ESTUDO DA INFLUÊNCIA DE LASERS NO APRISIONAMENTO DE PORTADORES, POR IMPUREZAS EM SEMICONDUTORES SUBM<u>E</u> TIDOS A CAMPOS MAGNÈTICOS FORTES.

Antônio Boulhosa Nassar

Oriéntador: Prof. Dr. Luiz Carlos de M. Miranda

Tese apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos requisitos para obtenção do grau de Mestre em Física.

JULHO/1980

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPTILAN UNSTITUTO DE FÍSICA INSLIDTECA

RESUMO

Neste trabalho estudou-se a blindagem de impurezas carregadas em semicondutores, submetidos a campos magnéticos fortes uniformes e radiação laser, em baixas temperaturas, e sua influência no aprisionamento dos portadores, no limite ultra-quânt<u>i</u> co

Verificou-se que a energia de ligação reduz-se dra<u>s</u> ticamente, quando a frequência do laser situa-se próxima da frequência ciclotrônica e aumenta enormemente quando próxima da frequência de plasma.

ABSTRACT

In this work the features of the screening of an ionized impurity is presented for semiconductors in the simult<u>a</u> neous presence of a laser field and a strong d.c. magnetic field at very low temperatures, taking into account these effects on the carriers freezeout in the ultra-quantum regime. It has been show specially that the carriers binding energy reduces abruptly when the laser is close to the cyclotron frequency and convers<u>e</u> lly diverges when is close to the plasma frequency.

"O mundo moderno, com seu fanatismo do progresso material, não desconhece o que deve ao trabalho dos homens de ciência. Nos países novos este fanatismo é levado ao auge e mes mo pessoas muito instruidas ignoram por completo que exista um ideal científico suverior ao do homem que fabrica mil automóveis por dia ou do que opera uma apendicite em dez minutos. Daí a opinião quase unanimemente admitida entre nós: a ciência é útil porque dela precisam os engenheiros, os médicos, os industriais. os militares; mas não vale a pena fazê-la no Brasil porque ē mais cômodo e mais barato importá-la na Europa, na quantidade que for estritamente suficiente para o nosso consumo. Tal a menta lidade dominante entre aqueles que nos educam e, por mais forte razão, entre aqueles que nos governam".

> Amoroso Costa, "Pela Ciência Pura", maio de 1923.

- Ao Prof. Dr. Luiz Carlos Miranda, orientador da tese, pela sugestão do tema, pelo apoio, incentivo e contribuição valiosa à minha formação científica, e com quem foi um prazer trabalhar.
 Aos Profs. Drs. José Maria Bassalo e Paulo de Tarso Alencar, por suas amizades, constantes interesses, incentivo e encoraj<u>a</u> mento no decorrer destes anos. Meu respeito e admiração por t<u>u</u> do que têm feito pela formação e educação científica no Estado do Pará, e através dos quais dei os primeiros passos no aprendizado de física.
- Aos amigos Luiz Sérgio Cancela, Carlos Ferrari, Antônio Sampaio, Mário Tenan e Miriná Lima pela boa vontade demonstrada quando recorria às suas opiniões e criticas relacionadas a este trab<u>a</u> lho.
- Ao amigo Palmeira e ao amigo Carlos André Turcinelli pelo seu trabalho de xerografia.
- Enfim a todos os amigos paraenses pela solidariedade e camaradagem com que contei em todas as horas, contribuição vital e indelével para o início e conclusão deste trabalho.

	Introdução1
	Capitulo I
	Potencial Efetivo da Impureza de Carga Estática
	I.1 - Descrição do Modêlo Matemático
	I.2 - Formulação Matemática8
	I.3 - Tensor Dielétrico11
	Capitulo II
	Energia de Ligação
	II.1 - Expressão para a Energia de Ligação
	II.2 - Constante Dielétrica Efetiva22
	II.3 - Comentários
	Capitulo III
	Ressonância $\omega_0^{\rightarrow} \omega_c$ no Limite Ultra-quântico
	III.1 - Calculo de \mathbf{E}_0 para $\omega_0 \rightarrow \omega_c$
	III.2 - Alguns Valores Numéricos dos Resultados Obtidos31
	Capitulo IV
	Ressonância w ₀ →w _p no Limite Ultra-quântico
	IV.1 - Caso de Laser Intenso
	IV.2 - Caso de Laser Fraco
	Capitulo V
	Conclusões
_	Apêndice A40
	Apêndice B
-	Referências

· .

.

Os efeitos de campos magnéticos fortes, sôbre as propriedades físicas de condução elétrica, em semicondutores extrinsecos, têm sido amplamente investigados, principalmente a pa<u>r</u> tir de Yafet et al ⁽¹⁾, onde foi apresentado uma teoria concerne<u>n</u> te ao efeito de tais campos, sôbre os niveis de energia e funções de onda de uma impureza, tipo hidrogenóide. Conclui-se, que a variação nos niveis de energia, de um estado de impureza, p. ex. , para o caso de um semicondutor dopado tipo n, se devia ao decréscimo do número de elétrons, na banda de condução, em presença de campos magnéticos fortes e em baixas temperaturas.

-2-

Tentativas experimentais de observação deste efeito foram feitas por Amirkhanov et al (2), medindo a constante de Hall, em amostras de GaAs, dopado (tipo n), com concentração da ordem de 10^{16} cm⁻³, temperatura de 4,2 K e campos magnéticos próximos a 80 kG. Concluiram, que o aumento bastante acentuado, na constante de Hall, sem dúvida, vinha do fato de que os elétrons de condução passavam a um estado de congelamento, quando da aplicação do campo. O valor crítico de tal campo, para o aparecimento do efeito, dependia da concentração da impureza doadora. Aumen tando-se a concentração maior seria o valor do campo magnético p<u>a</u> ra atingir o aprisionamento dos portadores às impurezas do semicondutor.

Em suma, a diferença entre o nivel de impureza do<u>a</u> dora, no caso, e a banda de condução, aumenta com a introdução do campo magnético forte, dai a distribuição dos elétrons entre a banda de condu-ão e os estados de impureza ficar alterada, até o completo congelamento (freeze out).

Na discussão do efeito Hall, é relevante um outro efeito galvanomagnético: magneto-resistência. Wallace⁽³⁾ afirma um efeito notório que, depois de um certo valor alto do campo ma<u>g</u> nético, p. ex., 80 kG para uma amostra de GaAs - n, a 2 K, conce<u>n</u> tração de 10¹⁶ cm⁻³, a curva de magnetoresistência versus campo, que aumenta com segunda potência de sua intensidade, decresce rapidamente. Tal decréscimo foi atribuido ao efeito de blindagem , no potencial da impureza. Daí um modêlo teórico mais abrangente do que o de Yafet et al, deve ser elaborado considerando-se os efeitos de blindagem. Pois, por um lado o campo magnético aumenta a energia de ligação e por outro, a blindagem pelos elétrons de condução a faz diminuir

-3-

Dyakonov et al ⁽⁴⁾, Poehler ⁽⁵⁾ e Fenton/Haering⁽⁵⁾ corroboram dizendo que se os niveis de impurezas estão suficient<u>e</u> mente próximos à banda de condução, pode ocorrer a presença de um número consideravelmente grande de elétrons de condução, de mane<u>i</u> ra a se notar os efeitos de blindagem. E mais: para um valor qua<u>l</u> quer do campo, nós podemos esperar que exista uma concentração critica de elétrons de condução, tal que não haja mais estados l<u>i</u> gados. Obviamente, esta concentração deve crescer se o campo for aumentado.

Como em exemplo elucidativo, consideremos um semicondutor dopado a 0 K. Neste caso, como em um metal, a blindagem dos potenciais dos ions de impurezas, por elétrons quase livres , é suficiente para impedir a ligação dos elétrons de condução a estas impurezas. Se um campo magnético é aplicado e continuamente aumentado a partir do zero, chegaremos a uma situação na qual a concentração dos elétrons de condução é a concentração crítica n<u>e</u> cessária, para impedir a ligação dos portadores àquelas impurezas. Um acréscimo infinitesimal no campo, além do valor crítico, intr<u>o</u> duz um estado ligado. Assim elétrons que tornaram-se ligados às impurezas, reduzem o número de portadores na banda de condução, que por consequência imediata aumentam a energia de ligação, dev<u>i</u> do à diminuição da blindagem.

O processo é regenerativo e em O K, o número de

elétrons na banda de condução, como função do campo magnético varia descontinuamente. Isto então é uma transição de Mott, introd<u>u</u> zida pelo aumento de campo. Se a temperatura não é O K, não ocorre mais descontinuidade no número de elétrons de condução, devido a excitação térmica manter alguns elétrons na banda de condução , em campos onde a energia de ligação é pequena. No entanto, uma v<u>a</u> riação bem acentuada na densidade dos portadores pode ser esperada em temperaturas finitas sob condições adequadas.

-4-

Assim, tendo-se em vista toda a discussão exposit<u>i</u> va acima, a exemplo de Wallace (3) e Jog/Wallace (7), considerar<u>e</u> mos os efeitos da blindagem, no potencial da impureza.

No Capitulo I nos dedicamos ao entendimento detalhado dos efeitos da blindagem sobre o potencial da impureza, ago ra na presença simultânea de campos magnéticos fortes e radiação de laser - M. Lima et al ⁽¹²⁾. Isto é feito resolvendo-se o problema quântico de um elétron submetido à ação de campos externos. Primeiramente supomos campo magnético estático e uniforme e radia ção eletromagnética (laser), dai a forma explicita de como se reflete sobre a blindagem coulombiana - elétron-impureza, no semicondutor, a presença de um campo de laser, associado ou não a um campo magnético. Para tal usa-se formàlismo caracterizado pelo uso de transformações unitárias associadas a translações espaciais e de momentum - Miranda ⁽¹⁷⁾. A impureza interage com o meio atr<u>a</u> vés de um potencial fenomenológico, eliminando-se a dependência no campo eletromagnético do termo de energia cinética na Hamiltoniana transferindo-se para o termo da energia potencial aplicando se ao vetor posição um deslocamento que é função do campo, assim os efeitos dos campos magnéticos e laser é feito em tratamento não perturbativo, i. e., sum aproximações.

No Capitulo II estudamos o problema de estados ligados a uma impureza isolada, no regime ultra-quântico, usando o potencial blindado coulombiano do Capitulo I - Jog/Wallace ⁽⁷⁾ e potencial blindado coulombiano do Capitulo I – Jog/Wallace (7) e Wallace (3). A luz deste modêlo, que mostra ser tal potencial ef<u>e</u> tivo enormemente assimétrico, no regime ultra-quântico – pois enquanto o alcance do potencial na direção transversal, aos campos eletromagnéticos e magnéticos é comparavel ao raio ciclotrônico, o alcance do mesmo ao longo desta direção é pequeno comparado com as dimensões da função de onda – vamos em busca da expressão para a Energia de Ligação dos portadores, usando a aproximação δ (delta) para o potencial na direção dos campos magnéticos e radiação eletromagnética. No Apendice B tecemos algumas considerações esp<u>e</u> cificas a respeito de tal aproximação.

-5-

Por fim, nos dois capitulos subsequentes 3 e 4, pa ra alguns valores de campos magnéticos fortes verificamos a depen dência da energia de ligação quanto à frequência do laser, paraintensidades bem pequenas ou expressivamente intensas. Mostramos assim que quando a frequência do laser aproxima-se à frequência ciclotrônica há o colapso da interação ou quase nenhum aprisionamento dos portadores, de modo a encontrarmos a energia de ligação muito pequena - Capítulo III. E quando a frequência do laser tende a frequência de plasma encontramos o colapso da blindagem ou forte aprisionamento dos portadores, de maneira inversa, com energia de ligação muito alta - Capitulo IV. Restando salientar sem pre que viu-se uma dependência primordial, quando nestas ressonâ<u>n</u> cias, à frequência do laser e não às intensidades de ambos os cam pos esternos atuantes, fato este bastante relevante.

No Capitulo V, então, fazemos um resumo geral dos principais resultados e procuramos situá-lo no contexto geral do campo de interação de radiação com matéria, matizando algumas de suas limitações, quanto ao modêlo teórico proposto, e destacando suas predições sôbre possíveis implicações tecnológicas.

POTENCIAL EFETIVO DA

IMPUREZA DE CARGA ES

TĂTICA

I.1 - DESCRIÇÃO DO MODÊLO MATEMÁTICO

Primeiramente nos valeremos do método de Aproximação de Fase Aleatória (RPA) para o cálculo das propriedades diel<u>é</u> tricas da blindagem das impurezas do nosso sistema. Método consagrado e largamente usado por Ehrenreich/Cohen ⁽⁸⁾, Zyryanov ⁽⁹⁾, Quinn/Rodrigues ⁽¹⁰⁾, Mermin/Canel ⁽¹¹⁾, Harris ⁽¹³⁾, Wallace ⁽³⁾, Lima et al ⁽¹²⁾.

Em tal tratamento consideramos a interação coulombiana entre os elétrons como um campo auto-consistente ("Self Co<u>n</u> sistent field") ⁽⁸⁾, ⁽⁹⁾, ⁽¹¹⁾, ⁽¹³⁾.

Em nossa função Hamiltoniana, que descreve o sist<u>e</u> ma, não levaremos em conta o termo de spin usual de Landau (Landau & Lifchitz ⁽¹⁴⁾). Daí nossas considerações envolverem apenas a parte concernente as coordenadas de espaço e tempo. Nesta Hami<u>l</u> toniana, faremos uma simplificação em nosso vetor potencial $A(\vec{x},t)$ do campo eletromagnético: substituiremos $A(\vec{x},t)$ por somente sua parte temporal A(t), que é uma aproximação válida, devido as dimensões a reç ão de interação serem bem menores do que o comprimento de onda da radiação eletromagnética. Conhecido como Aproximação Dipolar ("Dipole Approximation") (Seely ⁽¹⁵⁾, Miranda ⁽¹⁶⁾).

Usaremos, ainda, para tal, a aproximação eletrost \underline{i} tica sintetizada por Lima et al (12) e Mermin/Canel (11).

I.2 - FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Seja o campo magnético na direção do eixo z posit<u>i</u> vo. Desprezando a dependência espacial do campo eletromagnético do feixe do laser, o vetor potencial do laser e do campo magnético será então

-8-

$$\vec{A}(y,t) = \vec{A}(t) - H y \hat{e}_{x}$$
⁽¹⁾

onde

$$\vec{A}(t) = \frac{c E_0}{\omega_0} | \hat{e}_x \cos(\omega_0 t) + \hat{e}_y \sin(\omega_0 t) |$$
(2)

sendo

H = corresponde a intensidade do campo magnético,

 $\vec{A}(t)$ = representando o campo do feixe de laser, suposto ser uma onda plana, de polarização circular para a direita, para-

lelo ao eixo z, cuja frequência é w_o (Miranda ⁽¹⁷⁾ e Seely⁽¹⁵⁾⁾ A equação de Schroedinger, dependente do tempo é:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = I\!\!I \Psi(\vec{x}, t)$$
(3)

onde

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m^{\star}} \left| \hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(y, t) \right|^{2} + e\Phi(\vec{x}, t)$$
(4)

ou

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m^{\star}} \left| \hat{p} + \frac{e}{c} H_y \hat{e}_x - \frac{e}{c} \dot{A}(t) \right|^2 + e\Phi(\vec{x}, t)$$
(5)

cuja solução está desenvolvida no Apêndice A deste trabalho, e tem como resultado:

$$\Psi_{\alpha}(\vec{x},t) = U\Phi_{\alpha}(\vec{x},t)$$
 (6)

onde

$$U = exp\left(i\frac{\vec{\delta}(t)\cdot\vec{p}}{\hbar}\right) exp\left(i\frac{\vec{\xi}(t)\cdot x}{\hbar}\right) exp\left(-i\frac{\vec{\eta}(t)}{\hbar}\right)$$
(7)

com

$$\begin{split} \overline{\delta}(t) &= -r(t) \ \widehat{e}_{x} + s(t) \ \widehat{e}_{y} \\ \overline{t}(t) &= Q(t) \ \widehat{e}_{y} \\ t \ y \\ r(t) &= \frac{1}{m} \left[dt' \mid G(t') - \frac{e}{c} A_{x}(t') \mid \right] \end{split} \tag{8}$$

$$s(t) = \frac{G(t)}{m\omega_c}$$

$$\eta(t) = \frac{1}{2m} \int dt' \left[\frac{e^2 A^2(t')}{e^2} + Q^2(t') - \frac{2e}{c} Q(t') A_y(t') - G^2(t') \right]$$

-9-

 $\Phi_{\alpha}(\vec{x},t) = corresponde a solução da equação de Schroedinger pa$ ra um elétron, em um campo magnético uniforme sem nenhuma radiação presente e cujo indice inferior esta relacionado aosnúmeros quânticos de Landau (n, p_r, p_z). A saber

$$\Phi_{\alpha}(x,t) = exp \left| -\frac{i}{\hbar} t E_{\alpha} \right| exp \left| \frac{i p_x x + i p_z z}{\hbar} \right| \Phi_n(\xi)$$

$$\Phi_n(\xi) = \left(2^n n \left| \pi^{1/2} t \right)^{-1/2} exp \left(-\frac{\xi^2}{2} \right) H_n(\xi) ; \quad \xi = \frac{y - t^2 p_x}{t}$$
(9)

$$\begin{split} & \omega_c = \frac{e}{m \star c} \quad \text{corresponde a frequência ciclotrônica} \\ & m \star = \text{massa efetiva do elétron ;} \quad l^2 = \frac{\hbar}{m \star \omega_c} \quad \acute{e} \text{ o raio ciclo-} \\ & \text{trônico;} \quad H_n(\zeta) = \text{função de Hermite e} \\ & e \phi(\vec{x}, t) = \text{potencial de interação referente a carga estática de} \\ & de impureza. \end{split}$$

As funções reais Q(t) e g(t) são determinadas por

$$G(t) = Q(t) = \frac{\omega_c}{c} \int^t dt' \left| A_y(t') - iA_x(t') \right| \exp(i\omega_c(t-t')) \right|$$
(10)

onde

 $A_{y}(t) \in A_{y}(t)$ são as componentes de $\overline{A}(t)$.

Fisicamente, a equação (6) significa que fazendo translações de espaço e de momento, passamos da representação Y, que é dependente da radiação eletromagnética à representação ¢, independente de tal presença, especificamente relacionada ao laser. Tais modificações, baseadas em uma transformação canônica , referidas a U, transferem a dependência do campo de radiação, do primeiro termo da equação (5), para o termo que descreve a distribuição estática de carga, mais precisamente,

$$\mathcal{H} \Rightarrow \tilde{\mathcal{H}} = U^{\dagger} \{ -ih \frac{\partial}{\partial t} + \mathcal{H} \} \quad U = \mathcal{H}_{0} + e\phi(\vec{x} + \vec{\delta}(t)) \qquad (11)$$

$$nde$$

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m^*} \left[\hat{p} + \frac{eH}{c} y \hat{e}_x \right]^2$$

é o Hamiltoniano de Landau (Landau ⁽¹⁸⁾, Johnson/Lippmann ⁽¹⁹⁾). Em suma, na representação Φ , o nosso Hamiltoniano é aquele de um elétron num campo magnético uniforme movendo-se em em um potencial deslocado em $\overline{\delta}(t)$, ou melhor, $e\phi(\vec{x}+\overline{\delta}(t))$.

-10-

Partindo do nosso hamiltoniano

$$\tilde{H} = \mathcal{H}_{0} + \mathcal{H}_{1} \tag{12}$$

onde

$$\mathcal{H}_{0} = \frac{1}{2m^{\star}} \left| \dot{\vec{p}} + \frac{eH}{c} y \, \hat{e}_{x} \right|^{2} \tag{13}$$

е

$$\mathcal{H}_{1} = e\phi(\vec{x}+\delta(t)), \qquad (14)$$

, sejam os autovetores $\xi_{lpha}(ec{x})$ as soluções da auto-equação

$$\mathcal{H}_{0} \xi_{\alpha}(\vec{x}) = E_{\alpha} \xi_{\alpha}(\vec{x})$$
(15)

onde vimos que

$$\xi_{\alpha}(\vec{x}) \equiv |\alpha\rangle \equiv |n p_{x} p_{z}\rangle =$$

$$= exp \left[\frac{i p_{x} x + i p_{z} z}{\hbar}\right] \Phi_{n}(\xi)$$
(16)

dados na equação (9), e

$$E_{\alpha} = h\omega_{c} \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{h p_{z}^{2}}{2m}$$
(17)

são os auto-valores de energia de \mathcal{H}_0 . (Landau et Lifchitz $^{(14)}$).

Expandindo $\phi(\vec{x}+\vec{b}(t))$ em uma série de Fourier, na maneira usual, temos

$$\phi(\vec{x}+\vec{\delta}(t)) = \sum_{\vec{q}} \phi(\vec{q} + \vec{\delta}(t)) \exp(i\vec{q}\cdot\vec{x})$$
(18)

e

$$\varphi(\vec{q}+\vec{\delta}(t)) = \int \frac{\vec{a}^3x}{V} \exp(-i\vec{q}\cdot\vec{x}) \,\phi(\vec{x}+\vec{\delta}(t)) \tag{19}$$

dai vemos que, definindo

$$\left(\phi(\vec{q},t) = \int \frac{d^3x}{V} \exp\left(-i\vec{q}\cdot\vec{x}\right) \phi(\vec{x},t) \right)$$
(20)

então

$$\Phi(\vec{q}+\vec{\delta}(t)) = \phi(\vec{q},t) \exp(i\vec{q}\cdot\vec{\delta}(t))$$
(21)

Simplificando a notação

$$\tilde{\phi}(\vec{q},t) \equiv \Phi(\vec{q} + \delta(t)) \tag{22}$$

No tratamento de "muitos corpos" (elétrons) é conveniente fazer mos o uso do prmalismo da segunda quantização, na representação das coordenadas. (Ehrenreich/Cohen ⁽⁸⁾; Zyryanov ⁽⁹⁾; Quinn/Rodr<u>i</u> gues⁽¹⁰⁾; Stephen⁽²⁰⁾; Harris⁽¹³⁾).

Desenvolvendo a solução $\Phi(\vec{x},t)$ em séries de autofunções de \mathcal{H}_{0} temos:

$$\Phi(\vec{x},t) = \sum_{\alpha} C_{\alpha}(t) \xi_{\alpha}(\vec{x})$$
(23)

onde interpretamos $C_{\alpha} \in C_{\alpha}^{+}$ como, respectivamente, os operadores de destruição e criação de partículas no estado $|\alpha\rangle$.

Nossa hamiltoniana, por sua vez, em segunda quant<u>i</u> zação será:

$$H = \int d^{3}x \quad \Phi^{+}(\vec{x}, t) \mathcal{H} \Phi(\vec{x}, t) = H_{0} + H_{1}$$
(24)

onde

$$H_0 = \int d^3x \ \Phi^+(\vec{x},t) \mathcal{H}_0 \ \Phi(\vec{x},t)$$
(25)

$$= \sum_{\beta\alpha} \int E_{\alpha} C_{\beta}^{+} C_{\alpha} \xi_{\beta}^{*}(\vec{x}) \xi_{\alpha}(\vec{x}) d^{3}x \qquad (26)$$

$$=\sum_{\beta\alpha} E_{\alpha} C_{\beta}^{+} C_{\alpha} \delta_{\beta\alpha}$$
(27)

$$H_{0} = \sum_{\alpha} E_{\alpha} C_{\alpha}^{+} C_{\alpha}$$
 (28)

Por sua vez

$$H_{1} = e \int d^{3}x \ \phi^{+}(\vec{x},t) \ |\phi(\vec{x} + \vec{\delta}(t))| \ \phi(\vec{x},t) =$$

$$= e \sum_{\vec{q}} \int d^{3}x \ \phi^{+}(\vec{x},t) \ \bar{\phi}(\vec{q},t) \ exp(i\vec{q},\vec{x}) \ \phi(\vec{x},t) =$$

$$= e \sum_{\vec{q}} \phi(\vec{q},t) \ C_{\beta}^{+} \ C_{\alpha} \int d^{3}x \ \xi_{\beta}^{*}(\vec{x}) \ exp(i\vec{q},\vec{x}) \ \xi_{\alpha}(\vec{x})$$

$$= e \sum_{\vec{q}} \phi(\vec{q},t) \ C_{\beta}^{+} \ C_{\alpha} \int d^{3}x \ \xi_{\beta}^{*}(\vec{x}) \ exp(i\vec{q},\vec{x}) \ \xi_{\alpha}(\vec{x})$$

$$= e \sum_{\vec{q}} \phi(\vec{q},t) \ \langle\beta|exp(i\vec{q},\vec{x})|\alpha > C_{\beta}^{+} \ C_{\alpha}$$

$$(30)$$

finalmente nossa hamiltoniana total será

$$H = \sum_{\alpha} E_{\alpha} C_{\alpha}^{\dagger} C_{\alpha} - e \sum_{\vec{q}, \beta, \alpha} \tilde{\phi}(\vec{q}, t) < \beta | exp(i\vec{q}, \vec{x}) | \alpha > C_{\beta}^{\dagger} C_{\alpha} \quad (31)$$

onde já vimos que

$$E_{\alpha} = h\omega_{c} (n + \frac{1}{2}) + \frac{\hbar p_{z}^{2}}{2m^{*}} \tilde{e} a \ energia \ do \ el \tilde{e} tron \ no \ estado \ de$$

Landau $|\alpha\rangle = |n p_x p_z\rangle e \langle \beta | exp(iq.x) | \alpha\rangle \tilde{e}$ a superposição entre as funções de onda de Landau.

Lembrando as relações usuais de comutação entre os operadores C^+_{α} e C^-_{α} (Herris⁽¹³⁾).

$$\begin{bmatrix} C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha}^{+}, \end{bmatrix}_{+} = \begin{bmatrix} C_{\alpha}, C_{\alpha}, \end{bmatrix}_{+} = 0$$

$$\begin{bmatrix} C_{\alpha}, C_{\alpha}^{+}, \end{bmatrix}_{+} = \delta_{\alpha\alpha},$$
(32)

e mais: usando a equação de movimento de Heisenberg

$$\frac{\partial}{\partial t} C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} = \frac{i}{\hbar} \left[H, C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} \right]_{-} = \frac{i}{\hbar} \left[H_{0}, C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} \right]_{-} + \frac{i}{\hbar} \left[H, C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} \right]_{-}$$
(33)

O primeiro termo do segundo membro será, usando (28) e (32):

$$\begin{bmatrix} H_{\theta}, C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \end{bmatrix}_{-} = \sum_{\beta} E_{\beta} \begin{bmatrix} C_{\beta}^{\dagger} C_{\beta}, C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \end{bmatrix}_{-} =$$

$$= \sum_{\beta} E_{\beta} \begin{bmatrix} C_{\beta}, C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \end{bmatrix}_{-} + \begin{bmatrix} C_{\beta}^{\dagger}, C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \end{bmatrix} =$$

$$= \sum_{\beta} E_{\beta} \begin{bmatrix} C_{\beta}, C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \end{bmatrix}_{-} + \begin{bmatrix} C_{\beta}^{\dagger}, C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \end{bmatrix} =$$

$$= \sum_{\beta} E_{\beta} \begin{bmatrix} C_{\beta}, C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \end{bmatrix}_{-} + \begin{bmatrix} C_{\beta}, C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \end{bmatrix} =$$

$$= \sum_{\beta} E_{\beta} \begin{bmatrix} C_{\beta}, C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \end{bmatrix}_{-} + \begin{bmatrix} C_{\beta}, C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} E_{\alpha}, C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} \end{bmatrix} = \sum_{\beta} E_{\beta} \begin{bmatrix} \delta_{\beta\alpha}, C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} - \delta_{\alpha\beta}C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} \end{bmatrix} = \\ = (E_{\alpha}, - E_{\alpha}) C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha}$$
(35)

De maneira análoga, podemos calcular:

$$\begin{bmatrix} H_{1}, C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} \end{bmatrix} = -e \sum_{\substack{\vec{q}, \beta \\ \vec{q}, \beta}} \{ C_{\beta}^{+} C_{\alpha} \overline{\phi}(\vec{q}, t) < \beta | exp(i\vec{q}, \vec{x}) | \alpha' > + C_{\alpha}^{+}, C_{\beta}^{-} \overline{\phi}(\vec{q}, t) < \alpha | exp(i\vec{q}, \vec{x}) | \beta > \}$$
(36)

de onde, então chegamos, usando (33), (35) e (36):

$$\left(\begin{array}{c} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + E_{\alpha}, -E_{\alpha}\right)C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} = e \sum_{\vec{q},\beta} \left\{C_{\beta}^{\dagger}C_{\alpha}\delta_{\beta\alpha}, (\vec{q},t) + c_{\alpha}^{\dagger}, C_{\beta}\delta_{\alpha\beta}(\vec{q},t)\right\} + C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\beta}\delta_{\alpha\beta}(\vec{q},t) \right\}$$

$$(37)$$

onde usamos a simplificação de notação

$$\tilde{\phi}_{\beta\alpha}(\vec{q},t) \equiv \tilde{\phi}(\vec{q},t) < \beta | exp(i\vec{q},\vec{x}) | \alpha >$$

Definindo

$$F(\alpha', \alpha, t) = \sum_{\gamma} P_{\gamma} < \gamma | C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} | \gamma >$$

(38)

-13-

ou mesmo

 $F(\alpha', \alpha, t) \equiv \langle C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \rangle$ onde P_{γ} é a probabilidade do sistema estar no estado $|\gamma\rangle$ e $\langle C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \rangle$ a média quanto-mecânica do operador $C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha}$; e tal média es tá intimamente relacionada à função destribuição clássica de Fermi (Harris ⁽²¹⁾, Miranda ⁽¹⁷⁾, Lima et al ⁽¹²⁾).

Assim, da equação (37):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} \rangle = (E_{\alpha}, - E_{\alpha}) \langle C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} \rangle + e \sum_{\substack{q \neq \beta \\ q \neq \beta}} \{\langle C_{\beta}^{+} C_{\alpha} \rangle \langle \tilde{\phi}_{\beta\alpha}, (\tilde{q}, t) \rangle + \langle C_{\alpha}^{+}, C_{\beta} \rangle \langle \tilde{\phi}_{\alpha\beta}, (\tilde{q}, t) \rangle\}$$
(39)

Fazendo aproximações para pequenas oscilações em torno do ponto de equilíbrio, no qual a densidade de carga e o p<u>o</u> tencial se anulam, temos:

$$\langle C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} \rangle_{t} = \langle C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} \rangle_{0} \delta_{\alpha'\alpha} + \langle C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} \rangle_{1, t}$$
(40)
onde

 $< C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha} >_{0} \delta_{\alpha' \alpha} \equiv F_{0}(\alpha) \delta_{\alpha' \alpha}$

assim desde que $C_{\alpha}^{+}C_{\alpha}$ é o operador de número de partícula no estado $|\alpha\rangle$. $F_{0}(\alpha)$ (em outra notação f_{α}) pode ser interpretado como o número médio de tais partículas, (do emsemble), no estado $|\alpha\rangle$. Então:

$$\frac{\partial h}{\partial t} \stackrel{\partial}{\langle c_{\alpha}^{+}, c_{\alpha}^{-}\rangle}{_{t}} = (E_{\alpha} - E_{\alpha},) \quad \langle c_{\alpha}^{+}, c_{\alpha}^{-}\rangle_{t} + \\ - e \sum_{q} |f_{\alpha}, - f_{\alpha}| \quad \delta_{\alpha\alpha}, (\vec{q}, t)$$

$$(41)$$

ou ainda

$$\{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + E_{\alpha}, - E_{\alpha}\} < C_{\alpha}^{+}, C_{\alpha}^{+} = -e(f_{\alpha}, - f_{\alpha}) \sum_{q} \tilde{\phi}_{\alpha\alpha}, (\dot{q}, t)$$
(42)

que por uma transformação de Fourier, levamos do dominio do tempo ao dominio das frequências (Mermin/Canel ⁽¹¹⁾):

$$\langle C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\alpha} \rangle_{\omega} = -e \frac{(f_{\alpha}, -f_{\alpha})}{E_{\alpha}, -E_{\alpha} - \hbar\omega} \sum_{\vec{q}} \tilde{\phi}(\vec{q}, \omega) \langle \alpha | exp(i\vec{q}, \vec{x}) | \alpha' \rangle (43)$$

-14-

que é um resultado ulterior da equação de Heinsenberg.

Da equação de Poisson

$$\nabla^{2}\tilde{\phi}(\vec{x},t) = 4 \, \Pi \, \tilde{\rho}(\vec{x},t) - 4 \, \Pi \, e \, \langle n(\vec{x},t) \rangle \tag{44}$$

onde

 $ilde{\phi}(\vec{x},t)$ descreve o potencial da carga estática de impureza.

-- 15-

 $\widetilde{\rho}(\vec{x},t)$ descreve a densidade da carga estática

 $\langle n(\vec{x},t) \rangle$ descreve a densidade média de carga induzida. Então

$$\langle n(\vec{x},t) \rangle \equiv \sum_{\gamma} P_{\gamma} \langle \gamma | n(\vec{x},t) | \gamma \rangle$$
 (45)

e como

 $n(\vec{x},t) = \Phi^{+}(\vec{x},t) \Phi(\vec{x},t)$, o perador densidade de número, e usando a expressão (23), temos que:

$$n(\vec{x},t) = \sum_{\alpha\beta} C_{\beta}^{\dagger} C_{\alpha} \xi_{\beta}^{\star} \xi_{\alpha}$$
(46)

Lembrando que

$$n(\vec{x},t) = \sum n(\vec{q},t) \exp(i\vec{q},\vec{x}) \qquad e \qquad (47)$$

$$n(\vec{q},t) = \int d^3x \, exp(-i\vec{q},\vec{x}) \, n(\vec{x},t) \tag{48}$$

usando (46)

$$m(\vec{q},t) = \sum_{\alpha\beta} C_{\beta}^{\dagger} C_{\alpha} \int d^{3}x \ \xi_{\beta}^{\star} \exp(-iq.x) \ \xi_{\alpha}$$
$$= \sum_{\alpha\beta} C_{\beta}^{\dagger} C_{\alpha} <\beta |\exp(-i\vec{q}.\vec{x})| \alpha >$$
(49)

assim_.

$$(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{q}, \alpha, \beta} C^{\dagger}_{\beta} C_{\alpha} <\beta |exp(-i\vec{q}, \vec{x})| \alpha > exp(i\vec{q}, \vec{x})$$
(50) (50)

e usando a espressão (45)

$$\langle n(\vec{x},t)\rangle = \sum_{\vec{q},\alpha,\beta} \langle \beta | exp(-i\vec{q},\vec{x}) | \alpha \rangle \langle C_{\beta}^{\dagger}C_{\alpha}\rangle_{t} exp(i\vec{q},\vec{x})$$
(51)

Escrevendo a equação (44) no espaço de Fourier dos momentos temos

$$\sum_{\vec{q}} q^2 \tilde{\phi}(\vec{q}, t) \exp(i\vec{q}, \vec{x}) = 4 \P \sum_{\vec{q}} \tilde{\rho}(\vec{q}, t) \exp(i\vec{q}, \vec{x}) - \vec{q}$$

ou ainda

$$q^{2}\bar{\varphi}(\vec{q},t) = 45 \ \bar{\varrho}(\vec{q},t) - 45e < n(\vec{q},t) >$$
(53)

fazendo emprego da supressão (SI), temos assim

$$q^{2}\bar{\phi}(\vec{q},t) = 4\pi\tilde{\rho}(\vec{q},t) - 4\pi e \sum_{\alpha\beta} \langle \beta | exp(-i\vec{q},\vec{x}) | \alpha \rangle \langle C_{\beta}^{\dagger}C_{\alpha} \rangle_{t}$$
(54)

ou

$$q^{3}\tilde{\varphi}(\vec{q},\omega) = 4\pi\bar{\rho}(\vec{q},\omega) - 4\pi\bar{\sigma} \sum_{\alpha\beta} \langle \beta|ezp(-i\vec{q},\vec{z})|\alpha\rangle \langle C_{\beta}^{\dagger}C_{\alpha}\rangle_{\omega}$$
(55)

Substituindo a expressão (43) em (85), temos:

$$\begin{split} \bar{\phi}(\hat{\vec{q}},\omega) &= \frac{4\pi\tilde{\rho}(\hat{\vec{q}},\omega)}{q^2} + \frac{4\pi\epsilon^2}{q^2} \sum_{\beta\alpha q'} \langle \beta | exp(-i\hat{\vec{q}},\hat{\vec{x}}) | u \rangle , \\ &+ \frac{(f_{\alpha i} - f_{\alpha})}{E_{\alpha i} - E_{\alpha} - \tilde{n}\omega} - \phi(\hat{\vec{q}}',\omega) < \alpha | exp(i\hat{\vec{q}}',\hat{\vec{x}}) | \beta \rangle \end{split}$$
(56)

que nos leva a

$$\begin{split} \bar{\varphi}(\vec{q},\omega) &= \frac{4\pi \vec{\rho}(\vec{q},\omega)}{q^2} + \frac{4\pi e^2}{q^2} \\ &\left(\sum_{\beta\alpha} \left[\langle \beta | exp(-i\vec{q},\vec{x}) | \alpha \rangle \right]^\beta + \frac{f_{\alpha}}{E_{\alpha}} - \frac{f_{\alpha}}{E_{\alpha}} \right] \cdot \vec{\phi}(\vec{q},\omega) \quad (57) \end{split}$$

Assim $\overline{\phi}(\vec{q},\omega)$ = $\overline{\rho}(\vec{q},\omega)$ estão relacionados por (Miranda ⁽¹⁷⁾):

$$\bar{\varphi}(\vec{q},\omega) = \frac{4\pi\tilde{\rho}(\vec{q},\omega)}{q^2\varepsilon(\vec{q},\omega)}$$
(58)

onde j

$$\begin{pmatrix} \langle \hat{q}, \omega \rangle = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{\alpha \beta} |\langle \beta | exp(-i\hat{q}, \hat{x}) | \alpha \rangle|^2 - \frac{(\hat{f}_{\beta} - \hat{f}_{\alpha})}{E_{\beta} - E_{\alpha} - \hbar\omega}$$
(59)

que é a parte longitudinal do nosse tenser dielétrico.

.

$$\vec{\phi}(\vec{q}, \omega) = \phi(\vec{q}, \omega) \ exp(i\vec{q}, \vec{\delta}(t))$$

$$\vec{p}(\vec{q}, \omega) = p(\vec{q}) \ exp(i\vec{q}, \vec{\delta}(t))$$

a expressão (58) fica então:

$$\phi(\vec{q},t) = exp(-i\vec{q},\vec{\delta}(t)) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{4\pi\rho(\vec{q})}{q^2\epsilon(\vec{q},\omega)} exp(-i\omega t) \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dt' exp(i\vec{q},\vec{\delta}(t')) exp(-i\omega t')$$
(60)

-17-

22 L

que expandindo em série de Fourier, (Miranda ⁽¹⁷⁾, Seely⁽¹⁵⁾)

$$exp[i\vec{q},\vec{b}(t)] = \sum_{v=-\infty}^{\infty} F_{v}(\vec{q}) exp(-iv\omega_{0}t)$$
(61)

substituindo (61) em (60), temos

$$\phi(\vec{q},t) = \sum_{\mu,\nu=-\infty}^{\infty} \frac{4\pi\rho(\vec{q})}{q^2 \varepsilon(q,\nu\omega_0)} F_{\mu}(\vec{q}) F_{\nu}(\vec{q}) \exp(i(\mu-\nu)\omega_0 t) \quad (62)$$

cuja componente estática (μ =v) é

$$\phi(\vec{q}) = \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} \frac{4\pi\rho(\vec{q})}{q^2\varepsilon(\vec{q},\mu\omega_0)} |F_{\mu}(\vec{q})|^2$$
(63)

ou mais simplificadamente

$$\phi(\vec{q}) = \frac{4\pi\rho(\vec{q})}{q^2}$$

$$componente \qquad q^2 \epsilon_{ef}$$

$$estatica$$

$$(64)$$

onde denotamos

$$\varepsilon_{ef}^{-1} = \sum_{\mu=-\infty}^{\infty} \frac{\left|F_{\mu}(\vec{q})\right|^{2}}{\varepsilon(\vec{q},\mu\omega_{0})}$$
(65)

por suz vez

$$\left|F_{\mu}(\vec{q})\right|^{2} = J_{\mu}^{2}(z) ; \quad z = eq_{\mu}E_{0}/m*\omega_{0}|\omega_{0} - \omega_{c}|$$

ENERGIA DE LIGAÇÃO

Capitulo II

II.1 - EXPRESSÃO PARA A ENERGIA DE LIGAÇÃO

No estudo do problema dos estados ligados, em uma impureza isolada (em um "gás de elétrons"), na presença de campo magnético e laser, consideraremos que tal "mar de elétrons" se o<u>r</u> ganiza de maneira a cancelar efetivamente, a grandes distâncias o campo coulombiano visto por cada elétron -(Blindagem).

Exceto improváveis vizinhos, a curta distância, c<u>a</u> da elétron se move i dependentemente sob a ação do campo médio produzido por todos os outros.

Além disso, devido à estatistica, que rege os elétrons, a passagem do sistema eletrônico do estado fundamental para um estado excitado se processa pela alteração do estado de alguns poucos elétrons apenas. A maioria dos processos físicos de interesse, depende não do estado fundamental, mas da organização dos estados excitados mais baixos, sugerindo que o que realmente importa é dispor de métodos que permitam calcular espectros dos elétrons independentes e que justifiquem a substituição das interações com outros elétrons por interação com um Campo Efetivo Médio. Expressamos isto levando

$$\mathcal{H}\Phi_{\alpha} = \frac{1}{2m^{\star}} P^{2}\Phi_{\alpha} + e\tilde{\Phi}_{0}(\vec{x})\Phi_{\alpha} \qquad ; \qquad e\tilde{\Phi}_{0}(\vec{x}) = \tilde{V}(\vec{x}) \qquad (66)$$

$$\mathcal{H}\Phi_{\alpha}^{\prime} = \frac{1}{2m^{\star}} P^{2}\Phi_{\alpha} + e \int d\tau |\Phi_{\alpha}|^{2} \Phi_{0}(\vec{x})$$
(67)

que leva a um problema auto-consistente, explicitando a interação média com as outras partículas eletrônicas. A informação sôbre os outros elétrons é dada através da "densidade" $|\Phi_{\alpha}|^2$ -Ashcroft⁽²²⁾, Kiréev⁽²³⁾, RCC Leite⁽²⁴⁾.

Como estamos considerando campos magnéticos fortes o potencial da impureza ao longo da direção do campo é mais impo<u>r</u> tante do que na direção perpendicular a ele. E mais: enquanto o

-19-

alcance do potencial da direção transversal é comparável ao raio ciclotrônico, o correspondente ao longo da direção do campo é pequeno comparado às dimensões da função de onda naquela direção.

Explicitando a equação de Schroedinger, na representação Φ , do capítulo I, já com o potencial deslocado, temos

$$\left\{\frac{1}{2m^{\star}} \left| \hat{p} + \frac{eH}{c} y \hat{e}_{x} \right|^{2} + \tilde{V}(\vec{x}) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right\} \Phi_{\alpha}(\vec{x}, t) = 0$$
(68)

onde $\tilde{V}(\vec{x})$ – potencial deslocado visto no Capitulo I, $(V(\vec{x}+\vec{\delta}(t))).$

$$\Phi_{\alpha}(\vec{x},t) = \Phi_{n,p_x}(x,y,t) Z(z)$$

Usando, assim, a aproximação &(delta) para o pote<u>n</u> cial na direção z - direção dos campos magnéticos e laser - a solução em z não é mais onda plana, como no problema de Landau, mas agora regida pela solução da equação unidimensional, já processados os usuais métodos de separação de variáveis - Jog/Wallace⁽⁷⁾ (Apêndice B - parte 1) :

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m^{*}}Z'' + \tilde{V}(z)Z = E_{0}Z$$
(69)

onde $\tilde{V}(z)$ representa a média do potencial blindado da impureza s \hat{o} bre as funções de onda, a saber:

$$\tilde{V}(z) = \int \Phi_{n,p_x}^*(x,y) \ e\phi(\vec{x}) \ \Phi_{n,p_x}(x,y) \ dx \ dy \tag{70}$$

ou mesmo

$$\overline{V}(\vec{x}) = \frac{e}{(2\pi)^3} \int \phi(\vec{q}) \exp(d\vec{q},\vec{x}) |\Phi_{n,p_x}|^2 dx dy d\vec{q}$$
(71)

como $\tilde{V}(z) = V_{o} \delta(z)$ (Apêndice B - parte 2)

$$\frac{e}{V_{o}} = \frac{e}{(2\pi)^{3}} \int \left[\phi(\vec{q}) exp(i\vec{q}.\vec{x}) \mid \Phi_{n,p_{x}} \mid^{2} d\vec{x} d\vec{q} \right]$$
(72)

e por fim como

$$\mathbf{E}_{o} = \frac{m^{\star}}{2\hbar^{2}} \mathbf{V}_{o}^{2} , \text{ encontramos}$$
(73)

$$\mathbf{E}_{o} = \left(\frac{m^{*}e^{2}}{2\hbar^{2}}\right) \frac{1}{(2\pi)^{3}} \int \int \phi(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} |\Phi_{n,p_{x}}|^{2} d\vec{x} d\vec{q}$$
(74)

-20-

$$\phi(\vec{q}) = 4 \operatorname{P}(\vec{q}) / q^2 \boldsymbol{\varepsilon}_{ef}$$

tendo em vista o conjunto das expressões (74) e (75), verifica-se que o efeito do laser e do campo magnético uniforme d.c., pode ser descrito pela troca da constante dielétrica $\boldsymbol{\mathcal{E}}(\vec{q})$, de Wallace $\begin{pmatrix} 3 \end{pmatrix}$, pela nossa constante dielétrica efetiva \boldsymbol{x}_{ef} , que engloba os efeitos da radiação eletromagnética e do campo magnético. É evidente, que no limiar da intensidade do laser, E_o , nula, $\boldsymbol{\varepsilon}_{ef}$ reduz a $\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{q})$.

II.2 - CONSTANTE DIELÉTRICA EFETIVA

Voltando à expressão (75) temos que

$$\mathbf{E}_{ef}^{-1} = \frac{J_o^2(z)}{\mathbf{E}(\bar{q}, o)} + 2\sum_{\substack{\nu=1\\\nu=1}}^{\infty} \frac{J_\nu^2(z)}{\mathbf{E}(\bar{q}, \nu\omega_o)}$$

observamos que o primeiro termo do lado direito, contêm no denom<u>i</u> nador $\mathbf{E}(\vec{q})$, constante dielétrica usual, enquanto que o segundo te<u>r</u> mo, sob o sinal de somatória, contêm $\mathbf{E}(\vec{q}, \omega)$, que necessitamos explicitamente. A formu, por ua vez, bastante complicada foi obtida por Mermin/Canel⁽¹¹⁾. Assim, no limite que nos é interessante, i.é., oscilações coletivas com comprimento de onda longo, temos mais simplificamente - M. Lima et al⁽¹²⁾

-22-

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\vec{q},\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2 \, sen^2\theta}{\omega^2 - \omega_c^2} - \frac{\omega_p^2 \, cos^2\theta}{\omega^2} \tag{76}$$

onde

θ é o ângulo entre q e o campo magnético

ω_n é a frequência de plasma do elétron e

w_c é a frequência de ciclotron do elétron.

Vemos que a expressão (76) possue duas frequências de ressonância, dadas pelas raizes $\omega_{\pm} e \omega_{\pm} de \varepsilon(\vec{q}, \omega) = 0$, a saber

$$\omega_{\pm}^{2} = \frac{1}{2} \left\{ (\omega_{p}^{2} + \omega_{c}^{2}) \pm \left[(\omega_{p}^{2} + \omega_{c}^{2})^{2} - 4\omega_{p}^{2}\omega_{c}^{2} \cos^{2}\theta \right]^{1/2} \right\}$$
(77)

Estas ressonâncias dominam o comportamento de $\mathbf{\mathcal{E}}(\vec{q}, \omega)$, no limite considerado. No regime de plasma de alta densidade, que é o nosso caso, onde

$$\omega_{p}^{2} \gg \omega_{c}^{2} \qquad a \ expressão (77) \ simplificar-se-a \ para$$

$$\omega_{+}^{2} = \omega_{p}^{2} + \omega_{c}^{2} \ sen^{2}\theta$$

$$\omega_{-}^{2} = \omega_{c}^{2} \ cos^{2}\theta$$
(78)

onde notamos que

w é o plasmon ordinário longitudinal e

w é o modo que está associado com o movimento muito próximo

de um movimento circular em torno da direção de propagação com frequência ω_c .

 $\mathcal{E}(\vec{q},\omega) = \frac{\omega^2 \left[(\omega^2 - \omega_c^2) \right] - (\omega_p^2 \, sen^2 \theta) \omega^2 - (\omega^2 - \omega_c^2) \omega_p^2 \, cos^2 \theta}{\omega^2 (\omega^2 - \omega_c^2)}$ $= \frac{\omega^4 - \omega^2 (\omega_c^2 + \omega_p^2) + \omega_c^2 \, \omega_p^2 \, cos^2 \theta}{\omega^2 (\omega^2 - \omega_c^2)}$ (79)

ou em termos de ω_{+} e ω_{-} usando

$$\omega^{4} - \omega^{2}(\omega^{2} + \omega_{p}^{2}) + \omega_{c}^{2}\omega_{p}^{2}\cos^{2}\theta =$$

$$= (\omega^{2} - \omega_{+}^{2})(\omega^{2} - \omega_{-}^{2}) = \omega^{4} - \omega^{2}(\omega_{+}^{2} + \omega_{-}^{2}) + \omega_{+}^{2} + \omega_{-}^{2}$$

temos

$$\mathcal{E}_{ef}^{-1} = \frac{J_{o}^{2}(z)}{\mathcal{E}(\vec{q})} + 2\sum_{\nu=1}^{\infty} J_{\nu}^{2}(z) \frac{(\nu\omega_{o})^{2} [(\nu\omega_{o})^{2} - \omega_{o}^{2}]}{(\nu\omega_{o})^{4} - (\nu\omega_{o})^{2}(\omega_{+}^{2} + \omega_{-}^{2}) + \omega_{+}^{2}\omega_{-}^{2}}$$
(80)

$$com \quad z = eq_{\perp}E_{o} / m^{*}\omega_{o} |\omega_{o} - \omega_{c}|$$

então para o caso

$$\omega_{p}^{2} \gg \omega_{c}^{2} , \text{ teremos finalmente}$$

$$\mathcal{E}_{ef}^{-1} = \frac{J_{o}^{2}(z)}{\mathcal{E}(\vec{q})} + 2 \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{J_{\nu}^{2}(z) (\nu \omega_{o})^{2} |(\nu \omega_{o})^{2} - \omega_{c}^{2}|}{(\nu \omega_{o})^{4} - \omega_{p}^{2}(\nu \omega_{o})^{2} + \omega_{p}^{2}\omega_{c}^{2}\cos^{2}\theta}$$

$$(81)$$

Salientamos, neste ponto, alguns fatos de grande relevância:

a) Quando a frequência do laser, ω_o , está próxima $a \omega_p, \omega_o \approx \omega_p$, vê-se que o termo v = 1 de (81) predomina e \mathbf{E}_{ef}^{-1} torna-se muito grande. Assim nos deparamos, então, com o colapso da blindagem, que por sua vez aumenta enormemente a energia de l<u>i</u> gação, associada ao potencial blindado pela expressão (74).

b) Contrariamente à parte a), se a frequência do laser estiver próxima a frequência ciclotrônica, ω_o ≃ ω_c, como o argumento da função de Bessel torna-se infinito, verificamos que



 \mathbf{E}_{ef}^{-1} se torna nula, o que significa um aumento abrupto da blindagem, implicando, assim, na redução enorme da energia de ligação dos portadores, deste modo reiterando e comprovando nossas palavras introdutórias deste trabalho.

II.3 - COMENTÁRIOS

Com alusão aos comportamentos opostos da energia de ligação dos portadores, quando nas ressonâncias mencionadas no item 2, deste capítulo, procuremos interpretar tais predições fisicamente. Em uma descrição semiclássica, consideremos um elétron num semicondutor dopado, tipo n, submetido, simultaneamente, å ação de um campo magnético d.c. e de uma radiação eletromagnética (descrito na aproximação de dipolo pelo potencial vetor $\overline{A}(t)$) e sujeito também a um potencial V, que representa coletivamente as interações do elétron com os outros elétrons, e com as impurezas carregadas do nosso material. Para a hamiltoniana clássica, temos (M. Lima et al ⁽¹²⁾)

-25-

 $H = \frac{1}{2} m^* V_{\rm H}^2 + \frac{1}{2} m^* V_{\rm L}^2 + V$ onde

 $V_{\rm H}^2 = V_{\rm L}^2 = \left[eE_{\rm O} / m(\omega_{\rm O} - \omega_{\rm C})\right]^2$

expressam, em média temporal, os quadrados das componentes longitudinal e transversal – com relação à direção do campo magnético paralelo, por sua vez à direção da radiação da onda eletromagnét<u>i</u> ca – da velocidade do elétron. Então para

 $\omega_{o} \rightarrow \omega_{c} \implies V_{\perp} \rightarrow \infty$ ou seja, a energia cinética transversal torna-se muito maior que V, o que leva a hamiltoniana ser predominada pela sua parte cinética.

De outro modo, podemos dizer que nesta condição de ressonância, entre a frequência do laser e a ciclotrônica, a ene<u>r</u> gia de radiação intensifica o movimento transversal do elétron, i. é., seu movimento ciclotrônico, resultando assim que o raio da ó<u>r</u> bita, deste movimento, fica bastante grande, a fazer o elétron a não mais "ver" o potencial V, ou seja, comportar-se como uma particula livre. Logo, nos relacionando à formulação do item 1, tal

fato indica que E_{o} , a energia de ligação do nosso elétron, expres são (74), praticamente se anula, o que leva a necessidade do fator $\varepsilon_{ef}^{-1} \rightarrow 0$ para $\omega_o \rightarrow \omega_c$, expressão (75). Ratificando assim item 2, indicando o colapso das interações eletrônicas. E mais: neste tipo de ressonância (laser-ciclotron) é o caráter individual do movimento eletrônico - movimento circular da nuvem de blindagem - o de maior relevância, em relação ao caráter coletivo, pois devido tas movimento exibir uma grande amplitude, leva de imediato à consequência do anulamento das interações eletrônicas, e portanto nunhum aprisionamento do portadores às impurezas do semicondutor. Sendo que em uma descrição de bandas, a diferença en tre o nivel de impureza doadora, e a banda de condução, se reduzi ria drasticamente, nessa ressonância, à revelia da intensidade da radiação da onda eletromagnética e de quão forte é o campo magnético, o que é de grande notabilidade se confrontarmos com trabalhos mencionados na introdução deste.

Finalmente nos concentrando na ressonância $w_o \approx w_p$ a nuvem de blindagem sofre oscilações de amplitude cada vez maior, a medida que a frequência do laser se aproxima de w_p , até o colapso da blindagem. De tal modo a resultar um aumento muito grande na interações elétron-núcleo, pois nestas condições, a carga aparente de blindagem é menor. Acrescentemos também aqui que o caráter coletivo é o que predomina, em completo contraste a outro tipo de ressonância. Sendo que em uma descrição de bandas, a diferença entre o nível de impureza doadora e a banda de condução aumenta bastante, a um estado ligado forte dos portadores (freezeout), recuperando assim resultados de Yafet et al ⁽¹⁾ do qual nos referimos no início deste trabalho.

-26-

RESSONANCIA $\omega_0 \longrightarrow \omega_c$

NO LIMITE ULTRA-QUÂNTICO

Capitulo III

III.1 - CÁLCULO DE
$$\mathcal{E}_{O}$$
 PARA $\omega_{O} \rightarrow \omega_{C}$

Analisando, pois, o caso particular em que a frequência da radiação eletromagnética (laser) está bem próximo à frequência ciclotrônica, $\omega_0 \approx \omega_c$, das conclusões expressas no item 2 do capitulo II, vemos que a expressão (81), a saber

$$\varepsilon_{ef}^{-1} = \frac{J_0^2(Z)}{\varepsilon(\vec{q})} + 2\sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{J_\nu^2(Z)(\nu\omega_0)^2 \left[(\nu\omega_0)^2 - \omega_c^2\right]}{(\nu\omega_0)^4 - \omega_p^2(\nu\omega_0)^2 + \omega_p^2\omega_c^2\cos^2\theta}$$

onde $Z = eq_{\perp} E_{0} / m * \omega_{0} | \omega_{0} - \omega_{c} |$

como o argumento das funções de Bessel torna-se infinito, podemos ter uma boa aproximação, somente o 1º termo de ordem zero do inve<u>r</u> so da constante dielétrica efetiva,

$$\varepsilon_{ef}^{-1} = \frac{J_0^2(z)}{\varepsilon(\dot{q})} \quad , p/ \quad \omega_0 \simeq \omega_c \tag{82}$$

Para argumentos significativamente grandes podemos ainda, usar a aproximação assintótica para a expressão (82)(Jain/ Izoar⁽²⁷⁾ e Morse/Feshback⁽²⁸⁾).

$$J_0^2(Z) \simeq \frac{1}{\pi Z}$$
 para Z>0 (83)

desta maneira, teremos para o potencial blindade efetivo, desenvolvido no capitulo I

$$\phi(\vec{q}) = \frac{4\pi\rho\alpha(Z)}{q^2\varepsilon(\vec{q})}$$
(84)

onde

$$\alpha(Z) = \frac{m^*\omega_0 |\omega_0 - \omega_c|}{\pi e q_\perp E_0}$$
(85)

notando que $\varepsilon(\vec{q})$ é a constante dielétrica usual - Wallace⁽³⁾. Substituindo (84) em (71), encontramos

$$\tilde{V}(Z) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{4\pi\rho\alpha(Z)}{q^2\varepsilon(\vec{q})} \exp(i\vec{q}\cdot\vec{x}) |\Phi_{n,p_x}|^2 dx dy d\vec{q} \quad (86)$$

que está relacionado a energia de ligação

$$\mathbf{E}_{0} = \left(\frac{me^{2}}{2\hbar^{2}}\right) V_{0}^{2} \tag{87}$$

com

$$V_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(Z) \, dZ \tag{88}$$

em coordenadas cilíndricas, temos

$$\overline{V}(Z) = \frac{e}{(2\pi)^3} \iint \frac{4\pi\rho}{q^2} \frac{\alpha(Z)}{\varepsilon(\vec{q})} \exp(i\vec{q}\cdot\vec{r}) |\Phi_{n,m}|^2 \rho \,d\rho \,d\theta \,d\vec{q}$$
(89)

Notando que - a exemplo de Wallace ⁽³⁾ - em campos suficientemente altos, todos os elétrons estão no nivel n=0 de Landau; nos deteremos, então, nesta aproximação de regime ultraquântico, com a função de onda eletrônica

$$\Phi_{0,m}(\rho,\theta) = (2\pi l^2 m |)^{-1/2} \left(\frac{\rho^2}{2l^2} \right) |m|/2 \exp(-\frac{\rho^2}{4l^2}) \exp(-im\theta) \quad (90)$$

Substituindo em (89)

, 00

$$\overline{V}(2) = \frac{e}{(2\pi)^3} \iint \frac{4\pi\rho}{q^2} \frac{\alpha(2)}{\varepsilon(\dot{q})} \exp\left[iq_{\mu}\rho\cos\theta + q_{\mu}\right] (2\pi l^2 m_{\mu})^{-1} \cdot \left(\frac{\rho^2}{2l^2}\right)^{|m|} \exp\left(-\rho^2/2l^2\right)\rho \,d\rho \,d\theta \,d\bar{q}^*$$
(91)

usando o fato que

$$\frac{1}{2\pi} \int_{0}^{\pi} exp(iq_{\mu}\rho\cos\theta) d\theta = J_{0}(q_{\mu}\rho)$$
(92)

teremps

$$\begin{aligned}
\hat{\Psi}(Z) &= \frac{e}{(2\pi)^3} \int \frac{4\pi\rho}{q^2} \frac{\alpha(Z)}{\varepsilon(\vec{q})} \exp(iq_z z) \int J_0(q_z \rho) \exp\left(-\frac{\rho^2}{2l^2}\right) \\
& \cdot \left(\frac{\rho^2}{2l^2}\right)^{|m|} \rho \, d\rho \, d\vec{q}
\end{aligned}$$
(93)

mas

$$\int J_{0}(q_{\perp}\rho) exp(-\rho^{2}/2l^{2}) (\rho^{2}/2l^{2}) |m| \rho d\rho =$$

$$= exp(-q_{\perp}l^{2}/2) L_{m}(q_{\perp}l^{2}/2) e$$

-29-

$$exp(iq_z z) dq_z = 2\pi\delta(z)$$
(94)

-30-

então, substituindo (94) e (93) em (88)

$$V_{0} = \int_{\infty}^{\infty} \overline{V(Z)} \, dZ = \frac{2e^{3}m^{*}\omega_{0}}{E_{0}} \frac{|\omega_{0} - \omega_{c}|}{E_{0}} \int_{0}^{\infty} \frac{L_{m}(q_{\perp}^{2} z^{2}/2) exp(q_{\perp}^{2} z^{2})}{q_{\perp}^{3} \epsilon(q_{\perp})} q_{\perp} \, dq_{\perp} \qquad (95)$$

Usando a constante dielétrica estática de Jog/Wallace⁽⁷⁾ - limite ultra-quântico - e calculando o alcance do pote<u>n</u> cial para o estado m=0, teremos portanto

$$\varepsilon(q) = \frac{4\pi e^2}{q_{\perp}^2} \left[q_{\perp}^2 + \frac{2A}{l^2} \exp(-q_{\perp}^2 l^2/2) F_{-3/2}(\beta \mu') \right]$$
(96)

onde

$$A = \frac{2e^2}{\pi} \left(\frac{\pi m \star \beta}{2\hbar^2} \right)^{1/2} \qquad ; \qquad \beta = \frac{1}{kT} \qquad (97)$$

 $\mu' = \mu - \frac{1}{2} \hbar \omega_c$ mede a listância relativa do nivel de Fermi, a partir do nivel n=0 de Landau.

$$F_{-3/2}$$
 é a integral de Fermi-Dirac - (Blackemore⁽²⁹⁾) -
Fazendo a troca de variável $x = q^2 l^2/2$

$$V_{0} = \frac{em^{*}\omega_{0}|\omega_{0} - \omega_{c}|}{4\pi^{2}E_{0}} \int_{0}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{x} (xe^{x} + p)}$$
(98)

onde
$$p = A F_{-3/2}(\beta \mu')$$
; $A = \frac{2e^2}{\pi} \left(\frac{\pi \ m^* \beta}{2\hbar^2} \right)^{1/2}$ (99)

, O nivel relativo de Fermi, por sua vez, é determinado pela condição ⁽²⁹⁾

$$N = \left(\frac{m \star kT}{2}\right)^{1/2} \pi \left(\frac{e}{\hbar^2 c}\right) F_{-1/2}(\beta \mu')$$
(100)

assim a energia de ligação será:

$$E_{0} = \frac{m^{\frac{3}{4}} \boldsymbol{\ell}^{2}}{32\pi^{4} \hbar^{2}} \left(\frac{\omega_{0} \omega_{c} \lambda_{c}}{E_{0}} \right)^{2} f_{L}^{2}(p)$$
(101)

onde

$$\lambda_{c} = \left| 1 - \frac{\omega_{0}}{\omega_{c}} \right| \qquad e \qquad f_{L}(p) = \int_{0}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{x} (xe^{x} + p)}$$
(102)

Faremos a título de comparação um quadro com alguns valores da energia de ligação obtidas pelo modêlo desenvolvido por Jog/Wallace ⁽⁷⁾ e pelo nosso modêlo.

MODELO	JOG/WALLACE	(com ca	mpo magnéti	ico)
р	H (1	(G)	E ₀ (10 ^{−4}	Ry)
1,2	47,	, 8	1,	58
1,8	68,	. 7	0,8	87
2,4	92,	6	0,;	57
2,85	137,	. 3	0,4	44

P	H(kG)		10 ⁻⁴ Ry)
-		$\omega_0 = 0, 9 \omega_c$	ω ₀ = 0,999 ω ₀
1,2	47,8	9,78 10-4	1,2 10 ⁻⁷
1,8	68,7	23,24 10 ⁻⁴	2,86 10 ⁻⁷
2,4	92,6	50,00 10 ⁻⁴	6,16 10 ⁻⁷
2,85	137,3	186,60 10 ⁻⁴	22,90 10 ⁻⁷

onde usamos

$$m^{*} = 0,07 m_{e}$$

$$N = 4 10^{16} cm^{-3}$$

$$T = 2 K$$

$$E_{0} = 2,2 10^{7} V/cm$$

(intensidade do laser)

RESSONÂNCIA $\omega_0 \rightarrow \omega_p$

NO LIMITE ULTRA- QUÂNTICO

Capítulo IV

4

IV.1 - CASO DE LASER INTENSO

Na expressão (81), para a constante dielétrica ef<u>e</u> quando $\omega_0 + \omega_p$, considerando $\omega_p^2 >> \omega_c^2$, o termo v=1 predomina, e dai

$$\varepsilon_{ef}^{-1} \simeq 2 J_{1}^{2} (Z) \qquad \frac{\omega_{0}^{2} (\omega_{0}^{2} - \omega_{c}^{2})}{\omega_{0}^{2} - \omega_{p}^{2} \omega_{0}^{2} + \omega_{p}^{2} \omega_{c}^{2} \cos\theta}$$
(103)

$$\simeq 2 J_{1}^{2} (2) / (1 - (\omega_{p}^{2} / \omega_{0}^{2}))$$
 (104)

onde $Z = eq_{\perp}E_0 / m * \omega_0 | \omega_0 - \omega_c |$

explorando a situação em que temos a intensidade do laser, E₀, i<u>n</u> tensa podemos aproximar a função de Bessel assintoticamente por⁽²⁷⁾

$$J_{1}^{2}(Z) = \frac{1}{\pi(Z^{2}-1)^{1/2}}$$
(105)

de maneira a termos a expressão (104)

$$\varepsilon_{ef}^{-1} = \frac{2}{\pi (z^2 - 1)^{1/2} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2} \right)}$$
(106)

assim o potencial efetivo resulta

$$\phi(\vec{q}) = \frac{4\pi\rho}{q^2\varepsilon_{ef}} = \frac{8\rho}{\lambda_p} \frac{1}{q^2(z^2 - 1)^{1/2}}$$
(107)

com

$$\chi_{p}^{\prime} = (1 - \omega_{p}^{2} / \omega_{0}^{2}) \qquad ; \qquad Z = eE_{0}q_{\perp} / m^{*}\omega_{0} | \omega_{0} - \omega_{c}$$

do capitulo III, vemos que

$$V_{0} = \frac{1}{2\pi} \int \phi(q_{\perp}) L_{m}(q_{\perp}^{2}l^{2}/2) \exp(-q_{\perp}^{2}l^{2}/2) q_{\perp} dq_{\perp}$$
(109)

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{g_{p}}{\left(1 - \frac{\omega_{p}^{2}}{\omega_{0}^{2}}\right)} \frac{m^{*}\omega_{0} |\omega_{0} - \omega_{c}|}{eE_{0}} \cdot \frac{\int_{eE_{0}}^{L_{m}(q_{\perp}^{2} z^{2}/2) exp(-q_{\perp}^{2} z^{2}/2) q_{\perp} dq_{\perp}}{\int_{q_{\perp}^{2}}^{L_{m}(q_{\perp}^{2} z^{2}/2) exp(-q_{\perp}^{2} z^{2}/2) q_{\perp} dq_{\perp}}$$
(110)

ou ainda, para m=0 - como na expressão (95)

$$V_{0} = \frac{4e^{2}}{\pi} \frac{m^{*}\omega_{0}|\omega_{0} - \omega_{c}|}{eE_{0}} \frac{1}{\left[1 - (\omega_{p}^{2}/\omega_{0}^{2})\right]} \int_{0}^{\infty} \frac{exp(-q_{\perp}^{2}l^{2}/2) dq_{\perp}}{q_{\perp}\left[q_{\perp}^{2} - A_{0}\right]^{1/2}}$$
(111)

onde $A_0 = m^* \omega_0 | \omega_0 - \omega_c | / eE_0$

Fazendo a troca de variável muda $x = q_1^2 l^2/2$:

$$I_{0} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \int_{0}^{\infty} \frac{x^{-1} e^{-x}}{\left(x - \frac{1^{2}A_{0}}{2}\right)^{1/2}} dx$$
(112)
$$I^{2} = \frac{\hbar c}{eH} \qquad e \qquad A_{0} = \frac{m^{*}\omega_{0} |\omega_{0} - \omega_{c}|}{eE_{0}}$$

para campos magnéticos fortes (kG), radiação de laser da ordem de 10^7 V/cm, $\frac{l^2 A_0}{2} \simeq 10^{-12}$

deste modo, nesta aproximação integramos (112) e temos

$$V_{0} = \frac{4e^{2}}{\pi\lambda_{p}} \left[\frac{m^{\star}\omega_{0} |\omega_{0} - \omega_{c}|}{eE_{0}} \right] \frac{\pi}{2\sqrt{A_{0}}}$$
(113)

relacionados à energia de ligação pela expressão (73)

$$\boldsymbol{E}_{0} = \left(\frac{m^{\star}}{2\hbar^{2}}\right) \quad \boldsymbol{V}_{0}^{2} = \frac{2e^{4}m^{\star}}{\hbar^{2}} \left(\frac{m^{\star}\omega_{0}\omega_{c}\lambda_{c}}{eE_{0}}\right) \quad \lambda_{p}^{2} \tag{114}$$

$$\mathbf{E}_{0} = \frac{2e^{3}m^{*}\omega_{0}\omega_{c}\lambda_{c}}{h^{2}E_{0}\lambda_{p}^{2}}$$
(115)

onde
$$\lambda_c = |1 - (\omega_c/\omega_0)|$$
 e $\lambda_p = 1 - (\omega_p^2 / \omega_0^2)$

IV.2 - CASO DO LASER FRACO

Na expressão (104) deste capitulo,

$$\varepsilon_{ef}^{-1} = 2 J_1^2 (Z) / \left(1 - (\omega_p^2 / \omega_0^2) \right); \qquad (104)$$

$$Z = \tilde{e}q_{\underline{i}} E_0 / m \star \omega_0 | \omega_0 - \omega_c |$$

explorando a situação em que temos a intensidade do laser, E_0 , fr<u>a</u> ca podemos aproximar a função de Bessel, para argumentos muito p<u>e</u> quenos por ⁽²⁸⁾

$$J_{1}^{2}(Z) \simeq \left(\frac{Z}{2}\right)^{2} \tag{115}$$

desta maneira

$$\epsilon_{ef}^{-1} = Z^2 / 2 \left(1 - (\omega_p^2 / \omega_0^2) \right)$$
(116)

e o potencial fetivo resulta

$$\phi(\vec{q}) = \frac{4 \pi \rho}{q^2 \epsilon_{ef}} = \frac{2\pi \rho Z^2}{q^2 \lambda_p}$$
(117)

 $com \quad \lambda_{p} = (1 - (\omega_{p}^{2} / \omega_{0}^{2}))$ $Z = eE_{0}q_{1} / m^{*}\omega_{0} |\omega_{0} - \omega_{c}|$ (118)

Analogamente ao desenvolvimento das expressões (110) e¦ (111), temos

$$V_{0} = \frac{e^{2}}{\lambda_{p}A_{0}^{2}} \int_{0}^{\infty} exp' - q_{\perp}^{2} l^{2}/2 q_{\perp} dq_{\perp}$$
(119)

$$= \frac{e^2}{\lambda_p A_0^2} \int_0^\infty exp(-x) \frac{1}{l^2} dx = e^2 / \lambda_p A_0^2 l^2$$
(120)

$$\mathbf{E}_0 = \left(\frac{m^*}{2\hbar^2}\right) \quad \mathbf{V}_0^2 =$$









 $l^2 = hc/eH$

(121)



CONCLUSÕES

Capitulo V

No nosso trabalho, apresentamos um modêlo teórico para o estudo de sémicondutores, com impurezas hidrogenóides não compensadas, sob a ação simultânea de campos magnéticos fortes e laser, no regime ultra-quântico. Onde vimos o efeito preponderante da presença do laser, qu.ndo nos limiares das ressonâncias tr<u>a</u> tadas, sôbre os estados ligados dos portadores. Com a obtenção da constante dielétrica efetiva do meio, esclarecemos como a presença dos campos externos se evidenciam sobre as propriedades do semicondutor. Assim através do potencial blindado efetivo encontramos uma expressão para a energia de ligação, que não só dependia da concentração, intensidade do campo magnético e temperatura caso em que têm-se só a presença de campo magnético - mas também da intensidade do laser e da sua frequência.

Aliãs, insistimos na dependência proeminente da energia de ligação na frequência do laser quando esta se encontra em ressonância com as frequências de ciclotron e de plasma.

Uma das críticas aos resultados seria o fato de desprezarmos a parte imaginária da constante dielétrica, que só incluindo sérias complicações nos cálculos, não nos faz crer que trouxesse modificações sensiveis no modêlo, pois estivemos sempre em busca de resultados limiares.

Outra abordagem que requer mais alguma considera ção deve-se ao uso da aproximação $\delta(delta)$ para o alcance do potencial, visto no capítulo II, agora com a presença do laser. Wallace ⁽³⁾ esclarece tal uso, na existência de apenas campos mag néticos fortes. No limite $w_0 \simeq w_c$, podemos ver que a presença do laser intensificava o movimento transversal do elétron, i.e., seu movimento ciclotrônico, resultando ao raio da órbita crescer, a fazer o elétron a não mais "enxergar" o potencial da impureza, f<u>a</u> vorecendo ainda mais a hipótese de potencial local (delta), pois seu alcance é drasticamente reduzido. Isto, sem dúvida nenhuma fa

-38-

vorece ainda mais aquela aproximação.

A crítica se concentra aqui no uso da aproximação delta, pois em $w_0 = w_p$, se espera o colapso total da blindagem e portanto, sendo o alcance do potencial bem longo, nossos resultados não seriam mais válidos. Acontece que estamos descrevendo o processo apenas em $w_0 \simeq w_p$ (o limiar da instabilidade), onde os resultados devem ser interpretados à luz desta marcante restrição.

Um outro fato relevante a se reiterar do capítulo IV, é que a energia de ligação, para o caso de laser fraco, fixa<u>n</u> do-se todos os parâmetros outros, cresce com a 4º potencia da intensidade do laser. Todavia, no caso de laser intenso decresce i<u>n</u> versamente proporcional a intensidade de radiação. Deveremos então ter um máximo na energia de ligação versus intensidade do laser. E ainda para valores de fracas intensidades da radiação ter<u>e</u> mos correspondentes nas grandes intensidades, para as quais está relacionada uma mesma energia de ligação. Tal dispositivo permite mais uma maneira de manipulação sôbre um maior ou menor aprision<u>a</u> mento do portadores.

-39-

Apêndice A

.

.

Dada a equação de Schroedinger dependente do tempo

(A-4)

$$-\frac{\hbar}{a}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t) = \hat{H}\Psi(\vec{x},t) \qquad (A-1)$$

a partir de $\Psi(\dot{t}, t_0)$ e com o operador de evolução temporal $U(t, t_0)$ encontramos

$$\Psi(\vec{x},t) = U(t,t_0) \Psi(\vec{x},t_0) \qquad (A-2)$$

que obedece a

$$-\frac{n}{i}\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = \hat{H}U(t,t_0) \qquad (A-3)$$
resultando em (Harris ⁽²¹⁾)

$$U(t,t_0) = exp - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt'$$

dai

$$\Psi(\vec{x},t) = exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt'\right) \Psi(\vec{x},t_0) \qquad (A-5)$$

No caso particular de

i) $\hat{H} = \frac{1}{2m} |\hat{P}|^2$ onde $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$

então o operador de momentum \hat{p} em \hat{H} é substituido por seu autovalor \vec{p} , de tal modo a termos:

$$U(t,t_0) = exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \frac{|\vec{p}|^2}{2m} dt'\right) exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}\right)$$
$$= exp(-ip^2(t-t_0)/2m\hbar) exp(i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar) \qquad (A-6)$$

logo

$$\Psi(\vec{x},t) = \exp\left(-iE(t-t_0)/\hbar\right) \exp\left(i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar\right) \qquad (A-7)$$

resultado bem conhecido da função de onda de uma partícula livre.

ii) Se
$$\hat{H} = \frac{1}{2m} |\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A}(t)|^2$$
 (A-8)
onde aquí, particularmente, $\vec{A}(t)$ corresponde ao potencial vetor as
sociada a radiação de laser ^(*).

(*) Podemos desprezar a parte espacial de nossa radiação eletromag nética, a saber $\vec{A}(\vec{x},t) = Re\{A_0 exp[i(\vec{k}.\vec{x}-\omega t)]\}$ pois consideramos uma onda plana de longo comprimento de onda, com parada com o diâmetro do átomo, assim $\vec{k}.\vec{x} <<1$ (x<< λ) e, logo $exp(i\vec{k}.\vec{x}) \simeq 1$, que significa supor que o campo eletromagnético é uniforme numa região suficientemente grande comparada às dimensões atômicas (aproximação de dipolo) A solução será

$$\Psi(\vec{x},t) = U(t,t_0) \Psi(\vec{x},t_0) \qquad (A-9)$$

onde agora, o nosso operador de evolução temporal é

$$U(t,t_0) = exp\left(-\frac{i}{2m\hbar}\int_{t_0}^{t} |\vec{p} - \frac{e}{a}\vec{A}(t')|^2 dt'\right) \qquad (A-10)$$

sendo

$$\Psi(\vec{x},t) = exp(i\vec{p}.\vec{x}/\hbar) exp\left(-\frac{i}{2m\hbar} \int_{t_0}^{t_0} |\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}(t')|^2 dt'\right) \quad (A-11)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} | \hat{p} + \frac{e}{c} \frac{B}{y} \hat{e}_{x} |^{2}$$

que é o problema, notoriamente conhecido de Landau cuja solução é $\Psi(\vec{x},t) = N_n \exp(i\vec{p}.\vec{x}/\hbar) \exp(-itE_n/\hbar) \exp(-\xi^2/2) H_n(\xi)$ (A-12) onde

$$\vec{p} = [p_x, 0, p_z]$$

$$\xi = (y - l^2 p_x) / l$$

$$l^2 = \hbar / m \omega_c \qquad ; \qquad \omega_c = eB / mc \qquad (A-13)$$

$$E_n = \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2}) + \frac{p_z^2}{2m}$$

$$N_n = (2^n n | \pi^{-1/2} l)^{-1/2}$$

iv) Caso em que $\hat{H} = \frac{1}{2m} |\hat{p} + \frac{e}{c} y \hat{e}_x - \frac{e}{c} \vec{A}(t)|^2$ (A-14)

que é o problema de uma partícula (elétron) em presença de um ca<u>m</u> po magnético uniforme, na direção z, e de uma radiação eletromagnética, desejamos resolver a equação de Schroedinger

$$\hat{H} \Psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) \qquad (A-15)$$

Desde que a Hamiltoniana não depende das coordenadas <u>x</u> e <u>z</u>, os momentos p_x e p_z são constantes de movimento (pois ainda não estamos supondo nenhum potencial de impurezas).

Na ausência do campo magnético, a solução para a equação de Schroedinger para um elétron num campo eletromaynético dependente do tempo e uniforme, foi discutida no item ii), enquan to que a solução para um elétron num campo magnético estático está esquematizado no item anterior. Deste modo tendo estas duas s<u>o</u> luções como guia, propomos solução para o problema deste item, por analogia (Seely ⁽¹⁵⁾).

$$\Psi(\vec{x},t) = exp(-iE_nt/\hbar) exp(i\vec{p}.\vec{x}/\hbar) .$$

$$exp\left(-\frac{1}{2m\hbar} \int_{t} \left(\left|\vec{p}-\frac{e}{c}|\vec{A}(t')|^2 + R_0(t')\right)dt'\right) \Phi_n(\xi)$$

$$(a-16)$$

onde $E_n = \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})$

$$p = [p_x, Q(t), p_z]$$

$$\Phi_{\chi}(\xi) = (2^n n | \pi^{-1/2} l)^{-1/2} exp(-\xi^2/2) H_n(\xi)$$

$$\xi = (y - l^2 (p_x - G(t))/l$$
(A-17)

Substituindo (A-16) em (A-15), com um cálculo tedio so apenas, encontramos que

$$R_{0}(t) = -\left[p_{x} - G(t)\right]^{2}$$

$$G(t) + iQ(t) = \frac{e\omega_{c}}{c} \int^{t} \left[A_{y}(t') - iA_{x}(t')\right] exp\left[i\omega_{c}(t-t')\right] dt'$$

Se nossa radiação é de polarização circular dextrógira, na direção z, temos

$$\dot{A}(t) = A_x \hat{e}_x + A_y \hat{e}_y \qquad (A-19)$$

$$eE_a \qquad eE_a$$

onde
$$A_x = \frac{\partial E_0}{\omega_0} \cos \omega_0 t$$
; $A_y = \frac{\partial E_0}{\omega_0} \sin \omega_0 t$

que substituít do em (A-18), teremos

$$G(t) = -\frac{e^{-E_0 - \omega_c}}{\omega_0 (\omega_0 - \omega_c)} \cos \omega_0 t$$

$$(A-20)$$

$$Q(t) = -\frac{e^{-E_0 - \omega_c}}{\omega_0 (\omega_0 - \omega_c)} - \sin \omega_0 t$$

lembramos que

$$R(t) = \left| \overrightarrow{p} - \frac{e}{c} \overrightarrow{A}(t) \right|^{2} - \left| p_{x} - G(t) \right|^{2}$$

então

$$R(t) = p_{z}^{2} + Q^{2}(t) - \frac{2e}{c} p_{x}A_{x} - \frac{2e}{c} Q(t)A_{y}(t) - G^{2}(t) + a p_{x}G(t) + (e^{2}/c^{2}) A^{2}(t)$$
(A-21)

assim (A-16) será agora

$$\begin{split} \Psi(\vec{x},t) &= L^{-1} \exp(iQ(t)y/\hbar) \ . \\ &exp\left(-\frac{i}{2m\hbar}\int dt' \left(\frac{e^2}{c^2}A^2(t')+Q^2(t')-\frac{2-e}{c}Q(t')A_y(t')-G^2(t')\right)\right) \\ &exp\left(-\frac{i}{m\hbar}p_x\int dt' \left[G(t')-\frac{e}{c}A_x(t')\right] \ . \\ &exp(-ip_z^2t/2m\hbar) exp(-iE_nt/\hbar) exp(ip_xx+p_z^2/\hbar).\Phi_n(\xi) \\ &(A-22) \end{split}$$

$$\Psi(\vec{x},t) = exp(i\vec{\zeta}(t),\vec{x}/\hbar) exp(-i\vec{\eta}(t)/\hbar) exp(i\vec{r}(t),\hat{p}/\hbar) .$$

$$exp(-itE /\hbar) exp((ip_x x + ip_z z)/\hbar) \Phi_n(\xi) \qquad (A-23)$$

onde $E = \begin{bmatrix} E_n + (p_z^2/2m) \end{bmatrix}$

$$\Phi_{n}(\xi) = (2^{n}n)\pi^{-1/2}l)^{-1/2} exp(-\xi^{2}/2) H_{n}(\xi) \qquad (A-24)$$

$$\xi = \left(\left\{ y \neq l \ G(t) \right\} - l \ p_x \right\} / l$$

Observamos que $\left[f(x+a) = exp(a \frac{d}{dx}) f(x) \right]$

$$\Phi_{n}(\xi) = exp \left[l^{2}G(t) \frac{\partial}{\partial y} \right] \cdot \Phi_{n}(\zeta)$$
(A-25)

onde
$$\zeta = (y - l^2 p_x) / l$$

encontramos (Redmond -Ref. (25))

$$\Psi(\vec{x},t) = U \Phi_{\alpha}(\vec{x},t) \qquad (A-26)$$

onde

$$U = \exp(i\xi(t), \frac{1}{x}/\hbar) \exp(-i\eta(t)/\hbar) \exp(i\xi(t), \frac{1}{p}/\hbar) \qquad (A-27)$$

com

$$\begin{split} \dot{\overline{s}}(t) &= -\vec{r}(t) + \dot{\overline{s}}(t) \\ \dot{\overline{r}}(t) &= \hat{e}_x r(t) \\ \dot{\overline{s}}(t) &= \hat{e}_y G(t) / m \omega_c \\ \hat{\overline{p}} &= \hat{e}_x \hat{\overline{p}}_x + \hat{\overline{e}}_y \hat{\overline{p}}_y + \hat{\overline{e}}_z \hat{\overline{p}}_z \\ \phi_\alpha(\vec{x}, t) &= exp(-itE_\alpha/\hbar) exp((ip_x x + ip_z z) / \hbar) \phi_\alpha(\zeta) \end{split}$$

$$(A-28)$$

onde

$$\Phi_{n}(\zeta) = (2^{n}n)\pi^{1/2}l)^{-1/2} \exp(-\zeta^{2}/2) H_{n}(\zeta) \qquad (conhecida solu-ção de Landau)$$

$$\zeta = (y - l^{2}p_{x})/l$$

Fisicamente, a expressão (A-26) significa que fazendo translações espaciais das coordenadas xe⁻y e translação da componente y do momentum, passamos de uma representação dependente do campo eletromagnético (laser), a uma representação independente do mesmo, i.e., a solução de Landau.

Entretanto, se agora consideramos o problema de um elétron, na presença simultânea de radiação e campo magnético, in teragindo com o meio - com outros elétrons, núcleos de impurezasvia um potencial $V(\vec{x})$, i.e.

$$\mathcal{X} = \frac{1}{2m^{\star}} | \hat{p} + \frac{e}{c} \frac{B}{c} y \hat{e}_{x} - \frac{e}{c} \vec{A}(t) |^{2} + V(\vec{x}) \qquad (A-29)$$
waves de representação de

por meio de uma transformação canônica, baseada em U, transferimos a dependência da radiação do primeiro termo de (A-29) para o ter

mo de interação (o potencial de interação), a saber: (Miranda⁽¹⁷⁾) $\mathcal{H} \rightarrow \tilde{\mathcal{H}} = U^{\dagger} \left\{ \frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m^{\star}} \left| \hat{p} + \frac{e}{c} By \hat{e}_{r} - \frac{e}{c} \vec{A}(t) \right|^{2} + V(\vec{x}) \right\} U =$ $= n^{+} \left\{ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m^{*}} \left\| \hat{p} + \frac{e}{c} By \hat{e}_{x} - \frac{e}{c} \vec{A}(t) \right\|^{2} \right\} U + U^{+} V(\vec{x}) U =$ $=\mathcal{H}_{0} + V(\vec{x} + \vec{\delta}(t))$ (*) (A - 30)onde $\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2m^*} | \hat{p} + \frac{e}{c} \frac{B}{c} y \hat{e}_x |^2$ Então, na representação \$, nossa hamiltoniana é aquela de um elétron num campo magnético uniforme, movendo-se em um potencial deslocado, $V(\vec{x} + \vec{\delta}(t))$ () Sabemos que para dois quaisquer operador e B que não comutem \tilde{e} válido (se existe \tilde{A}^{-1}) que $\tilde{A}^{-1} f(\tilde{B})\tilde{A} = f(\tilde{A}^{-1}\tilde{B}\tilde{A})$ Como exemplo seja $\hat{A} = U = \exp(i\vec{\zeta}(t).x/\hbar) \exp(-i\eta(t)/\hbar) \exp(i\vec{\delta}(t).\hat{p}/\hbar)$ então $U^{-1}V(\hat{x})U = V(U^{-1}\hat{x}U)$ mas $\hat{x} = \hat{x} \exp(i\xi(t) \cdot \frac{1}{x}/\hbar) \exp(-i\eta(t)/\hbar) \exp(i\xi(t) \cdot \hat{p}/\hbar)$ = $exp(i\vec{\zeta}(t).\vec{x}/\hbar)exp(i\eta(t)/\hbar) \ \hat{x} \ exp(i\vec{\delta}(t).\hat{p}/\hbar)$ $= exp(i\vec{\xi}(t).\vec{x}/\hbar)exp(in(t)/\hbar) \ \hat{x} \ |1+(i\vec{\delta}(t)/\hbar)\hat{p}+\ldots |$ $como \ \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$ $\vec{x}U = exp(i\vec{\zeta}(t), \vec{x}/\hbar) exp(-i\eta(t)/\hbar) exp(i\vec{\delta}(t)\vec{p}/\hbar) (\vec{x} + \vec{\delta}(t))$ dai temos $U^{-1}V(\vec{x})U = V(U^{-1}U(\vec{x} + \vec{\delta}(t))) = V(\vec{x} + \vec{\delta}(t))$

Apêndice B

...

PARTE 1

Do capitulo II, expressão (68), vimos q equação de Schroedinger dependente do tempo

$$\left\{\frac{1}{2m^{\star}} \mid \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \frac{e}{c} \vec{A} \mid^{2} + \vec{V}(\vec{r}) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right\} \Phi_{\alpha}(r,t) = 0 \qquad (B-1)$$

onde particularmente aqui

 \vec{A} = potencial vetor associado ao campo magnético uniforme, que podemos tor igual a

$$=\frac{1}{2}\vec{r}\times\vec{H} \tag{B-2.1}$$

Comecemos supondo que o efeito da interação com os demais elétrons - vide primeira página do capítulo II - seria levado em conta expressando este fato através de uma média do pote<u>n</u> cial blindado (deslocado) - vide capítulo I - da impureza, sôbre a "densidade" $|\Phi_{\alpha}|^2$. Deste modo, levando também em conta, que os <u>campos magnéticos são forte</u>, o potencial efetivo da impureza ao longo do eixo z é mais importante do que na direção perpendicular (lembrando que os campos atuam na direção z); assim temos dentro destas plausíveis aproximações, a exemplo de Landau ⁽¹⁸⁾, Johnson Lippmann⁽¹⁹⁾ e Gasiorowicz ⁽²⁶⁾, a equação de Schroedinger inde pendente do tempo

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m^{\star}} \sqrt{\nabla^{2} \Phi_{\alpha}(\vec{x}) + \frac{e}{2mc} H} L_{z} \Phi_{\alpha}(\vec{x}) + \frac{e^{2}H^{2}}{8mc^{2}} (x^{2} + y^{2}) \Phi_{\alpha}(\vec{x}) + \psi(z) \Phi_{\alpha}(\vec{x}) = E_{\alpha} \Phi_{\alpha}(\vec{x}) \qquad (B-2)$$

onde

$$\Phi_{\alpha}(\vec{x}) = \Phi_{n,p_{\alpha}}(x,y) Z(z) \qquad e$$

$$\tilde{V}(z) = \int \Phi_{n,p_{\alpha}}^{\star}(x,y) \tilde{V}(\vec{x}) \Phi_{n,p_{\alpha}}(x,y) dx dy \qquad (B-3)$$

escrevendo

 $x = \rho cos \theta$ ' e $y = \rho sen \theta$

-48-

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos\theta \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\sin\theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos\theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta}$$

$$\nabla^{2} = \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} + \frac{\partial^{2}}{\partial \rho^{2}} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^{2}} \frac{\partial^{2}}{\partial \theta^{2}}$$
e propondo a nossa solução
$$\Phi_{\alpha}(\rho, \theta, z) = P(\rho) \theta(\theta) Z(z)$$
(B-5)
verificamos que, identicamente

$$P(\rho) = i^{n} \left(2^{n+m+1} m [n] \right)^{-1/2} l^{-1} (\rho/l)^{n+m} .$$

$$exp \left[-\rho^{2}/4l^{2} \right] L_{n}^{m} \left(\rho^{2}/2l^{2} \right)$$
(B-6)

$$\Theta(\theta) = exp(i(n-m)\theta) \tag{B-7}$$

no entanto, devido a presença de $\tilde{V}(z)$ em (B-2), Z(z) não mais será onda plana exp(ikz), mas agora a solução da parte concernente a equação unidimensional na coordenada z, a saber

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 z}{dz} + \tilde{V}(z) \quad Z = \mathbf{E}_0 Z \tag{B-8}$$

com \mathbf{E}_0 sendo, por ora, constante de separação que na parte 2, deste apêndice será pormenorizada e associada com a energia de ligação do elétron a impureza, com $V(z) = V_0 \delta(z)$. Em coordenadas cilindricas, por sua vez

$$\tilde{V}(z) = \int \Phi_{n,m}^{\star}(\rho,\theta) \, \tilde{V}(\vec{r}) \, \Phi_{n,m}(\rho,\theta) \, \rho \, d\rho \, d\theta$$

ou

$$\tilde{V}(z) = \frac{e}{(2\pi)^3} \iint \phi(\vec{q}) \exp(i\vec{q},\vec{r}) |\phi_{n,m}^*(\rho,\theta)|^2 \rho \, d\rho \, d\theta \, d\vec{q}$$

(B-9)

PARTE 2

Para a resolução da equação (B-8), deste apêndice, consideramos o exemplo de Wallace ⁽³⁾, que enquanto o alcance do potencial da impureza na direção transversal do campo magnético forte é comparável às dimensões do raio ciclotrônico do movimento eletrônico, o alcance deste potencial na direção paralela ao campo é pequeno comparado às dimensões da função de onda em tal dir<u>e</u> ção. Assim em cálculos no qual o alcance do potencial não é acentuado, podemos representá-lo como - aqui o caso se aplica na dir<u>e</u> ção do eixo z -

$$\vec{V}(z) = V_0 \delta(z) \tag{B-10}$$

onde V_{ρ} é o alcance do potencial, ou ainda

$$V_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(z) dz \qquad (B-11)$$

Agora resolveremos a equação (B-8) para um elétron que está nas proximidades de um núcleo de impureza isolada cujo potencial efetivo é descrito por (B-10).

A equação de onda, então, toma a seguinte forma p<u>a</u> ra o elétron dentro do "poço" de potencial - Sachs(30)

$$\frac{d^{2}Z_{i}(z)}{dz^{2}} + K_{0}^{2}Z_{i}(z) = -\frac{2m^{*}}{\hbar^{2}}\tilde{V}(z)Z_{i}(z) = -\frac{2m^{*}}{\hbar^{2}}V_{0}\delta(z)Z_{i}(z) \qquad (B-12)$$

e toma a forma fora do poço

$$\frac{d^2 Z_0(z)}{dz^2} + K_0^2 Z_0(z) = 0$$
 (B-13)

onda o vetor de onda K₀ é definido em termos da energia do elétron por

 $\kappa_0^2 = \frac{2m\mathbf{\tilde{E}}_o}{\hbar^2}$

A função de onda do elétron real para este problemaé então obtida resolvendo as equações (B-12) e (B-13) para Z_i e Z_0 , respectivamente, e dai usando-se as condições de continuidade para as funções de onda e suas derivadas, na barreira de potencial e impondo que sejam finitas em todo o espaço. Este problema difere do conhecido usualmente, pois a condição de contorno é imposta somente em um ponto (z=0), ao invés dos usuais dois pontos (os 2 lados da caixa unidimensional)

Assim, integrando (B-12) de $-\varepsilon$ a $+\varepsilon$, onde ε é um número muito pequeno, que é feito zero depois da integração,

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \left\{ \int_{\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d^2 z_i}{dz^2} dz + K_0^2 \int_{\varepsilon}^{\varepsilon} z_i dz = -\frac{2m^*}{\hbar^2} V_0 \int_{\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(z) z_i(z) dz \right\}$$

$$\max \ como \ i \ \varepsilon$$
(B-14)

$$\begin{bmatrix} \lim_{z \to 0} \\ z \\ z \end{bmatrix}_{z} (z) dz = 0$$
(B-15)

$$\frac{dZ_{i}}{dz}\Big|_{0^{+}} - \frac{dZ_{i}}{dz}\Big|_{0^{-}} = -\frac{2m^{*}}{\hbar^{2}}Z_{i}(0) \qquad (B-16)$$

A solução exterior Z₀ da equação de onda (B-13) tem a forma de uma onda progressiva movendo-se para a direita

$$Z^{+} = A_{+} \exp(iK_{0}z) \tag{B-17}$$

ou uma onda progressiva movendo-se para a esquerda

$$Z = \frac{1}{2} A_{-} exp(-iK_{0}z)$$
 (B-18)

Na ausência do poço de função $\delta(delta)$, $Z_0 é uma função de onda de elétron livre e as amplitudes <math>A_+$ e A_- podem ser tomadas de igual valor e escolhidas igual a unidade.

Vamos denotar a função de onda exterior por

$$Z_{0}^{\pm} = exp(\pm iK_{0}z) \qquad (B-19)$$

lembrando que Z_0^{\perp} representam duas soluções independentes.

Agora vamos determinar os autovalores de energia

para os elétrons presos dentro de um poço-ô, fazendo uso das con dições de contorno

$$Z_0(z=0) = Z_i(z=0) = 1$$
 (B-20)

e equação (B-16).

$$\frac{dZ_i}{dz}\Big|_0 = \frac{dZ_0}{dz}\Big|_0 = \pm iK_0 \tag{B-21}$$

combinando (B-20), (B-16) e (B-21) temos

$$\stackrel{+}{=} iK_0 \stackrel{-}{=} iK_0 = -\frac{2m^*}{\hbar^2} V_0 \tag{B-22}$$

das quatro possíveis maneiras de combinar os sinais + e - na equa ção (B-22), dos resultados não nulos vêm da escolha de sinais semelhantes, dando

$$\stackrel{t}{=} iK_0 = -\frac{m^*}{\hbar^2} V_0 \tag{B-28}$$

então a função de onda interior é

$$Z_{i} = exp(m*V_{0}z/\hbar^{2}) \qquad (B-24)$$

Satisfazendo as condições de serem finitos, as duas soluções independentes, acima, devem ser válidas somente nas seguintes regiões

$$Z^{+} = exp(m * V_0 z/\hbar^2) \qquad z < 0$$

$$Z^{-} = exp(-m * V_0 z/\hbar^2) \qquad z > 0$$
(B-25)

de tal sorte que a energia

$$\mathbf{E}_{0} = \left(\frac{m^{\star}}{2\hbar^{2}}\right) V_{0}^{2} \tag{B-26}$$

 $ec{e}$ o único estado ligado associado com potencial tipo- δ . Normalizando

$$A^{2}\left[\int_{\infty}^{0} dz \, \exp\left(2m * V_{0} z/\hbar^{2}\right) + \int_{0}^{\infty} dz \, \exp\left(-2m * V_{0} z/\hbar^{2}\right)\right] = 2$$

resultando

$$A = \left[\frac{m * V_0 / \hbar^2}{2} \right]^{1/2} e \text{ finalmente}$$

$$Z(z) = \left[\frac{m * V_0 / \hbar^2}{2} \right]^{1/2} exp(-m * V_0 |z| / \hbar^2) \qquad (B-27)$$

-52-

Referências

2

.

13

.

	1.	Y. Yafet / R. Keyes / N. Adams
		J. Phys. Chem. Solids, <u>1</u> , 137(1956)
	2.	Kh. Amirkhanov / R. Bashirov / A. Mollaev
		Sov. Phys - Solid State <u>13</u> , 701(1971)
2	3.	P. Wallace
		J. Phys. C: Solid St. Phys., <u>7</u> , 1136 (1974)
	4.	M. Dyakonov / A. Efros / D. Mitchell
		Phys. Rev., <u>180</u> , 813 (1969)
	5.	T. Poehler
		Phys. Rev. B, <u>4</u> , 1223 (1971)
	6.	E. Fenton / R. Haering
		Phys. Rev., <u>159</u> , 593 (1967)
	7.	S. Jog / P. Wallace
		J. Phys. C: Solid State Phys, <u>11</u> , 2763 (1978)
	8.	H. Ehremreich / M. Cohen
		Phys. Rev., <u>115</u> , 786 (1959)
	9.	P. Zyryanov
		Sov. Phys. JETP, <u>13</u> , 751 (1961)
	10.	J. Quinn / S. Rodrigues
		Phys. Rev., <u>128</u> , 2487 (1962)
	11.	N. M.r. ir / E. Canel
		Ann. Phys., <u>26</u> , 247 (1964)
×	12.	M. Lima / C. Lima / L. C. Miranda
		J. Phys. C: Solid State Phys., <u>12</u> , 001 (1979)
	13.	E. Harris
		Advances in Plasma Physics. Vol. 3. Eds.: A. Simon
		W. Thompson. Reading, Mass : Addison-Wesley (1969)
	14.	Landau et Lifchitz
		Mécanique Quantique (Théorie Non Relastiviste)
		Éditions Mir (M.scou) (1966)
	· .	
	·	

-54-

. ¹¹ -

е

	15.	J. Seely
	·	Am. J. Phys., <u>42</u> , 326 (1974)
-	16.	L. C. Miranda
		J. Phys. C: Solid State Phys., <u>9</u> , 2971 (1976)
	17.	L. C. Miranda
		Solid St. Comm., <u>22</u> , 193 (1977)
	18.	L. Landau
	1	Z. Phys., <u>64</u> , 629 (1930)
	19.	M. Johnson / B. Lippmann
		Phys. Rev., <u>76</u> , 828 (1949)
	20.	M. Stephen
		Phys. Rev., <u>129</u> , 997 (1963)
	21.	E. Harris
		Am J. Phys., <u>39</u> , 683 (1971)
	22.	N. Ashcroft / N. Mermin
		Solid State Physics
		Holt, Rinehart, Wiston (N.Y.) (1976)
	23.	P. Kiréev
		La Physique des Semiconducteurs
		Édítions Mir (Moscou), (1975)
	24.	R. C. C. Leite / A. R. B. de Castro
		Fisiça do Estado Sólido
•••••		Ed. Edgard Blucher Ltda., UNICAMP (1978)
	25.	P. J. Redmond
		J. Math. Phys., <u>6</u> , 1163 (1965)
	26.	Stephen Gasiorowicz
		Quantum Physics
		John Willey and Sons (1974)
	27.	M. Jain / N. Tzoar
./	,	Phys. Rev., <u>A15</u> , 147 (1977)

28. P. Morse / H. Feshback Methods of Theoretical Physics McGraw-Hill Book Co. (1953)

-56-

29. J. S. Blackemore Semi-ordi tor Statistics

Pergamon Press (london) (1962)

30. M. Sachs

Solid State Theory

Dover Publ. Inc. (N.Y.) (1974)