gamma(a)P(a)}{4k^2\kappa^2\Gamma(\Delta_1)P(\Delta_1)} \left\{ \kappa^2 + k^2 \left[\Gamma^2(\Delta_1) + P^2(\Delta_1) \right] + 2(k^2 - \kappa^2) P(\Delta_1)\Gamma(\Delta_1) \right\} = \\ &= \frac{\Gamma(a)P(a)}{4k^2\kappa^2\Gamma(\Delta_1)P(\Delta_1)} \left\{ \kappa^2 \left[\Gamma(\Delta_1) - P(\Delta_1) \right]^2 + k^2 \left[\Gamma(\Delta_1) + P(\Delta_1) \right]^2 \right\} \end{aligned} \quad (\text{A2.28})$$

Atendendo as definições (A2.24) é fácil verificar que a expressão entre chavetas é igual a $4k^2\kappa^2$ sendo que;

$$|f|^2 = \frac{\Gamma(a)P(a)}{\Gamma(\Delta_1)P(\Delta_1)} \quad (\text{A2.29})$$

Visto as relações (A2.27 até A2.29) e omitindo os factores de fase insignificantes encontra-se:

$$\varphi = \frac{e^{\kappa a}}{\kappa} P(a) \quad (\text{A2.30})$$

$$\psi = \frac{e^{-\kappa a}}{\kappa} \Gamma(a) \quad (\text{A2.31})$$

$$f = \left[\frac{\Gamma(a)P(a)}{\Gamma(\Delta_1)P(\Delta_1)} \right]^{1/2} \quad (\text{A2.32})$$

Define-se $G(a, \Delta_1)$ pela expressão:

$$\begin{aligned} G^2(a, \Delta_1) &= \left(4a + \frac{2\text{sen}2ka}{k} \right) \Gamma(\Delta_1)P(\Delta_1) + \left(4\Delta_1 + \frac{2\text{sen}2k\Delta_1}{k} \right) \Gamma(a)P(a) + \frac{2k}{\kappa^2} \left[\Gamma(a)P(a)\text{sen}2k\Delta_1 + \Gamma(\Delta_1)P(\Delta_1)\text{sen}2ka \right] + \\ &+ \frac{4\Delta}{\kappa^2} \Gamma(a)P(a)\Gamma(\Delta_1)P(\Delta_1) \end{aligned} \quad (\text{A2.33})$$

das relações (A2.15), (A2.18), (A2.30) até (A2.33) finalmente resulta:

$$A_1 = \sqrt{2d} \frac{[\Gamma(a)P(a)]^{1/2}}{G(a, \Delta_1)} \quad (A2.34)$$

$$A_2 = \frac{e^{\kappa a}}{\kappa} \sqrt{2d} \frac{P(a)[\Gamma(\Delta_1)P(\Delta_1)]^{1/2}}{G(a, \Delta_1)} \quad (A2.35)$$

$$B_2 = \frac{e^{-\kappa a}}{\kappa} \sqrt{2d} \frac{\Gamma(a)[\Gamma(\Delta_1)P(\Delta_1)]^{1/2}}{G(a, \Delta_1)} \quad (A2.36)$$

$$A_3 = \sqrt{2d} \frac{[\Gamma(\Delta_1)P(\Delta_1)]^{1/2}}{G(a, \Delta_1)} \quad (A2.37)$$

b) Normalização da função ímpar.

Os coeficientes da autofunção ímpar têm que satisfazer às condições:

$$A_3 = -B_3, A_2 = -B_4, B_2 = -A_4, A_1 = -B_5, B_1 = -A_5 \quad (A2.38)$$

Das relações gerais (A2.11) e das condições (A2.20) decorre:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{L}(-b)\hat{D}(-a) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} A_3; \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \hat{D}(-a) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} A_3; \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix} = \hat{D}(a) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} A_3; \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} = \hat{L}(b)\hat{D}(a) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} A_3 \quad (A2.39)$$

Atendendo às fórmulas (A2.9) podemos exprimir os coeficientes A_i, B_i em função de A_3 obtendo-se:

$$\left. \begin{aligned} A_1 &= \frac{A_3}{4ik\kappa} \left[\gamma^2 e^{-\dot{\gamma}\Delta} - \gamma^* e^{\dot{\gamma}\Delta} - |\gamma|^2 \left(e^{-\dot{\gamma}b+\dot{\gamma}a} - e^{\dot{\gamma}b-\dot{\gamma}a} \right) \right] \\ B_1 &= \frac{A_3}{4ik\kappa} \left[-\gamma^2 e^{\dot{\gamma}\Delta} + \gamma^* e^{-\dot{\gamma}\Delta} - |\gamma|^2 \left(e^{-\dot{\gamma}b+\dot{\gamma}a} - e^{\dot{\gamma}b-\dot{\gamma}a} \right) \right] \\ A_2 &= \frac{A_3}{2\kappa} \left[\gamma e^{\dot{\gamma}a} - \gamma^* e^{\dot{\gamma}a} \right] & B_2 &= \frac{A_3}{2\kappa} \left[\gamma e^{-\dot{\gamma}a} - \gamma^* e^{-\dot{\gamma}a} \right] \\ A_4 &= \frac{A_3}{2\kappa} \left[\gamma e^{-\dot{\gamma}a} - \gamma^* e^{-\dot{\gamma}a} \right] & B_4 &= \frac{A_3}{2\kappa} \left[\gamma e^{\dot{\gamma}a} - \gamma^* e^{\dot{\gamma}a} \right] \\ A_5 &= \frac{A_3}{4ik\kappa} \left[\gamma^2 e^{\dot{\gamma}\Delta} - \gamma^* e^{\dot{\gamma}\Delta} - |\gamma|^2 \left(e^{\dot{\gamma}b-\dot{\gamma}a} - e^{-\dot{\gamma}b+\dot{\gamma}a} \right) \right] \\ B_5 &= \frac{A_3}{4ik\kappa} \left[-\gamma^2 e^{-\dot{\gamma}\Delta} + \gamma^* e^{\dot{\gamma}\Delta} - |\gamma|^2 \left(e^{\dot{\gamma}b-\dot{\gamma}a} - e^{-\dot{\gamma}b+\dot{\gamma}a} \right) \right] \end{aligned} \right\} (A2.40)$$

É fácil ver que as expressões (A2.40) satisfazem de facto às condições (A2.38).

As designações

$$f_1 = \frac{1}{4ik\kappa} \left[\gamma^2 e^{-\dot{\gamma} \Delta} - \gamma^* e^{\dot{\gamma} \Delta} - |\gamma|^2 \left(e^{-\dot{\gamma} b + \dot{\gamma} a} - e^{\dot{\gamma} b - \dot{\gamma} a} \right) \right] \quad (A2.41)$$

$$\varphi_1 = \frac{1}{2\kappa} \left(\gamma e^{\dot{\gamma} a} - \gamma^* e^{\dot{\gamma} a} \right) \quad \psi_1 = \frac{1}{2\kappa} \left(\gamma e^{-\dot{\gamma} a} - \gamma^* e^{-\dot{\gamma} a} \right)$$

Permite escrever as expressões (A2.40) do modo:

$$A_1 = A_3 f_1 \quad B_1 = -A_3 f_1^* \quad A_2 = A_3 \varphi_1 \quad B_2 = A_3 \psi_1 \quad A_4 = A_3 \psi_1^* \quad B_4 = A_3 \varphi_1^* \quad (A2.42)$$

Observa-se que todos os coeficientes A_i, B_i são expressos por via de um só coeficiente, nomeadamente, A_3 . Por sua vez o teorema de Flocke [17] resulta a equação secular respectiva a $q=0$:

$$f_1 e^{-ikd} = f_1^* e^{ikd} \quad (A2.43)$$

Cada uma das integrais de (A2.3 até A2.7) de acordo com as relações (A2.42) admite a representação em função de um só coeficiente. Importa realçar que os factores f_1^2 e f_1^{*2} que aparecem durante as transformações das fórmulas (A2.3 e A2.70) devem ser modificados conforme a equação secular, da seguinte maneira:

$$f_1^2 = |f_1|^2 e^{2ikd} \quad \text{ou} \quad f_1^{*2} = |f_1|^2 e^{-2ikd}$$

depois de terem sido feitas essas transformações combinando as relações que se obterão, com a condição de normalização (A2.2) vem o resultado respectivo ao coeficiente A_3 , isto é:

$$|A_3|^2 = 2d \left\{ 4a - \frac{2\text{sen}2ka}{k} + 2\Delta \left(\varphi_1 \psi_1^* + \varphi_1^* \psi_1 \right) + \frac{|\varphi_1|^2}{\kappa} \left(e^{-2\kappa a} - e^{-2\kappa b} \right) - \frac{|\psi_1|^2}{\kappa} \left(e^{2\kappa a} - e^{2\kappa b} \right) + \left(4\Delta_1 - \frac{2\text{sen}2k\Delta_1}{k} \right) |f_1|^2 \right\}^{-1} \quad (A2.44)$$

Vista a definição (A2.41), a equação secular (A2.43) pode ser especificada para a forma:

$$(\kappa \text{sen}ka + k \cos ka)(\kappa \text{sen}k\Delta_1 + k \cos k\Delta_1) - e^{-2\kappa\Delta} (\kappa \text{sen}ka - k \cos ka)(\kappa \text{sen}k\Delta_1 - k \cos k\Delta_1) = 0 \quad (A2.45)$$

Designa-se:

$$M(\xi) = \kappa \text{sen}k\xi + k \cos k\xi \quad \text{e} \quad N(\xi) = \kappa \text{sen}k\xi - k \cos k\xi \quad (A2.46)$$

Então a equação (A2.45) pode ser reduzida do modo:

$$M(a)M(\Delta_1) - e^{-2\kappa\Delta} N(a)N(\Delta_1) = 0 \quad (\text{A2.47})$$

As definições (A2.41 e A2.46) permitem exprimir φ_1, ψ_1 e f_1 em termos das grandezas M e N . É fácil verificar que se obtém:

$$\varphi_1 = -\frac{i}{\kappa} e^{\kappa a} N(a) ; \quad \psi_1 = -\frac{i}{\kappa} e^{-\kappa a} M(a) ; \quad f_1 = -e^{ikd} \left[\frac{N(a)M(a)}{N(\Delta_1)M(\Delta_1)} \right]^{1/2} \quad (\text{A2.48})$$

Sublinha-se que o factor de fase insignificante foi omitido na última das relações (A2.48). este factor é de facto irrelevante pois na equação (A2.44) f_1 fica em combinação com f_1^* . O factor de fase não modifica o valor de $|f_1|^2$ e por isso pode ser omitido.

Substituindo as relações (A2.48) consegue-se expressar o termo entre chavetas da fórmula (A2.44) através das funções M e N . Nesta transformação aparecem os factores exponenciais $e^{-2\kappa\Delta}$ e $e^{2\kappa\Delta}$. Estes podem ser excluídos com base na equação (A2.47). Por analogia ao caso respectivo a função par é conveniente introduzir uma função $Q(a, \Delta_1)$ que se determina do modo;

$$Q^2(a, \Delta_1) = \left(4a - \frac{2\text{sen}2ka}{k} \right) N(\Delta_1)M(\Delta_1) + \left(4\Delta_1 - \frac{2\text{sen}2k\Delta_1}{k} \right) N(a)M(a) + \frac{4\Delta_1}{\kappa^2} N(a)M(a)N(\Delta_1)M(\Delta_1) - \frac{2k}{\kappa^2} [N(a)M(a)\text{sen}2k\Delta_1 + N(\Delta_1)M(\Delta_1)\text{sen}2ka] \quad (\text{A2.49})$$

Atendendo a definição (A2.49) juntamente com a fórmula (A2.44), obtém-se:

$$A_3 = \sqrt{2d} \frac{[N(\Delta_1)M(\Delta_1)]^{1/2}}{Q(a, \Delta_1)} \quad (\text{A2.50})$$

$$A_1 = -\sqrt{2d} \frac{[N(a)M(a)]^{1/2}}{Q(a, \Delta_1)} \quad (\text{A2.51})$$

$$A_2 = -i \frac{\sqrt{2d}}{\kappa} e^{\kappa a} \frac{N(a)[N(\Delta_1)M(\Delta_1)]^{1/2}}{Q(a, \Delta_1)} \quad (\text{A2.52})$$

$$B_2 = -i \frac{\sqrt{2d}}{\kappa} e^{-\kappa a} \frac{N(a)[N(\Delta_1)M(\Delta_1)]^{1/2}}{Q(a, \Delta_1)} \quad (\text{A2.53})$$

$$B_1 = \sqrt{2d} \frac{[N(a)M(a)]^{1/2}}{Q(a, \Delta_1)} \quad (\text{A2.54})$$

Quanto aos restantes coeficientes, determinam-se pelas relações acima escritas junto às condições de paridade dadas pelas expressões (A2.38).