Universidade de São Paulo

Instituto de Física e Química de São Carlos

ESPALHAMENTO ASSISTIDO POR FÔNONS: ALGUNS MODELOS EXATAMENTE SOLÚVEIS

José Carlos Egues de Menezes

Dissertação apresentada ao instituto de Física e Química de São Carlos, USP, para obtenção do Título de Mestre em Física Aplicada.

Orientador: *Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Jr.*

Departamento de Física e Ciência do Materiais

São Carlos

1990

ok

USP / IFQSC / SBI

8-2-000864

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE

José Carlos Egues de Menezes

APRESENTADA

AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 27 DE abril DE 198 90.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Lidério C. Ioriatti Jr. Orientador

Dr. Luiz Antonio de Oliveira Nunes

Dr. Marilia Junqueira Caldas

– A Minha esposa Maria Auxiliadora e a meus filhos, Marcus e Mariana, com amor.

– A meus pais, Miguel e Maria, e ao meu irmão Toninho, com afeto.

Agradeço:

Primeiramente agradeço a minha companheira, Maria Auxiliadora, pela paciência, compreenssão, amor e carinho a mim dispensados.

Agradeço ainda àqueles que me proporcionaram, aqui em São Carlos, uma agradável convivência:

– Miled, Ilde, Du e neto, Chahine, Nagib, Flávio, Braz, Zé Luis, Peter, Botura, Cláudio, Antônio Carlos, Delboni e Kátia, Paulinho, Valmir, Ricardo, Luciane e Bianor, Pedro e Ângela, Ednilton, Paraná, Zé Renato e Ângela, Bodas, Santoro, Beto, Paulo L., Wilson Barbosa,...

– Ao Mauro em especial pela amizade e dedicação dispensada à datilografia desta dissertação.

– À Cecília, Irene, Suely, Bel, Wlá, Márcia, Ítalo, Samuel, Valdir, e bibliotecárias pela simpatia, solicitude e competência.

A minha família em Campo Grande que mesmo distante está sempre presente.

Aos velhos amigos: Sérgio, Sá, Simões, Renato, Luis Antônio, Manoel, Max,...

Ao CNPq pelo auxílio financeiro.

Finalmente gostaria de Agradecer ao Prof. Lidério, meu orientador neste trabalho, pela amizade e pelas valiosas discussões as quais, sem dúvida, em muito contribuiram para a minha formação.

RESUMO

Nesta dissertação, tratamos do espalhamento de partículas (elétrons e éxcitons) em sistemas nos quais o potencial espalhador está acoplado a modos vibracionais.

Os efeitos do acoplamento, no espalhamento das partículas, são estudados em dois problemas particularmente interessantes, a saber: o tunelamento de elétrons em heterojunções e o espalhamento de excitações em sólidos. Em ambos há a possibilidade de ocorrência de espalhamento inelástico/ressonante assistido por fônons. Verifica-se que a interação com modos vibracionais induz o aparecimento de estruturas bastantes peculiares nos coeficientes de transmissão e seções de choque. Tais estruturas decorrem da existência de espalhamento inelástico (abertura de novos canais) e de efeitos de interferência, construtiva e destrutiva, característicos de sistemas nos quais se tem acoplamento entre um nível discreto e o contínuo.

ABSTRACT

In this work we consider the scattering of excitations in systems in which a local scatterer center is coupled to single vibrational mode.

The effects of the coupling are studied in two particular systems, namely, the tunneling of electrons in heterojunctions and the scattering of excitations by impurities in solids. In both cases inelastic scattering is observed and peculiar structures in transmission amplitudes and cross sections are observed. Such structures are a direct consequence from the newly open scattering channels and from interference effects resulting from the coupling of the discret with the continum

ÍNDICE

CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO

CAPÍTULO II – TUNELAMENTO INELÁSTICO E EFEITOS DE INTERFERÊNCIA NO ESPECTRO DE TRANSMISSÃO DE ELÉTRONS EM HETEROJUNÇÕES: UM MODELO EXATAMENTE SOLÚVEL

1 – Espalhamento de um Elétron por um Potencial Delta Acoplado a uma Coordenada Harmônica....7

2 – Discussões

2.1 – Potencial Repulsivo (Barreira)....18

2.2 – Potencial Atrativo (Poço Quântico)....21

CAPÍTULO III – INFLUÊNCIA DO ACOPLAMENTO LOCAL IMPUREZA–FÔNONS NO ESPALHAMENTO DE ÉXCITONS EM SÓLIDOS

1– Éxcitons....30

2 – Éxcitons de Frenkel em uma Rede Cúbica Simples....32

3 – Espalhamento de Éxcitons por Impurezas Acopladas com Fônons....36

4 – Discussões....43

CONCLUSÃO....52

SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS....53

APÊNDICES

APÊNDICE – A....54

APÊNDICE – B....64

APÊNDICE – C....68

APÊNDICE – D....72

APÊNDICE – E....76

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS....79

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

INTRODUÇÃO

Neste trabalho, pretendemos abordar teoricamente o interessante problema do espalhamento de partículas por potenciais acoplados a modos vibracionais. A motivação principal que nos levou a estudar este tipo de problema se deve ao fato de que em sistemas reais o centro espalhador, via de regra, possui graus de liberdade internos os quais podem ser eventualmente excitados durante o espalhamento. Dessa forma, nestes sistemas há a possibilidade de ocorrência de espalhamento inelástico e/ou ressonante. É importante pois o conhecimento dos efeitos produzidos pelo acoplamento a modos vibracionais no processo de espalhamento, pois os mesmos podem afetar grandemente, por exemplo, as propriedades de transporte em sólidos. Além disso, há sempre a importância básica inerente a todo desenvolvimento teórico elegante. Devemos ressaltar o fato de que os "modos vibracionais", a que nos referimos, podem, a princípio, representar um grau de liberdade qualquer do centro espalhador.

Primeiramente consideraremos, no capítulo II, um modelo unidimensional, exatamente solúvel, que descreve o espalhamento de um elétron por um potencial delta acoplado linearmente a um oscilador harmônico. O interesse neste tipo de sistema reside no fato de que o mesmo, sob certas circunstâncias, pode ser utilizado no estudo do tunelamento inelástico assistido por fônons em heterojunções. Como é sabido, o tunelamento de elétrons em heteroestruturas tem atraído um grande interesse nos últimos anos devido a sua importância básica e sobretudo tecnológica. Em particular podemos citar o problema do transporte perpendicular em heteroestruturas com dupla barreira (HDB) do tipo GaAs/AlGaAs as quais, desde o trabalho pioneiro de Tsu e Esaki[1], tem motivado um número cada vez maior de trabalhos. Um outro sistema bastante interessante é aquele no qual se tem uma heteroestrutura com uma única barreira ou um único poço quântico. É importante assinalarmos que em sistemas reais o

elétron, ao atravessar a heteroestrutura, inevitavelmente interage com as vibrações da rede e essa interação pode alterar de maneira drástica a probabilidade de transmissão do elétron, caso haja a possibilidade de ocorrência de processos inelásticos e sobretudo ressonantes. Os processos ressonantes são particularmente importantes pois nestes o elétron de condução se encontra em um estado que é degenerado com estados discretos localizados, devido por exemplo à presença de impurezas no interior da barreira ou a estados ligados do próprio poço quântico, de maneira que o mesmo atinge essas configurações localizadas e permanece um tempo relativamente longo no interior da estrutura. Esta permanência em estados localizados provoca pois distorções locais o que torna mais eficaz a sua interação com a estrutura. A mudança na transmissão ocasionada pela interação com fônons, se manifesta diretamente na corrente de tunelamento de maneira que pode ser medida experimentalmente. No caso de HDB Goldman, Tsui e Cunningham[2] recentemente mostraram evidências experimentais para o tunelamento ressonante assistido por fônons longitudinais óticos e esse efeito foi teoricamente confirmado por Wingreen, Jacobsen e Wilkins[3]. Há também evidências experimentais[4] para o tunelamento inelástico, assistido por fônons, de elétrons através de heterojunções com uma única barreira do tipo AlAs/GaAs. O fato do espalhamento do elétron em heteroestruturas envolver canais elásticos e inelásticos leva, devido a conservaçõao do fluxo (condição de unitariedade), a um importante mecanismo de "feedback"[5] pelo qual os processos inelásticos podem alterar drasticamente a probabilidade dos elásticos. Este mecanismo de "feedback" está fora do alcance de qualquer tratamento perturbativo. Além do mais, a aproximação adiabática também não é aplicável pois como já dissemos o elétron interage fortemente com os modos vibracionais na heterojunção trocando energia com esses. Dessa forma, um tratamento não perturbativo se faz necessário no estudo do espalhamento de elétrons em heteroestruturas.

Outro interessante problema que abordaremos, capítulo III, é o que diz respeito ao espalhamento de excitações (éxcitons) por impurezas substitucionais acopladas a um

único modo vibracional (modelo de boson independente). Sabe–se que um sólido real sempre possui defeitos e ou impurezas em sua estrutura cristalina. A presença destes pode alterar grandemente o livre caminho médio de excitações (éxcitons, mágnons, etc.), devido ao espalhamento pelas impurezas, retardando a migração da energia de excitação pelo mesmo. Uma situação particularmente interessante ocorre quando a impureza induz o aparecimento de estados localizados[1] que são degenerados com a banda das excitações. Obviamente, devido ao acoplamento entre o nível discreto e o contínuo (banda),o estado localizado dentro da banda não constitui um estado estacionário. Nestas circunstâncias, a excitação ao atingir o sítio da impureza pode, dependendo de sua energia, atingir configurações localizadas e dessa forma permanecer um tempo relativamente[2] grande no sítio da impureza. Este tempo que a excitação reside no sítio da impureza pode ser maior que, por exemplo, o tempo característico de relaxação da rede. Assim sendo, no espalhamento ressonante, a excitação inevitavelmente interagirá com os modos vibracionais locais da rede, pois a existência de estados ressonantes torna mais eficaz essa interação aumentando de certa forma a possibilidade de ocorrência de espalhamento inelástico ou mesmo a captura[3] da excitação pelo centro espalhador. É interessante assinalarmos que as distorções locais provocadas pela presença da excitação no sítio da impureza podem ser visualizadas, dentro da aproximação de ligações fortes (tight–binding), como decorrentes, por exemplo, do fato de que o átomo (ou molécula) da impureza possui orbitais diferentes dos orbitais dos demais átomos do sólido de modo que quando a excitação se distribui ao redor da impureza ocorrem distorções. Dessa forma, devemos esperar que qualquer modelo teórico que pretenda descrever, mesmo grosseiramente, um sistema como o que acabamos de citar traga embutido na sua estrutura algo que represente a interação entre a excitação e os modos vibracionais da rede no sítio da impureza. Como veremos, a existência de níveis ressonantes altera de maneira drástica o comportamento das seções de choque. De modo

[1]Estes estados podem, por exemplo, ser estados excitados da impureza.

[2]Em relação ao tempo de permanência em outros sítios do sólido.

[3]Não consideraremos esta possibilidade

análogo ao problema do espalhamento inelástico de elétrons em heteroestruturas, tratado no capítulo II, o problema do espalhamento ressonante com interação excitação–fônons não pode ser tratado perturbativamente e a aproximação de Born–Oppenheimer (ABO) também não é válida. É interessante pois que no tratamento desse problema, tenhamos um modelo que trate a interação com fônons de modo exato.

O nosso modelo para o espalhamento de excitações por impurezas substitucionais acopladas a modos vibracionais leva em conta tal interação considerando que o sítio impuro se encontra linearmente acoplado a um oscilador harmônico. O modelo que propomos para se estudar espalhamento de excitações é bastante geral e pode ser aplicado, com algumas modificações, a outras situações em contextos totalmente distintos do que o que consideraremos. Como exemplo podemos citar o espalhamento inelástico/ressonante de partículas por núcleos[6]. É sabido que a partícula incidente interage com o núcleo e, dependendo da sua energia, pode excitar o núcleo formando um estado composto com o mesmo. Podemos esperar que durante a formação desse estado composto ocorram vibrações e/ou distorções do núcleo. A partir do nosso modelo pode–se levar em conta, de maneira bastante simples, o efeito dessas vibrações no espalhamento da partícula. Para tanto, basta considerarmos que o potencial do núcleo está linearmente acoplado a um oscilador harmônico. Neste caso o oscilador representa uma forma qualquer de vibração do núcleo[4]. Considerando o potencial do núcleo do tipo $\delta(r - r_o)$ (Delta Shell[7]) o hamiltoniano do problema fica

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \gamma\delta(r - r_o) + \hbar\omega a^\dagger a + \lambda\delta(r - r_o)\,(a^\dagger + a)$$

É importante assinalarmos que mesmo com a inclusão do acoplamento vibracional o problema ainda continua exatamente solúvel. Uma outra situação na qual poderíamos aplicar o nosso modelo é no estudo da absorção e/ou espalhamento eletrônico por centros

[4]No modelo de gotas, por exemplo, esta vibração pode ser uma combinação de vibrações superficiais e volumétricas

DX. Quando se introduz dopantes doadores em semicontudores, cada doador, independentemente de composição da liga (por exemplo, $Al_xGa_{1-x}As$), induz o aparecimento de dois tipos de estados eletrônicos: um nível raso e deslocalizado associado à própria configuração do sitio substitucional, e um nível mais localizado que aparece devido a distorções[8] da rede no sítio do doador ou ao redor do mesmo. Estes estados localizados são denominados centros DX. Um cálculo interessante a ser feito neste tipo de problema é o da seção de fotoionização de elétrons, nos centros DX, sem a tradicional hipótese de que as coordenadas eletrônicas e vibracionais são separáveis[9] (ABO). Isto pode ser feito pois, a partir do nosso modelo, podemos determinar as exatas funções de onda, para o elétron ligado ao centro e para o elétron na banda de condução, de maneira que, na aproximação de dipolo, pode-se facilmente determinar a seção de choque de fotoionização. Podemos citar ainda o estudo de estados magnéticos localizados[10] em metais. Consideremos o caso em que o tratamento de Anderson é particularmente aplicavél, ou seja, quando o átomo da impureza possui uma camada "d" vazia ou parcialmente cheia e os estados de condução do sólido são do tipo "s" ou uma mistura "s-p". Nestas circunstâncias, se existir um estado magnético localizado na impureza este será degenerado com o contínuo (banda) de modo que há a possibilidade de processos ressonantes e a interação com a rede pode existir. Neste caso, pode-se também tentar utilizar um acoplamento linear na descrição da interação com a rede.

Das considerações acima vemos que o nosso modelo, a princípio, pode ser aplicado a uma variedade de problemas bastante distintos e interessantes. Este fato se constitui pois na principal motivação que nos levou a abordar tal modelo.

CAPÍTULO II

TUNELAMENTO INELÁSTICO E EFEITOS DE INTERFERÊNCIA ASSOCIADOS À PRESENÇA DE FÔNONS NO ESPECTRO DE TRANSMISSÃO DE ELÉTRONS EM HETEROJUNÇÕES: UM MODELO EXATAMENTE SOLÚVEL.

Capítulo II

Neste capítulo estudaremos um modelo exatamente solúvel o qual pode ser aplicado na descrição do espalhamento de elétrons em heteroestruturas, constituidas por uma barreira ou um poço quântico, no limite em que o comprimento de De Broglie, λ_D, do elétron é muito maior que a extensão, d, do potencial de maneira que o mesmo possa ser aproximado por um potencial delta, $\mu\delta(x)$. O nosso trabalho se baseia no modelo de doador proposto recentemente por Hopfield e Beratan[11] quando eles estudaram a validade da aproximação de Born–Oppenheimer (ABO) em sistemas biológicos nos quais a transferência de elétrons ocorre a longas distâncias. Nesses sistemas o movimento do elétron no sítio doador está acoplado aos modos vibracionais do mesmo de modo que a aproximação adiabática, que assume uma configuração fixa durante todo o evento de transferência, deixa de ser estritamente válida. A função de onda obtida utilizando–se a ABO pode dar bons resultados no cálculo de energias. Entretanto, o cálculo da taxa de transferência de elétrons a longas distâncias, grandeza fundamental no problema, obtida por exemplo a partir da "regra de ouro", é criticamente afetado pois o mesmo depende da superposição das funções de onda do doador e do aceitador e portanto do comportamento assintótico das funções de onda os quais são drasticamente afetados pelo acoplamento eletrônico a modos vibracionais.

Para estudar tais sistemas Hopfield e Beratan propuseram um modelo unidimensional, exatamente solúvel, no qual tem–se um doador hipotético, que possui um único elétron, cujo potencial ligante é do tipo delta e um oscilador harmônico, que representa os modos vibracionais do doador, com o elétron linearmente acoplado à coordenada harmônica, q. O aceitador é definido de modo semelhante ao doador, excetuando–se o fato de não possuir elétrons.

No trabalho citado acima os autores estavam interessados, essencialmente, na

determinação dos exatos autoestados ligados, com $E < 0$, do doador de modo a poderem calcular a taxa de transferência exata, para que pudessem comparar tal resultado como obtido a partir da aproximação adiabática mostrando assim, a "falha" de tal aproximação no cálculo da taxa de transferência de elétrons a longas distâncias.

Como já dissemos, nossa pretensão é utilizar o modelo de Hopfield–Beratan num contexto totalmente diferente, ou seja, consideraremos o modelo citado sob o ponto de vista do espalhamento, $E > 0$, de modo que possa, por exemplo, ser aplicado ao problema do espalhamento de elétrons em heteroestruturas. Estaremos interessados pois nos autoestados de espalhamento do sistema[5] (doador). Assim sendo, pretendemos simplesmente estudar o espalhamento quântico de um elétron por um potencial delta acoplado a um oscilador harmônico. Na próxima seção trataremos este problema.

1. ESPALHAMENTO DE UM ELÉTRON POR UM POTENCIAL DELTA ACOPLADO A UMA COORDENADA HARMÔNICA.

O hamiltoniano do sistema é mesmo do problema de Hopfield e Beratan, e é dado por

$$H = H_{el} + H_{vib} + H_{ac} \tag{II.1}$$

com

$$H_{el} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{mb}\mu\delta(x) \tag{II.2}$$

[5]No contexto de espalhamento, em que estamos interessados, o termo "doador" é inadequado pois não mais se tem um elétron ligado que pode, eventualmente, ser transferido.

$$H_{vib} = \hbar\omega a^{\dagger} a \tag{II.3}$$

e

$$H_{ac} = \frac{\hbar^2}{mb} \lambda \delta(x)(a^{\dagger} + a) \tag{II.4}$$

onde $\mu > 0$ ($\mu < 0$) e λ são parâmetros adimensionais e representam, respectivamente, as intensidades do potencial delta repulsivo (atrativo) e do acoplamento elétron—oscilador e b é uma constante com dimensão de comprimento. A equação a ser resolvida é

$$H|\varphi> = E|\varphi>, \quad E > 0 \tag{II.5}$$

para a determinação dos autoestados de espalhamento é conveniente escrevermos (II.5) na forma

$$(H_0 + H_{vib} - E)|\varphi> = -V|\varphi> \tag{II.6}$$

na qual V é o potencial espalhador definido por

$$V = \frac{\hbar^2}{mb} \delta(x)[\mu + \lambda(a^{\dagger} + a)] \tag{II.7}$$

e

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Da teoria formal do espalhamento[12], sabemos que os autoestados de espalhamento,

$|\varphi^{(+)}>$, de(II.6) são dados pela equação de Lippmann–Schwinger

$$|\varphi^{(+)}> = |\varphi^{(0)}> + G_0^{(+)} V |\varphi^{(+)}> \tag{II.8}$$

onde $|\varphi^{(0)}>$ é solução de (II.6) com $V = 0$ e $G_0^{(+)}$ é o operador de Green retardado e satisfaz a equação

$$[E - (H_0 + H_{vib}) + i\epsilon] G_0^{(+)} = \mathbb{1}. \tag{II.9}$$

O autoestado $|\varphi^{(0)}>$ é obtido facilmente, supondo soluções separáveis, e é dado por

$$|\varphi^{(0)}> = |k_n> |\phi_n> \tag{II.10}$$

com $|k_n>$ e $|\phi_n>$ sendo, na representação de coordenadas, respectivamente, uma onda plana com módulo do vetor de onda igual a

$$k_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E_{k_n}}, \quad E_{k_n} = E - n\hbar\omega \tag{II.11}$$

e a autofunção do n–ésimo estado do oscilador as quais são, a menos de constantes,os polinômios de Hermite de grau n.

Na base $\{|\varphi^{(0)}>\}$ podemos, a partir de (II.9), expandir $G_0^{(+)}$ como

$$G_0^{(+)} = \sum_{n=0}^{\infty} \int \frac{L dk'_n |k'_n> |\phi_n> <\phi_n| <k'_n|}{2\pi(E - n\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k_n'^2}{2m} + i\epsilon)} \tag{II.12}$$

onde L é o comprimento da caixa na qual definimos a normalização de $<x|k_n>$[6]. A equação de Lippmann–Schwinger na representação de coordenadas $|xq>$ é

$$<xq|\varphi^{(+)}> = <xq|\varphi^{(0)}> +$$

$$\iiiint_{-\infty}^{\infty} dx'dx''dq'dq''<xq|G_0^{(+)}|x'q'><x'q'|V|x''q''><x''q''|\varphi^{(+)}> \tag{II.13}$$

utilizando (II.10) e lembrando que o potencial espalhador é local, ou seja

$$<x'q'|V|x''q''> = V(x',q')\delta(x'-x'')\delta(q'-q'') \tag{II.14}$$

com

$$V(x',q') = -\frac{h^2}{mb}\delta(x')[\mu - \lambda(a^\dagger + a)] \tag{II.15}$$

temos que (II.13) fica

$$\varphi^{(+)}(x,q) = e^{ik_n x}\phi_n(q) + \iint_{-\infty}^{\infty} dx'dq'G_0^{(+)}(x,x',q,q')V(x',q')\varphi^{(+)}(x',q') \tag{II.16}$$

onde

[6]Consideraremos L = 1 por conveniência.

$$G_0^{(+)}(x,x',q,q') = \langle xq|G_0^{(+)}|x'q'\rangle \tag{II.17}$$

que a partir de (II.10) e (II.12), supondo–se que o oscilador harmônico encontra–se no estado fundamental de modo que $E = \hbar k_n^2/2m$, tornar–se

$$G_0^{(+)}(x,x',q,q') = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(q)\phi_n(q')\frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_n'}{2m(k_n^2 - k_n'^2)} e^{ik_n(x - x')} \tag{II.18}$$

Resolvendo[13] a integral em (II.18), no plano complexo, obtemos a função de Green retardada

$$G_0^{(+)}(x,x',q,q') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{m}{ik_n\hbar^2} e^{ik_n|x-x'|}\phi_n(q)\phi(q') \tag{II.19}$$

substituindo (II.19) e (II.15) em (II.16), temos

$$\varphi^{(+)}(x,q) = e^{ik_0x}\phi_0(q) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{ik_nb}\phi_n(q)e^{ik_n|x|}\int_{-\infty}^{-\infty} \varphi^{(+)}(0,q')\phi_n(q')[\mu + \lambda(a^\dagger + a)]dq' \tag{II.20}$$

definindo–se um coeficiente a_n como

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} dq'\varphi^{(+)}(0,q')\phi_n(q') \tag{II.21}$$

tem–se

$$\varphi^{(+)} = e^{ik_0x}\phi_0(q) + \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{ik_nb}\,\phi_n(q)e^{ik_n|x|}[\mu a_n + \lambda(\sqrt{n+1}\,a_{n+1} + \sqrt{n}\,a_{n+1})] \tag{II.22}$$

Da equação (II.22) vemos claramente que a autofunção $\varphi^{(+)}(x,q)$ depende explicitamente dos coeficientes a_n. Para determinarmos tais coeficientes basta notarmos que se fizermos x=o em (II.22) e a projetarmos no m–ésimo estado do oscilador obtemos uma relação de recorrência, para os coeficientes, do tipo

$$a_m = \delta_{m,0} + \frac{1}{ik_mb}[\mu a_m + \lambda(\sqrt{m+1}\,a_{m+1} + \sqrt{m}\,a_{m-1})] \tag{II.23}$$

que pode ser, como veremos, facilmente resolvida. Antes porém, vejamos qual a interpretação física da equação (II.22) bem como dos vários coeficientes a_n. Com o auxílio de (II.23) podemos reescrever (II.22) na forma

$$\psi^{(+)}(x,q) = e^{ik_0x}\phi_0(q) + \sum_{n=0}^{\infty}(a_n - \delta_{n,0})e^{ik_n|x|}\phi_n(q)$$

ou melhor

$$\varphi^{(+)}(x,q) = \begin{cases} e^{ik_0x}\phi_0(q) + \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty}(a_n - \delta_{n,0})e^{-ik_nx}\phi_n(q) & x \leq 0 \\ \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{ik_nx}\phi_n(q) & x \geq 0 \end{cases} \tag{II.24}$$

A autofunção do sistema na forma (II.24) pode ser facilmente interpretada. Para tanto, basta olharmos para a solução do problema no caso particular em que o acoplamento,

elétron—oscilador, é nulo a qual é dada por

$$\varphi^{(+)}(x,q)\Big|_{\lambda=0} = \begin{cases} e^{ik_0x}\phi_0(q) + (a_0-1)e^{-ik_0x}\phi_0(q) & x \leq 0 \\ \\ a_0 e^{ik_0x}\phi_0(q) & x \geq 0 \end{cases} \tag{II.25}$$

onde a_o é determinado a partir da expressão (II.23) fazendo $m = \lambda = 0$. A expressão (II.25) descreve o processo de espalhamento elástico do elétron, pelo potencial delta, no qual o mesmo possui amplitudes $(a_o - 1)$ e a_o de ser respectivamente, refletido e transmitido. É importante enfatizarmos que o espalhamento elástico decorre do fato de que o elétron e o oscilador não se interagem e portanto não podem trocar energia entre si, no caso de $\lambda = 0$. Assim sendo, podemos dizer que (II.24) descreve simplesmente o caso geral do espalhamento eletrônico, que inclui (II.25) como um caso particular, no qual há, além do processo elástico, processos inelásticos, decorrentes do acoplamento não nulo, noc quais oelétron e o oscilador trocam energia[7]. Convém ressaltarmos que (II.24) constitui um autoestado de espalhamento do sistema tanto para $\lambda = 0$ quanto para $\lambda \neq 0$. Convém salientarmos que, sendo $|\phi_{lig}>$ um autoestado ligado do sistema,para $\lambda = 0$ ou $\lambda \neq 0$, sempre teremos

$$<\phi_{lig}|\varphi^{(+)}> = 0$$

ou seja os autoestados do sistema são ortogonais. Isto significa que o elétron incidente nunca poderá ficar ligado[8]. Dessa forma, os processos fisicamente possíveis, os quais podem ocorrer de fato, são aqueles nos quais o elétron incidente interage com o oscilador,

[7]No caso que estamos considerando, o elétron só pode ceder energia para o oscilador pois o mesmo se encontra, inicialmente, no estado fundamental

[8]A menos que existam mecanismos de dissipação

no caso $\lambda \neq 0$, podendo trocar ou não energia com o mesmo, e posteriormente, após um tempo que não sabemos a priori, deixa o centro espalhador. Estes processos são descritos em (II.24) pelas componentes cujo vetor de onda, k_n, é real as quais representam ondas refletidas e transmitidas. Somente essas componentes contribuem para o fluxo das ondas espalhadas e neste caso, como veremos, os coeficientes a_n estão intimamente relacionados aos coeficientes de transmissão associados aos vários processos elásticos e inelásticos. Observando (II.24) notamos que além das componentes com k_n real há ainda componentes com vetor de onda complexo. Essas componentes descrevem a projeção da onda incidente nos diversos estados ligados e não contribuem para o fluxo transmitido (pois são reais além de decair exponencialmente com a distância). Obviamente, não descrevem processos fisicamente possivéis pois representam situações em que o elétron está ligado e o oscilador em um dado estado excitado e, como já dissemos, o elétron não pode permanecer ligado. Entretanto, elas descrevem processos nos quais há troca virtual de energia entre o elétron e o oscilador. Vemos pois que a afirmação anterior, de que o elétron pode ou não trocar energia, só se aplica a processos fisicamente possíveis, pois pode–se ter $E < \hbar\omega$ não sendo possível a troca real de energia. Entretanto, em processos associados a k_n complexos, sempre ocorre troca virtual de energia.

O fato das componentes com k_n complexo não representarem processos fisicamente possíveis não significa, de maneira alguma, que não são importantes. Na verdade, tais processos desempenham um papel crucial na física do sistema pois, uma dessas componentes pode eventualmente, dependendo da energia do elétron incidente, coincidir com um dos estados ligados quasi–estacionários do sistema e isto provoca grandes alterações nos coeficientes de transmissão. No apêndice A, discutimos em detalhes a existência de estados ligados bem como a de níveis ligados quasi–estacionários.

Vejamos agora qual a relação entre os coeficientes a_n e os coeficientes de

transmissão associados aos vários processos. Para tanto, consideremos a situação na qual, após o espalhamento, o elétron é transmitido com módulo do vetor de onda k_m e o oscilador é deixado no m–ésimo estado excitado. A amplitude de tal processo é obtida de (II.24) projetando–se a mesma em $\phi_m(q)$. Denotando esta projeção por $\varphi_m^{(+)}(x)$, temos

$$\varphi_m^{(+)}(x) = a_m e^{ik_m x}. \tag{II.26}$$

Definindo o coeficiente de transmissão, T_m, do referido processo como a razão entre o fluxo de probabilidade transmitido e o incidente e lembrando que o fluxo associado a uma dada função f(x) é definido por

$$j = \frac{\hbar}{2mi}[f^*(x)\frac{\partial f(x)}{\partial x} - \frac{\partial f^*(x)}{\partial x} f(x)] \tag{II.27}$$

obtemos

$$T_m = \frac{k_m}{k_0}|a_m|^2 \tag{II.28}$$

A expressão (II.28) nos dá o coeficiente de transmissão para os processos elásticos e inelásticos dependendo, respectivamente, se m = 0 ou não.

Para determinarmos os coeficientes a_m e consequentemente os coeficientes de transmissão, dispomos da relação de recorrência (II.23) que para m = 0 é igual a

$$a_0 = 1 + \frac{1}{ik_0 b}(\mu a_0 + \lambda a_1) \qquad \text{II.29)}$$

e para $m \geq 1$

$$a_m = \frac{1}{ik_m b}[\mu a_m + \lambda(\sqrt{m+1}\, a_{m+1} + \sqrt{m}\, a_{m-1})] \qquad \text{(II.30)}$$

A expressão (II.30) é uma relação de recorrência de três termos. Uma maneira bastante simples de resolvê–la é obtida transformando–a em uma relação de recorrência de dois termos através da introdução de um outro coeficiente. Para tanto, definamos o coeficiente R_m tal que

$$R_m = \frac{a_m}{a_{m-1}} \qquad \text{(II.31).}$$

Dividindo (II.30) por a_m e utilizando (II.31) temos

$$1 = \frac{1}{ik_m b}\left[\mu + \lambda\left[\sqrt{m+1}\, R_{m+1} + \frac{\sqrt{m}}{R_m}\right]\right]$$

ou

$$R_m = \frac{\lambda\sqrt{m}}{-\mu + ik_m b - \lambda\sqrt{m+1}\, R_{m+1}} \qquad \text{(II.32)}$$

que é uma forma mais adequada para os nossos propósitos.

Em princípio temos infinitos[9] coeficientes R_m e a_m a determinar. Entretanto, fisicamente esperamos que as amplitudes a_m, correspondente a processos em que o oscilador se encontra altamente excitado, sejam bastante pequenas e possam ser consideradas nulas a partir de um certo $m = N$[10], onde N é um número adequadamente escolhido. A partir das considerações anteriores, podemos agora determinar os coeficientes a_m e R_m. Inicialmente devemos determinar N. Para obter–se o número N de

[9]Uma vez que o oscilador tem infinitos estados

[10]Isto equivale a impor que o oscilador possui um número finito de estados

modo adequado deve–se proceder da seguinte forma:

1) impõe–se $R_{m+1} = 0$ para um certo $m = N$ arbitrário

2) Determina–se R_N, R_{N-1}...R_1 a partir de (II.32)

3) Determina–se a_o utilizando–se (II.29) e (II.31)

4) Repete–se os procedimentos anteriores para um outro $m = M > N$

5) compara–se $a_o(M)$ com $a_o(N)$ e escolhe–se aquele valor de N para o qual $a_o(M) \cong a_o(N)$ (dentro da precisão adequada) para qualquer $M > N$.

6) Escolhido o valor de N pode–se determinar todos os coeficientes $a_m(m \neq o)$, a partir de (II.31), e a_o.

De posse dos coeficientes a_m, podemos agora determinar os coeficientes de transmissão associados aos vários processos. Na próxima seção apresentaremos e discutiremos alguns gráficos que nos mostram a dependência de T_m em relação a energia da partícula incidente, T_m x E, para vários valores dos parâmetros λ, μ e $\hbar\omega$. Estes gráficos nos auxiliarão na compreenssão de como o acoplamento, do centro espalhador a um modo vibracional, afeta o espalhamento do elétron.

2. DISCUSSÕES

Nesta seção discutiremos, dentre outros, alguns gráficos de T_m x E. Estes gráficos são obtidos[11] a partir de (II.28), (II.29), (II.31) e (II.32). Na análise dos gráficos tentaremos sempre, tendo em vista os possíveis processos que podem ocorrer no sistema, explicar fisicamente as peculiares e bastante interessantes estruturas presentes nos mesmos. Inicialmente analisaremos o caso do potencial repulsivo (barreira) e posteriormente o caso atrativo (poço quântico).

[11]Na obtenção dos gráficos consideramos $m = \hbar = 1$.

2.1 POTENCIAL REPULSIVO (BARREIRA)

Consideremos os gráficos das figuras (1a) e (1b) que nos mostram os coeficientes de transmissão associados aos vários possíveis processos. A característica principal desses gráficos é que os mesmos apresentam singularidades exatamente nas energias dadas por

$$E \cong n\hbar\omega, \quad n \geq 1 \tag{II.33}$$

que correspodem a limiares de energia a partir dos quais um novo canal de espalhamento se abre possibilitando a ocorrência de espalhamento inelástico no qual o elétron cede energia para o oscilador deixando-o excitado. Este comportamento peculiar é bastante conhecido no contexto das reações nucleares[14,15] e é uma consequência da conservação da corrente de probabilidade a qual nos diz que: "se a probabilidade de encontrar o elétron no estado inicial é normalizada a 1 então, após o espalhamento, a soma das probabilidades,de todos os possíveis estados finais,também deve ser igual a 1". Tal lei de

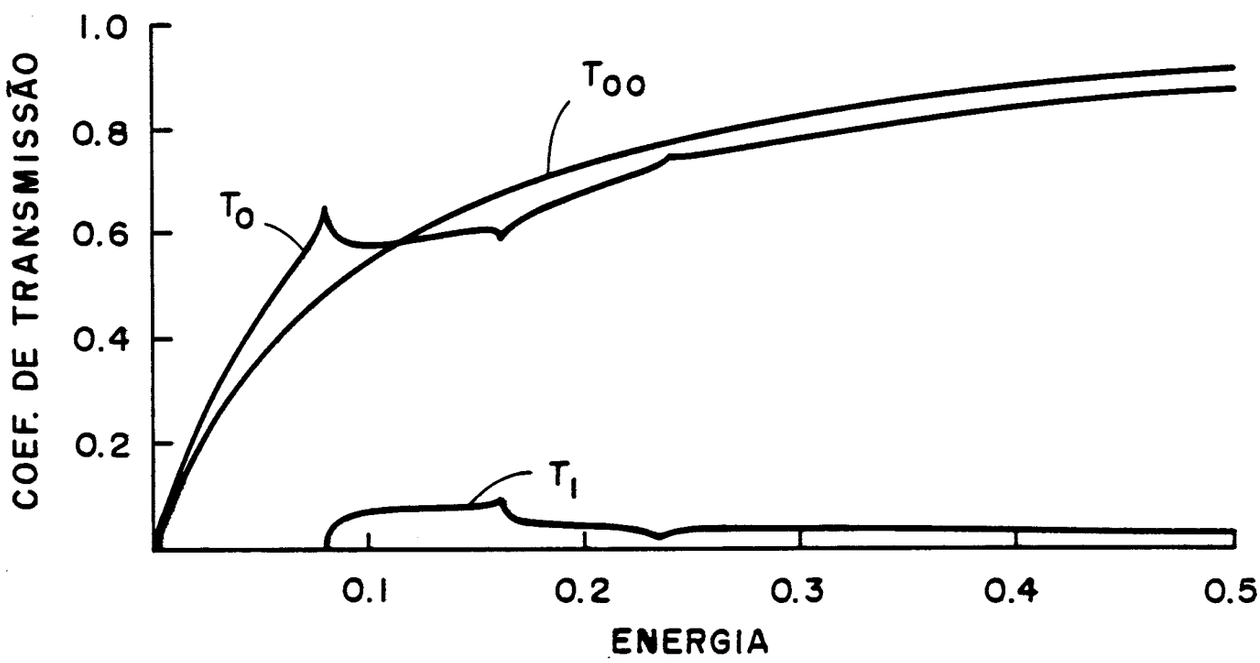


Figura (1a): Coeficientes de transmissão elástico, T_0, inelástico associado a um quantum, T_1, e elástico com acoplamento nulo ($\lambda = 0$), T_{00}. Para T_0 e T_1 utiliza-se $\lambda = 0.2$, $\hbar\omega = 0.08$ e $\mu = 0.45$.

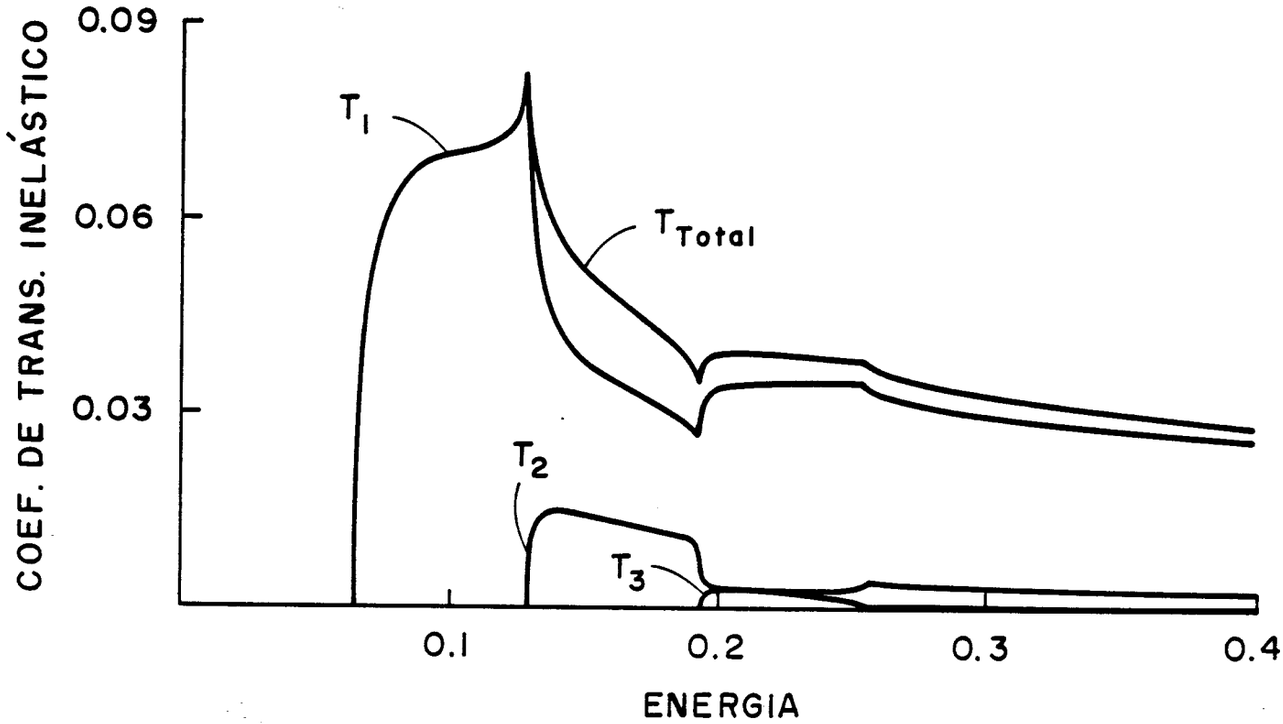


Figura (1b): Coeficientes de transmissão inelásticos T_1, T_2 e T_3 associados, respectivamente, a perda de 1, 2 e 3 quanta. Mesmos parâmetros da figura (1a)

conservação, ou condição de unitariedade, é causa de um importante efeito denominado mecanismo de "feedback" através do qual os processos de espalhamento inelástico alteram a probabilidade do espalhamento elástico. Em problemas unidimensionais, como o que estamos tratando, o mecanismo de "feedback" se manifesta diretamente nos coeficientes de transmissão e reflexão. Isto pode ser visto escrevendo-se a lei de conservação do fluxo para a função de onda (II.24), tem-se

$$\frac{\hbar k_0}{m} - \frac{\hbar k_0}{m}|a_0 - 1|^2 - \frac{\hbar k_1}{m}|a_1|^2 \frac{\hbar k_2}{m}|a_2|^2 - \frac{\hbar k_3}{m}|a_3|^2 \ldots = \frac{\hbar k_0}{m}|a_0|^2 + \frac{\hbar k_1}{m}|a_1|^2 +$$

$$\frac{\hbar k_2}{m}|a_2|^2 + \frac{\hbar k_3}{m}|a_3|^2 + \ldots \qquad \text{(II.34).}$$

convém lembramos que, no cálculo de (II.34), não é necessário considerarmos os termos

da expressão (II.24) com k_n complexo pois estes não contribuem para o fluxo. Dividindo (II.34) pelo fluxo incidente obtemos

$$1 = |a_0 - 1|^2 + \frac{k_1}{k_0}|a_1|^2 + \frac{k_2}{k_1}|a_2| + \frac{k_3}{k_2}|a_3|^2 + ...$$

$$... + |a_0|^2 + \frac{k_1}{k_0}|a_1|^2 + \frac{k_2}{k_1}|a_2|^2 + \frac{k_3}{k_2}|a_3|^2$$

ou melhor

$$1 = R_0 + R_1 + R_2 + R_3 + ... + T_0 + T_1 + T_2 + T_3 + ... \qquad \text{(II.35)}$$

onde R_n e T_n são, respectivamente, os coeficientes de reflexão e transmissão dos vários processos. Fica evidente de (II.35) que há uma regra de soma bem definido, envolvendo os vários coeficientes, segundo a qual todos se interligam.

É importante observarmos que com o aumento da energia as estruturas tornan–se menos evidentes. Isto se deve ao fato de que, a altas energias, o movimento do elétron é muito mais rápido que o movimento do oscilador de maneira que, durante o tempo que o elétron permanece no centro espalhador, o oscilador não é capaz de acompanhar o seu movimento permanecendo fixo em uma certa coordenada q_0. Assim sendo, não há a possibilidade de troca de energia pois o elétron vê simplesmente um oscilador fixo. Podemos dizer ainda que, no limite $E \to \infty$, os processos elásticos dominam totalmente os inelásticos. Devemos esperar que nesse limite a ABO seja válida.

Um outro fato importante a ser notado, nas figuras (1a) e (1b), é o comportamento complementar, também devido a unitariedade, entre o coeficiente de transmissão elástico e o coeficiente total inelástico, ou seja, quando um aumenta o outro diminui e vice–versa.

Observando ainda os gráficos das figuras (1a) e (1b) nota–se que, logo acima das

energias de limiar, dadas por (II.33), o coeficiente de transmissão associado ao canal imediatamente anterior, àquele que foi aberto, decresce significativamente, ou seja, para energias logo acima do limiar $E = \hbar\omega$, a partir da qual o canal de espalhamento inelástico associado a um único quantum, $\hbar\omega$, passa a existir, o coeficiente de transmissão elástico decresce grandemente. Para $E \geq 2\hbar\omega$, na qual surge o canal de espalhamento inelástico associado a dois quanta de energia, o coeficiente de transmissão associado ao processo inelástico de um quantum decresce drasticamente e assim sucessivamente. Tal decréscimo pode ser entendido, por exemplo no caso elástico, observando-se que, para $E < \hbar\omega$, a onda espalhada (transmitida ou refletida) só possui uma única componente, cujo vetor de onda é k_o, e para $2\hbar\omega > E > \hbar\omega$ surge uma outra componente, com vetor de onda $k_1 < k_o$, a qual representa a nova possibilidade de espalhamento inelástico. O surgimento dessa nova componente de baixa velocidade faz com que, devido novamente a unitariedade, o coeficiente de transmissão, associado a componente elástica, decresça.

2.2 CASO ATRATIVO (POÇO QUÂNTICO)

Neste caso, como pode ser visto no apêndice A, o potencial espalhador possui estados ligados quasi-estacionários (ressonantes) e isto faz com que o coeficiente de transmissão tenha um comportamento diferente do caso delta repulsivo, devido à possibilidade de ocorrência de espalhamento ressonante. Observando os gráficos, vemos que são notáveis as estruturas existentes nos coeficiente de trasmissão elásticos, figuras (2) e (3a), e inelásticos, figuras (3b). Tais estruturas, que só ocorrem no caso $\mu < 0$, são radicalmente diferentes das que aparecem no caso do potencial delta repulsivo. Uma breve inspeção nos gráficos é suficiente para constatarmos que as estruturas são de origem diferente, em relação ao potencial repulsivo, pois, por se situarem, no caso elástico, em energias que estão abaixo do 1º limiar de espalhamento inelástico, não

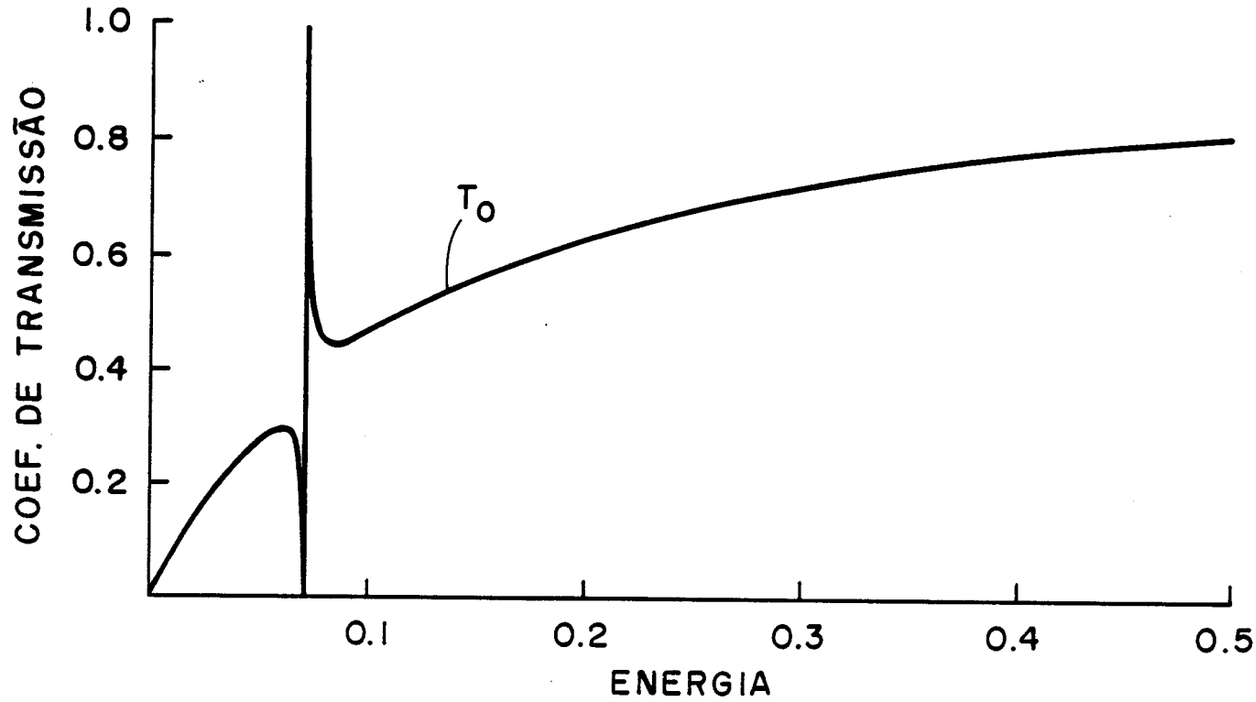


Figura (2): Coeficiente de transmissão, T_o, para $\lambda = 0.03$, $\hbar\omega = 0.2$ e $\mu = -0.5$.

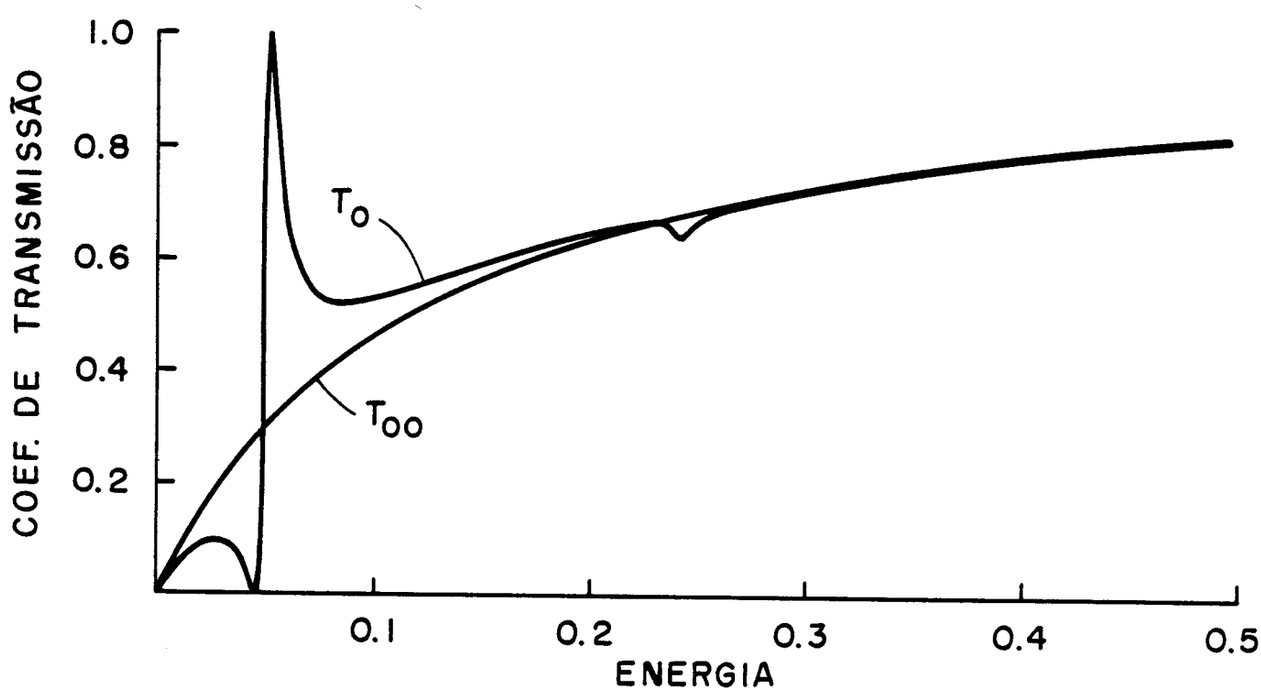


Figura (3a): Coeficiente de transmissão elástico, T_0, para $\lambda = 0.09$, $\hbar\omega = 0.2$ e $\mu = -0.5$.

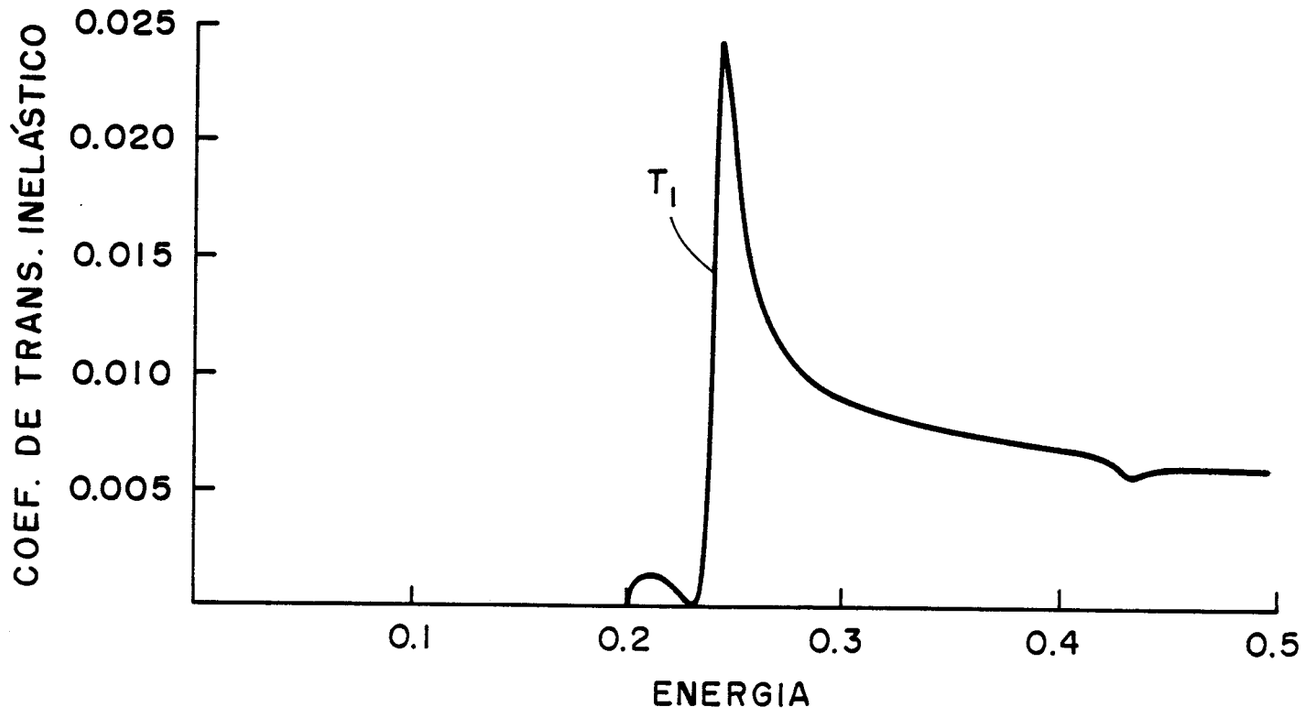


Figura (3b): Coeficiente de transmissão inelástico, T_1, associado a um quantum. Mesmos parâmetros de figura (3a).

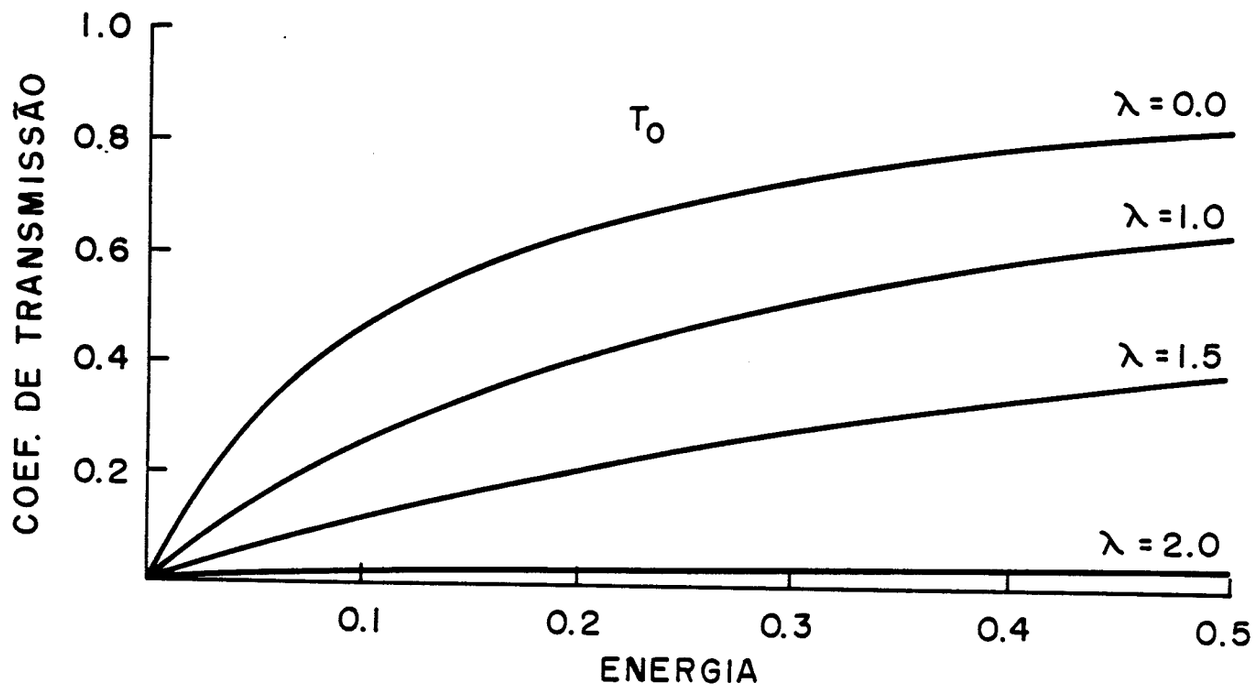


Figura (4): Coeficiente de transmissão elástico, T_0, para vários valores de λ com $\hbar\omega = 10$ e $\mu = -0.5$.

podem ser justificadas pela simples associação com a abertura de novos canais inelásticos, como foi feito no caso repulsivo. Nos gráficos dos coeficientes transmissão que representam os processos inelásticos valem as mesmas considerações anteriores pois os mesmos exibem estruturas em energias que estão abaixo do limiar do processo imediatamente superior, o que também não era verificado no caso $\mu > 0$. A origem destas estruturas, como já dissemos, está diretamente ligada a ocorrência de processos ressonantes devido a existência de estados ligados quasi–estacionários no centro espalhador

A principal característica das estruturas presentes nos gráficos dos coeficientes de transmissão, para o caso atrativo, é o fato das mesmas possuirem uma forma altamente assimétrica variando abruptamente em torno de uma dada energia. Para entendermos a origem física dessas formas tão peculiares, é necessário analisarmos a expressão que descreve o coeficiente de transmissão. Vejamos, por exemplo, o caso elástico. De (II.28) com m = 0, temos

$$T_o = |a_o|^2 \tag{II.36}$$

com o auxílio de (II.29) e (II.32) podemos escrever

$$T_0 = \left| \frac{ik_0 b}{-\mu + ik_0 b - \dfrac{\lambda^2}{-\mu + ik_1 b - \lambda\sqrt{2}R_2}} \right|^2 \tag{II.37}$$

A expressão (II.37) pode ser ainda escrita[12] como

$$T_0 = \left| a_{00} + \frac{\lambda}{-\mu + ik_0 b} a_1 \right|^2 \tag{II.38}$$

[12]O desenvolvimento é feito no apêndice B.

onde

$$a_{00} = \frac{i\,k_0 b}{-\mu + i k_0 b} \tag{II.39}$$

é a amplitude de transmissão elástica com $\lambda = 0$. A expressão (II.38) nos diz que o coeficiente T_o depende do quadrado da soma das amplitudes do processo elástico com $\lambda = 0$, a_{oo}, e dos demais processos (note que a_1, com o auxílio de (II.30), pode ser escrito em função de a_o, a_1 e a_2 e a_2 em função de a_1, a_2 e a_3 e assim sucessivamente), ou seja, as amplitudes somam–se coerentemente no cálculo de T_o. Da mecânica quântica, sabemos que a soma coerente de amplitudes, dá origem a fenômenos de interferência entre as várias componentes. Para energias não ressonantes, os efeitos de interferência simplesmente renormalizam o coeficiente de transmissão elástico, calculado com $\lambda = 0$, como pode ser visto observando–se a figura(4). Entretanto, em energias incidentes que coincidem com a energia de um particular estado quasi–estacionário, os efeitos de interferência podem produzir drásticas alterações no coeficiente de transmissão pois, como veremos, ao cruzar a energia ressonante as amplitudes mudam de sinais de maneira que a interferência é destrutiva abaixo e construtiva acima da energia ressonante, ou vice–versa. Neste caso, para acoplamento, λ, pequenos, podemos fazer $a_j = 0$, para $j > j_{ress} + 1$, nas vizinhanças da ressonância, pois tais amplitudes são muito pequenas nesta região. No caso específico dos gráficos das figuras (2) e (3a), onde escolhemos os parâmetros de modo a haver um único estado ligado com energia negativa, podemos notar, a partir do diagrama de níveis da seção 2–A e lembrando que inicialmente temos o oscilador no estado fundamental, que o nível ressonante corresponde àquele no qual o elétron está ligado e o oscilador no 1º estado excitado. Devemos pois esperar que a amplitude ressonante seja a_1 e que possua uma forma do tipo Breit–Wigner. De fato, a partir de (II.29) e (II.30) podemos escrever

$$a_1 = \frac{i\,\lambda k_0 b}{(-\mu + ik_1 b - \lambda\sqrt{2}R_2)(-\mu + ik_0 b) - \lambda^2} \tag{II.40}$$

onde consideramos $a_j = 0$ para $j \geq 3$ pois estamos com λ pequeno.

Como estamos analisando uma situação na qual o nível ressonante está abaixo do 1º limiar, $E_{ress} < \hbar\omega$ temos nesta região

$$\begin{aligned} ik_1 &\to -\kappa_1 \\ ik_2 &\to -\kappa_2 \end{aligned} \tag{II.41}$$

com k_n e κ_n dados, respectivamente, por (II.11) e (A.2). Devemos esperar que para um particular $E = E_1'$, tenhamos

$$(-\mu - \kappa_1 b - \lambda\sqrt{2}R_2)\Big|_{E = E_1'} \approx 0 \tag{II.42}$$

é importante notar que $E_1' < E_1$ onde E_1 é a energia do estado ligado, com $\lambda = 0$, no qual o oscilador está no 1º estado excitado. Nas vizinhanças do nível ressonante podemos fazer

$$(-\mu - \kappa_1 b - \lambda\sqrt{2}R_2) \simeq \alpha(E_1')(E - E_1') + \ldots \tag{II.43}$$

com

$$\alpha(E_1') = +\sqrt{\frac{mb^2}{2\hbar^2}}\left[\frac{1}{\sqrt{(\hbar\omega - E_1')}} + \frac{2\lambda^2}{(\mu + \kappa_2 b)^2}\frac{1}{\sqrt{(2\hbar\omega - E_1')}}\right] \tag{II.44}$$

substituindo (II.43) em (II.40) obtemos

$$a_1 = \frac{i\lambda k_0 b/\beta(E_1')}{(E - E_1') - \lambda^2/\beta(E_1')}, \quad \beta(E_1') = \alpha(E_1')(-\mu + ik_0 b) \tag{II.45}$$

ou melhor

$$a_1 = \frac{A}{(E - E_r) + i\Gamma/2} \tag{II.46}$$

onde fizemos

$$-\frac{\lambda^2}{\beta(E_1')} = \Delta + i\Gamma/2$$

e

$$A = i\lambda k_0 b/\beta(E_1')$$

$$E_r = E_1' - \Delta \ , \quad \Delta = \frac{\lambda^2\mu}{\alpha(E_1')(\mu^2 + k_0^2 b^2)} \tag{II.47}$$

$$\Gamma = \frac{2\lambda^2 k_0 b}{\alpha(E_1')(\mu^2 + k_0^2 b^2)} \tag{II.48}$$

De (II.46), que possui a bem conhecida forma de Breit–Wigner, vemos que a_1 realmente descreve um nível ressonante. É importante enfatizarmos que E_r, dado em(II.47), é menor que E_1 (sendo igual para $\lambda << 1 \Longrightarrow \Delta \simeq 0$). Isto é verificado nos gráficos e pode ser entendido observando–se o gráfico da figura (2–A) que dá a variação da energia do mais baixo estado ligado, fundamental, como função de λ. Este gráfico nos diz que ao aumentarmos λ a energia do estado ligado fundamental decresce. Podemos pois pensar que os níveis de energia do diagrama da figura (3–A) são todos "puxados" para baixo, ao acoplarmos o sistema[13], o que faz com que $E_r < E_1$. O nível ressonante possui uma

[13]Isto confirma a nossa intuição de que o acoplamento deve minimizar a energia.

largura Γ, dada por (II.48), que se relaciona com o tempo de vida, τ, do estado através da relação de incerteza

$$\Gamma\tau \approx \hbar. \tag{II.49}$$

Na verdade, para escrevermos (II.49) é necessário definir $\Gamma(E)$ em uma dada energia. É comum escolher-se esta energia igual a E_r. De (II.48) e (II.49) vemos que para $\lambda \approx 0$ temos $\Gamma \approx 0$ de modo que $\tau \to \infty$. Isto nos mostra que, nas energias ressonantes, o sistema permanece um longo tempo na configuração ligada quasi-estacionária, antes de retornar a configuração inicial[14], e esse fato faz com que haja grandes alterações nos coeficientes de transmissão. Convém observarmos que, de acordo com as figuras (2) e (3a), um aumento de λ provoca um alargamento das estruturas. Isto de fato é confirmado pela expressão (II.48). A razão física para esse alargamento consiste no fato de que ao aumentarmos λ estamos, na verdade, aumentando o acoplamento entre os níveis discretos e o contínuo (ver diagrama no apêndice A) e isto faz com que τ diminua e consequentemente, devido a (II.49), Γ aumente.

É importante enfatizarmos o fato de que as estruturas ressonantes são altamente assimétricas em torno de $E = E_r$ pois, as amplitudes a_{oo} e a_1 se interferem destrutivamente abaixo de E_r e construtivamente acima. Isto ocorre pois as partes reais e imaginárias de a_{oo} e a_1 possuem sinais opostos, de modo a se cancelarem, para $E < E_r$ e sinais iguais para $E > E_r$ como pode ser facilmente visto de (II.39) e (II.46), considerando-se $E - E_r >> \Gamma$ para $\lambda \approx 0$.

Para o caso inelástico, correspondente à figura (3b), podemos fazer uma análise semelhante à anterior identificando sempre um nível ressonante e um não ressonante que se interferem. No apêndice B é desenvolvida uma expressão análoga a (II.38), para T_1,

[14]O sistema pode eventualmente, se $E > \hbar\omega$, voltar para uma configuração que corresponda a um processo inelástico.

bem como ademonstração de que a_2 é do tipo Breit–Wigner nas vizinhaças da 2ª ressonância.

Na análise dos gráficos referente ao caso atrativo não temos feito menção alguma acerca da condição de unitariedade, que dá origem ao mecanismo de "feedback" a que nos referimos no caso repulsivo. A razão é que, em tais gráficos, estamos utilizando parâmetros de acoplamento, λ, pequenos de modo que as amplitudes dos processos inelásticos são bastante pequenas. Mesmo assim, ainda podemos notar uma pequena manifestação de tal mecanismo através do qual a ressonância no coeficiente inelástico, figura(3b), produz um decréscimo, ainda que pequeno, no coeficiente elástico, figura (3a)

CAPÍTULO III

INFLUÊNCIA DO ACOPLAMENTO LOCAL IMPUREZA–FÔNONS NO ESPALHAMENTO DE ÉXCITONS EM SÓLIDOS.

Capítulo III.

Neste capítulo, pretendemos estudar a influência das distorções, criadas pela presença da excitação nas vizinhanças da impureza, no comportamento da seção de choque de espalhamento de um éxciton de Frenkel em um sólido de simetria cúbica simples. A partir de um modelo de ligações fortes (tight–binding), frequentemente utilizado na descrição de transferência e/ou espalhamento de excitações em matéria condensada[17,18], propõe–se um modelo exatamente solúvel (uma generalização do modelo de Koster–Slater[19-21]) no qual o sítio da impureza no sólido hospedeiro se encontra linearmente acoplado a uma coordenada Harmônica. Convém salientarmos que o nosso modelo é bastante simples e não tem a pretensão de ser realista. Entretanto, é exatamente solúvel e nos proporciona, ao menos qualitativamente, um ponto de partida no entendimento dos vários possíveis processos envolvidos no espalhamento ressonante em sistemas reais.

Na próxima seção faremos uma breve revisão da teoria dos éxcitons tratando essencialmente, dentro aproximação de ligação forte (tight–binding), os chamados éxcitons de Frenkel. Nas seções subseqüentes trataremos o problema do espalhamento dos éxcitons por impurezas acopladas a um único modo vibracional

1. ÉXCITONS

O conceito de éxcitons, como "partículas" de excitação em sólidos, foi pioneiramente introduzido por J. Frenkel, em 1931. No trabalho de Frenkel, e nos demais que se sucederam a ele,[22,23] podemos constatar que tal conceito se origina exatamente no problema da absorção de luz por sólidos. Vejamos agora, qualitativamente, como o conceito de éxciton surge no contexto da absorção.

Quando um sólido absorve radiação eletromagnética podemos dizer, dentre outras coisas, que algum tipo de excitação eletrônica ocorre, dependendo da frequência da

radiação. Há dois casos nos quais podemos descrever a excitação de maneira relativamente simples. O primeiro caso é aquele no qual consideramos o sólido na aproximação de ligações fortes (tight–binding). Esta é uma boa aproximação para os cristais moleculares[14] onde cada molécula é representada por um sítio. Nesta aproximação, descreve–se o problema em termos das excitações individuais livres dos átomos ou moléculas do cristal. Entretanto, tais excitações individuais localizadas não constituem, devido a interação inter–molecular, autoestados do problema. Dessa forma, se um dado sítio é excitado, tal excitação pode migrar para um outro sítio. Como veremos, os verdadeiros autoestados são combinações lineares dessas excitações localizadas tendo cada uma um vetor de onda, $\vec{k}$, associado. De modo análogo as ondas elásticas, pode–se quantizar, através da introdução de operadores criação e destruição adequados, os quais obedecem certos regras de comutação, as ondas de excitação. Na situação que estamos considerando, as "partículas" de excitação são denominadas éxcitons de Frenkel ou moleculares. No segundo caso, o estado excitado do sólido é visto como sendo constituido por um elétron na banda de condução e o respectivo buraco na banda de valência. A descrição é então feita considerando–se o par elétron–buraco como um sistema ligado, tipo hidrogenóide, que pode migrar pelo cristal. Este modelo considera que a distância entre o elétron e o buraco é grande quando comparada com o parâmetro de rede. Também neste caso aos autoestados estão associados vetores de onda, $\vec{k}$, e as partículas de excitação são denominadas éxcitons de Wannier. Este caso se aplica a semicondutores e isolantes com alta constante dielétrica.

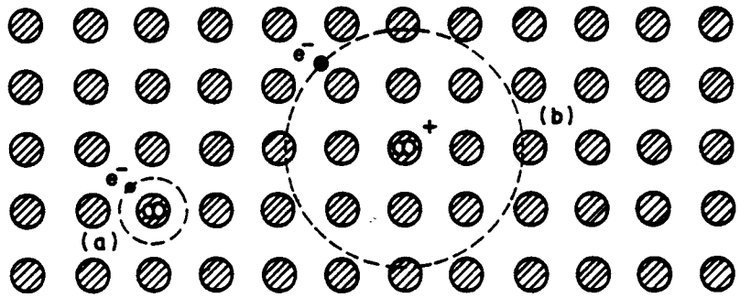
Os dois tipos de éxcitons descritos no parágrafo anterior parecem, a primeira vista, totalmente distintos. Entretanto, desde que uma excitação localizada (atômica ou molecular) pode ser descrita como um elétron ligado, compactamente, através da interação coulombiana, a um íon, podemos dizer que os éxcitons de Frenkel e Wannier[15]

---

[14]Cristais moleculares são sólidos compostos de moléculas (ou átomos de gases nobres) que se interagem, fracamente, via forças de Van der Waals.

[15]Os éxcitons de Wannier possuem grande raio de maneira que os estados ligados a impurezas não são localizados. Assim sendo, o tipo de efeito que pretendemos estudar certamente não é tão relevante quanto para o éxciton de Frenkel.

diferem somente nos seus "raios", ou seja, no grau de separação entre o elétron e o buraco[16]. Esquematicamente temos



(a) Éxciton de Frenkel

(b) Éxciton de Wannier

2. ÉXCITONS DE FRENKEL EM UMA REDE CÚBICA SIMPLES

Consideremos um sólido molecular hipotético, de simetria cúbica simples sujeito a condições de contorno periódicas, constituido por N átomos (moléculas) idênticos de um elétron dispostos um por sítio. Sendo "a" a distância de equilibrio entre os átomos (moléculas) da rede, assumiremos que a mesma se mantém inalterada quando um ou mais átomos se tornam excitados, ou seja, consideraremos a rede estática. Por conveniência, definiremos como nula a energia do estado fundamental, que corresponde a situação na qual todos os átomos (moléculas) não se encontram excitados, do sólido. A cada sítio, n, da rede associaremos um vetor $\vec{r}_n$ definido por

$$\vec{r}_n = n_x a\hat{i} + n_y a\hat{j} + n_z a\hat{k} \qquad \text{(III.1)}$$

Estamos interessados em estudar os estados excitados do sólido. No tipo de sólido que estamos considerando, os orbitais dos vários sítios possuem um "overlap" muito pequeno. Dessa forma, podemos descrever os estados excitados do sólido na aproximação

[16]No caso dos éxcitons de Frenkel o termo "buraco" é simplesmente uma maneira de se referir ao orbital vacante do qual o életron saiu.

"tight–binding", ou seja, os estados excitados podem ser pensados como sendo constituidos pelas excitações atômicas (moleculares) dos vários sítios. Entretanto, tais excitações, devido ao acoplamento entre os sítios, não permanecem localizadas nos vários sítios e sim migram de um sítio para outro. O hamiltoniano que descreve o estado excitado do sólido, considerando–se somente o acoplamento entre os vizinhos mais próximos, pode ser escrita como

$$H_{ex} = \sum_{n_x n_y n_z} \Big[E_0 B^{\dagger}_{\substack{n_x \\ n_y \\ n_z}} B_{\substack{n_x \\ n_y \\ n_z}} - \frac{W}{2} \Big[B^{\dagger}_{\substack{n_x+1 \\ n_y \\ n_z}} B_{\substack{n_x \\ n_y \\ n_z}} + B^{\dagger}_{\substack{n_x-1 \\ n_y \\ n_z}} B_{\substack{n_x \\ n_y \\ n_z}} + B^{\dagger}_{\substack{n_x \\ n_y+1 \\ n_z}} B_{\substack{n_x \\ n_y \\ n_z}} + B^{\dagger}_{\substack{n_x \\ n_y-1 \\ n_z}} B_{\substack{n_x \\ n_y \\ n_z}} +$$

$$+ B^{\dagger}_{\substack{n_x \\ n_y \\ n_z+1}} B^{\dagger}_{\substack{n_x \\ n_y \\ n_z}} + B^{\dagger}_{\substack{n_x \\ n_y \\ n_z-1}} B_{\substack{n_x \\ n_y \\ n_z}} \Big] \Big] \qquad \text{(III.2)}$$

onde o operador $B^{\dagger}_{n_x n_y n_z}$ cria um estado excitado[17] no átomo (molécula) situada em (n_x, n_y, n_z) e $B_{n_x n_y n_z}$ destrói este estado, E_0 é energia que a excitação teria na ausência do acoplamento entre os vizinhos e $-W/2$[18] é a intensidade do acoplamento entre os primeiros vizinhos que consideraremos constante e igual para todos os pares.

O hamiltoniano descrito em (III.2) não é diagonal. Para determinarmos as energias dos estados excitados do sólido, bem como os autoestados, devemos diagonalizar (III.2). Para tanto, basta definirmos um novo operador através da transformação unitária

$$A_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n_x n_y n_z} B_{\substack{n_x \\ n_y \\ n_z}} e^{-i\vec{k}.\vec{r}_n}$$

$$B_{\substack{n_x \\ n_y \\ n_z}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}} e^{i\vec{k}.\vec{r}_n} \qquad \text{(III.3)}$$

com

[17]Consideraremos, por simplicidade, somente o 1º estado excitado de cada molécula.

[18]Este acoplamento depende das interações de exchange e de Coulomb

$$\vec{k} = k_x\hat{i} + k_y\hat{j} + k_z\hat{k}\ ,\ \ k_x, k_y, k_z \in [-\pi/a, \pi/a] \tag{III.4}$$

e os operadores $A_{\vec{k}}$ obedecem a relação

$$A_{\vec{k}'}A^{\dagger}_{\vec{k}} - A^{\dagger}_{\vec{k}}A_{\vec{k}'} = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}$$

substituindo (III.3) em (III.2) e notando que

$$\sum_{n_x n_y n_z} e^{i(\vec{k}-\vec{k}').\vec{r}_n} = N\delta_{\vec{k}-\vec{k}',0}$$

obtemos

$$H_{ex} = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k})A^{\dagger}_{\vec{k}}A_{\vec{k}} \tag{III.5}$$

onde

$$E(\vec{k}) = E_0 - W(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \tag{III.6}$$

Podemos escrever (III.5) como

$$H_{ex} = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k})N_{\vec{k}} \tag{III.7}$$

onde $N_{\vec{k}} = A^{\dagger}_{\vec{k}}A^{\dagger}_{\vec{k}}$ é o número de ocupação do estado caracterizado pelo vetor $\vec{k}$. A partir de (III.7) podemos dizer que o sólido,no seu estado excitado, se comporta como se fosse composto por partículas de energia $E(\vec{k})$ que populam estados de Bloch aos quais estão associados vetores $\vec{k}$ que, como veremos, representam vetores de onda de ondas de

excitação. Essas partículas de excitação, que compoem o estado excitado do sólido, são denominadas éxcitons de Frenkel. Vemos pois que os operadores $A^{\dagger}_{\vec{k}}$ e $A_{\vec{k}}$ são, respectivamente, os operadores criação e destruição de éxcitons em estados $\vec{k}$.

Analisaremos a situação na qual temos somente um éxciton presente no sólido, ou seja, $\hat{N}_{\vec{k}} = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}$. Neste caso

$$H_{ex} = E(\vec{k}) \tag{III.8}$$

e correponde ao autoestado

$$|\psi\rangle = \hat{A}^{\dagger}_{\vec{k}}|0\rangle \tag{III.9}$$

onde $|0\rangle$ é o ket associado ao estado fundamental do sólido. Com o auxílio de (III.3) podemos escrever (III.9) como

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n_x n_y n_z} e^{i\vec{k}.\vec{r}_n} B^{\dagger}_{\substack{n_x\\n_y\\n_z}}|0\rangle$$

ou melhor

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n_x n_y n_z} e^{i\vec{k}.\vec{r}_n}|n_x n_y n_z\rangle \tag{III.10}$$

onde $|n_x n_y n_z\rangle$ é o ket associado ao estado excitado do sólido no qual o átomo(molécula) situado no sítio (n_x,n_y,n_z) está no seu 1º estado excitado.

De (III.10) vemos que os verdadeiros autoestados do sistema são, como já tínhamos mencionado, combinações lineares das excitações localizadas, $|n_x n_y n_z\rangle$, e as amplitudes de probabilidade, de se encontrar a excitação em um dado sítio, variam como uma onda plana com vetor de onda $\vec{k}$. Dessa forma, podemos dizer que (III.10)

representa uma onda de excitação igualmente distribuida por todo o sólido. A expressão (III.6) nos diz que as energias associadas aos autoestados formam bandas com um mínimo em $E_o - 3W$ e um máximo em $Eo + 3W$.

Para descrevermos excitações localizadas que migram pelo sólido, se faz necessário o uso de "pacotes de onda de excitação" que podem ser construidos, a partir de (III.10), através da superposição de vários autoestados. Entretanto, em problemas de espalhamento considera-se pacotes largos espacialmente de modo a possuirem uma pequena incerteza em $\vec{k}$. Excitações descritas por pacotes deste tipo podem, com boa aproximação, ser tratadas, sem a utilização de pacotes, utilizando-se diretamente a expressão (III.10)

Na próxima seção aplicaremos a teoria aqui desenvolvida ao problema do espalhamento de um éxciton de Frenkel por uma impureza puntual acoplada com fônons. Consideraremos somente situações na qual não se faz necessário a utilização de pacotes de onda na descrição do éxciton.

3. ESPALHAMENTO DE ÉXCITONS POR UMA IMPUREZA ACOPLADA COM FÔNONS

Analisemos agora a dinâmica de um éxciton em uma rede cúbica simples a qual possui uma impureza substitucioonal em um dado sítio, tomado convenientemente como origem do sistema. Consideraremos o caso, bastante interessante, em que a presença da excitação nas vizinhanças da impureza induz distorções locais ao redor da mesma. O nosso modelo assume que a impureza possui uma energia de sítio, V_o, diferente da energia E_o dos demais sítios. As distorções produzidas pela presença da excitação nas vizinhanças da impureza, devido à existência de estados ressonantes, serão levadas em conta adicionando-se um oscilador ao sítio impureza e acoplando-se, localmente, o seu movimento ao do éxciton. Por simplicidade, tal acoplamento será tomado como linear na coordenada harmônica. Para determinarmos os autoestados de espalhamento do nosso

sistema (sólido + impureza) devemos resolver a seguinte equação de Schrodinger

$$\left\{H_{ex} + \hbar\omega a_0^\dagger a_0 + \left[V_0 + \frac{\lambda\hbar^2}{mb^2}(a_0^\dagger + a_0)\delta_{\substack{n_x' 0\\ n_y\\ n_z}}\right]\right\}|\psi> = E|\psi> \qquad \text{(III.11)}$$

onde H_{ex} é definido por (III.8), λ é um parâmetro adimensional que representa a intensidade do acoplamento éxciton–fônon, b uma constante com unidade de comprimento e o termo $\hbar\omega a_0^\dagger a_0$ representa um oscilador na origem cuja energia do estado fundamental foi definida como nula. Podemos reescrever (III.11) na forma

$$(H_{ex} + \hbar\omega a_0^\dagger a_0 - E)\ |\psi> = -V|\psi> \qquad \text{(III.12)}$$

com o potencial espalhador sendo

$$V = V_0 + \frac{\hbar^2}{mb^2}\lambda(a_0^\dagger + a_0)\delta_{\substack{n_x' 0\\ n_y\\ n_z}} \qquad \text{(III.13)}$$

Da teoria de espalhamento em sólidos[24,25] sabemos que a solução, $|\psi^{(+)}>$, de (III.12) é dada pela equação de Lippman–Schwinger

$$|\psi^{(+)}> = |\psi^{(+)}> + G_0^{(+)}V|\psi^{(+)}> \qquad \text{(III.14)}$$

onde $|\psi^{(0)}>$ é solução de (III.12) com $V = 0$ e $G^{(+)}$ é o operador de Green retardado e satisfaz

$$[E - \hbar\omega a_0^\dagger a_0 5) + i\epsilon]G_0^{(+)} = \mathbb{1} \qquad \text{(III.15)}$$

Os autoestados $|\psi^{(o)}>$ são obtidos notando–se que se $V = 0$, a hamiltoniana é separável nas coordenadas harmônica e excitônica. Assim sendo, os autoestados e as autoenergias

do problema são, respectivamente, o produto (direto) dos autoestados e a soma das autoenergias harmônica e excitônica. Portanto, utilizando resultados da seção anterior, temos

$$|\psi^{(0)}> = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n_x n_y n_z} e^{i\vec{k}_j \vec{r}_n} |n_x n_y n_z> |\phi_j> \tag{III.16}$$

com

$$E = E(\vec{k}_j) + j\hbar\omega \tag{III.17}$$

onde os estados $|\phi_j>$ são, na representação de coordenadas, essencialmente os polinômios de Hermite e

$$k_j^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E(\vec{k}_j) \tag{III.18}$$

em que $E(\vec{k}_j)$ é dado por (III.6). Na base $\{|\psi^{(0)}>\}$ podemos, a partir de (III.15), escrever $G_0^{(+)}$ como

$$G_0^{(+)} = \sum_{\substack{n'_x n'_y n'_z \\ n_x n_y n_z \\ j}} a^3 \int \frac{d^3k_j e^{i\vec{k}_j \cdot (\vec{r}_n - \vec{r}'_n)} |\phi_j> |n_x n_y n_z> <n'_x n'_y n'_z| <\phi_j|}{(2\pi)^3 [E - j\hbar\omega - E(\vec{k}_j) + i\epsilon]} \tag{III.19}$$

Estamos interessados na amplitude de $|\psi^{(+)}>$ em um dado sítio $|l_x l_y l_z>$ com o oscilador em um particular estado $|\phi_m>$. Portanto, devemos projetar (III.14) em $|l_x l_y l_z>$ e $|\phi_m>$. A partir de (III.14), (III.16) e (III.19) e supondo que o oscilador está inicialmente no estado fundamental (Temperatura = 0), obtemos

$$<\phi_m|<l|\psi^{(+)}> = \frac{e^{i\vec{k}_0.\vec{r}_l}}{\sqrt{N}}\delta_{m,o} + \int \frac{e^{i\vec{k}'_m.\vec{r}_l}\, d^3k'_m}{(2\pi)^3[E - m\hbar\omega - E(\vec{k}'_m) + i\epsilon]} .$$

$$. <\phi_m|[V_0 + \frac{\hbar^2\lambda}{mb^2}(a_0^\dagger + a_0)]<0|\psi^{(+)}> , \qquad \vec{k}'_m = a\vec{k}_m \tag{III.20}$$

ou

$$a_m(l) = \frac{e^{i\vec{k}_o.\vec{r}_l}}{\sqrt{N}}\delta_{m,o} + I_m(E,l)[V_o a_m + \frac{\hbar^2\lambda}{mb^2}(\sqrt{m+1}\, a_{m+1} + \sqrt{m}\, a_{m-1})] \tag{III.21}$$

onde

$$a_m(l) = <\phi_m|<l|\psi^{(+)}> \tag{III.22}$$

e

$$I_m(E,l) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{d^3k'\, e^{i\vec{k}'_m.\vec{r}_l}}{(E - m\hbar\omega - E(\vec{k}'_m) + i\epsilon} \tag{III.23}$$

A equação (III.21) nos diz que as amplitudes de $|\psi^{(+)}>$ dependem, como era de se esperar, do valor das mesmas calculadas na região do potencial espalhador, ou seja, no sítio da impureza. Para determinarmos os coeficientes a_m, os quais, como veremos , estão relacionados com a seção de choque diferencial de espalhamento, basta fazermos $l = 0$ ($l_x = 0, l_y = 0, l_z = 0$) em (III.21)

$$a_m = \frac{\delta_{m,o}}{\sqrt{N}} + I_m(E,0)[V_o a_m + \lambda(\sqrt{m+1}\, a_{m+1} + \sqrt{m}\, a_{m-1})] \tag{III.24}$$

A expressão (III.24) é uma relação de recorrência de três termos e pode ser resolvida procedendo–se de modo análogo ao que foi feito no capítulo II na resolução de (II.23).

Convém lembrarmos que (III.24) contém as integrais $I_m(E,0)$ as quais, a partir de uma transformação que envolve a função de Bessel de ordem zero[19], podem ser resolvidas numericamente como integrais simples ou mesmo serem calculadas, para grandes valores de E, utilizando–se uma expansão em série.

A grandeza relevante em um problema de espalhamento é amplitude de espalhamento pois esta nos permite determinar a seção de choque a qual nos possibilita avaliar quão eficaz é o espalhamento. A teoria do espalhamento em sólidos, bem mais complexa que a teoria de espalhamento convencional[2], devido a existência das bandas de energia, nos diz que a amplitude de espalhamento é definida a partir da forma assintótica de (III.21), no limite em que $l \to \infty$[20]. Devemos pois calcular a integral, $I_m(E,l)$, presente em (III.21) no limite requerido. A solução assintótica desta integral foi dada, pioneiramente, por Koster[20] e Lifshitz[26], em trabalhos independentes, para uma banda qualquer $E(\vec{k})$. A expressão assintótica de $I_m(E,l)$ para o caso da estrutura de banda da rede cúbica simples é dada por Callaway[24,27]. No apêndice D, faremos a dedução, para este caso, utilizando o método das fases estacionárias[28]. Segundo Callaway $I_m(E,l\to\infty)$, para a banda dada em (III.18), com $E_o = 3W$ por conveniência, é

$$I_m(E,l\to\infty) = -\frac{e^{i\vec{k}_{om}.\vec{r}_l}}{r_l}\cdot\frac{1}{2\pi W}\cdot$$

$$\cdot\left[\frac{\operatorname{sen}^2 k_{ox} + \operatorname{sen}^2 k_{oy} + \operatorname{sen}^2 k_{oz}}{\operatorname{sen}^2 k_{ox}\cos k_{oy}\cos k_{oz} + \operatorname{sen}^2 k_{oy}\cos k_{ox}\cos k_{oz} + \operatorname{sen}_2 k_{oz}\cos k_{ox}\cos k_{oy}}\right]^{1/2} \tag{III.25}$$

onde $\vec{k}_{om}$ é o vetor de onda que satisfaz (veja apêndice D) as condições

$$E - m\hbar\omega = E(\vec{k}_{om}) \quad e \quad [\vec{\nabla}E(\vec{k}'_m)]\Big|_{\vec{k}'_m=\vec{k}_{om}} // \vec{r}_l \tag{III.26}$$

[19]Esta transformação é feita no apêndice C

[20]Usaremos $l \to \infty$ para representar $|\vec{r}_l| \to \infty$

substituindo (III.25) em (III.21), obtemos a forma assintótica dos coeficientes $a_m(l\to\infty)$

$$a_m(l\to\infty) = \frac{e^{i\vec{k}_0.\vec{r}_l}}{\sqrt{N}}\,\delta_{m,o} + \frac{e^{i\vec{k}_{om}.\vec{r}_l}}{r_l}\,\frac{1}{2\pi W}\,F(\vec{k}_{om}).$$

$$.[-V_o a_m - \lambda(\sqrt{m+1}\,a_{m+1} + \sqrt{m}\,a_{m-1})] \qquad \text{(III.27)}$$

com

$$F(\vec{k}_{om}) = \left[\frac{\operatorname{sen}^2 k_{ox} + \operatorname{sen}^2 k_{oy} + \operatorname{sen}^2 k_{oz}}{\operatorname{sen}^2 k_{ox}\cos k_{oy}\cos k_{oz} + \operatorname{sen}^2 k_{om}\cos k_{ox}\cos k_{oz} + \operatorname{sen}^2 k_o \cos k_{ox}\cos k_{oy}}\right]^{0.5} \qquad \text{(III.28)}$$

A expressão (III.27), juntamente com as condições dadas em (III.26), nos diz que o vetor de onda da onda espalhada não é necessariamente paralelo à direção observada, $\vec{r}_l$, podendo até mesmo ser tal que $\vec{k}_m.\vec{r}_l < 0$. No caso em que $\vec{k}_{om}.\vec{r}_l < 0$ temos, a primeira vista, uma situação não física na qual as ondas espalhadas são convergentes. A questão da causalidade no problema de espalhamento em sólidos é rigorosamente discutida, a partir do desenvolvimento da teoria com a utilização de pacotes de onda, por Preziosi[29]. Neste trabalho, Preziosi ressalta o fato de que o vetor de onda, que no nosso caso é $\vec{k}_{om}$, ao contrário do que se tem no espalhamento usual, não é proporcional à velocidade (de grupo) de maneira que nem sempre $\vec{v}(\vec{k}_{om}).\vec{r}_l > 0$ implica em $\vec{k}_{om}.\vec{r}_l > 0$. Assim sendo, $\vec{k}_{om}.\vec{r}_l > 0$ e $\vec{k}_{om}.\vec{r}_l < 0$ não significam, de modo algum, ondas espalhadas divergentes e convergentes, respectivamente. O que realmente nos garante soluções fisicamente aceitaveis, ondas espalhadas divergentes, é o termo $+i\epsilon$ ($\epsilon > 0$) que é introduzido no denominador da função Green. Esse termo faz com que, no limite $\vec{r}_l \to \infty$, tenhamos a condição $\hat{r}_l = \hat{v}(\vec{k}_{om})$. Segundo Preziosi, uma maneira simples de se ver porque devemos ter $\hat{r} = \hat{v}(\vec{k}_{om})$ é a seguinte: "Uma partícula pode chegar a um ponto muito distante, $\vec{r}_l$, somente se ela tiver uma velocidade que aponta para $\vec{r}_l$".

Em sólidos, os processos de transferência de energia envolvem baixas energias pois, em geral, as excitações são produzidas no fundo da banda. Assim sendo, estaremos interessados, neste trabalho, em processos nos quais $|\vec{k}_{om}| \approx 0$. Neste limite, podemos determinar facilmente $\vec{k}_{om}$. Expandindo-se $E(\vec{k}_{om})$, em torno da origem, até 2ª ordem e utilizando (III.26) obtemos

$$k_{om} = \sqrt{\frac{W}{2}(E - m\hbar\omega)} \quad \hat{r}_l = \hat{k}_{om} \tag{III.29}$$

Expandindo-se também o fator $F(\vec{k}_{om})$ até 2ª ordem temos

$$F(\vec{k}o_m) = 1 \tag{III.30}$$

Dessa forma, (III.27) pode ser escrita como

$$a_m(l\to\infty) = \frac{e^{i\vec{k}_o.\vec{r}_l}}{\sqrt{N}}\delta_{m,o} + \frac{e^{ik_{om}r_l}}{r_l}\frac{1}{2\pi W}\left[-V_o a_m - \lambda(\sqrt{m+1}\, a_{m+1} + \sqrt{m}\, a_{m-1})\right] \tag{III.31}$$

A expressão assintótica (III.31) descreve o processo de espalhamento do éxciton para sítios, $\vec{r}_l$, muito afastados do centro espalhador. Nela identificamos a porção não espalhada da onda incidente bem como a porção, esfericamente simétrico (onda s), a qual representa a onda espalhada. A expressão (III.31) desempenha papel análogo ao da expressão (II.24) a qual descreve o espalhamento eletrônico. Convém lembrarmos que (II.24) descreve um problema de espalhamento unidimensional convencional e (III.31) um problema tridimensional de espalhamento em sólidos. Entretanto, apesar de sua maior complexidade, o problema do espalhamento do éxciton, do ponto de vista físico, em muito se assemelha ao espalhamento do elétron tratado no capítulo II. Em ambos temos, por exemplo, a existência de processos ressonantes elásticos e inelásticos. Para a

equação (III.31) vale também as considerações, feitas no capítulo (II), acerca das componentes da onda espalhada com vetor de onda complexo, bem como os demais comentários que se seguiram à expressão (II.24) com a ressalva de que não mais faz sentido, no atual contexto, falar em ondas refletidas/transmitidas e coeficientes de reflexão/transmissão. Esses termos devem ser substituidos por, respectivamente, ondas espalhadas e seções de choque.

A partir da forma assintótica (III.31) podemos definir, de maneira análoga ao espalhamento usual, a seção de choque diferencial, $d\sigma/d\Omega$, como a razão entre o fluxo da onda espalhada, através de um elemento de área $ds = r_1^2 d\Omega$, e o fluxo da onda incidente. Dessa forma, obtemos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_m} = \left|\frac{1}{2\pi W}\left[-V_o a_m - \lambda(\sqrt{m+1}\, a_{m+1} + \sqrt{m}\, a_{m-1})\right]\right|^2 \frac{k_{om}}{k_o} \qquad \text{(III.32)}$$

que representa a seção de choque diferencial associada ao processo no qual o oscilador é deixado no m–ésimo estado excitado (m fônons são criados). Na obtenção de (III.32) desprezamos a contribuição, para o fluxo radial, do termo proveniente da onda incidente, por ser uma contribuição muito pequena, e consideramos, por simplicidade, $N = 1$.

Com o auxílio de (III.32) podemos estudar o comportamento da seção de choque diferencial, para vários valores dos parâmetros do sistema, como função de E. Na próxima seção discutiremos alguns resultados.

4. DISCUSSÕES

Observando os gráficos[21] a seguir os quais nos mostram o comportamento da seção de choque diferencial de espalhamento do éxciton, para os vários processos elásticos e inelásticos, no caso em que $V_o < 0$, notamos que os mesmos apresentam estruturas

[21]Na obtenção destes também fazemos $m = \hbar = 1$

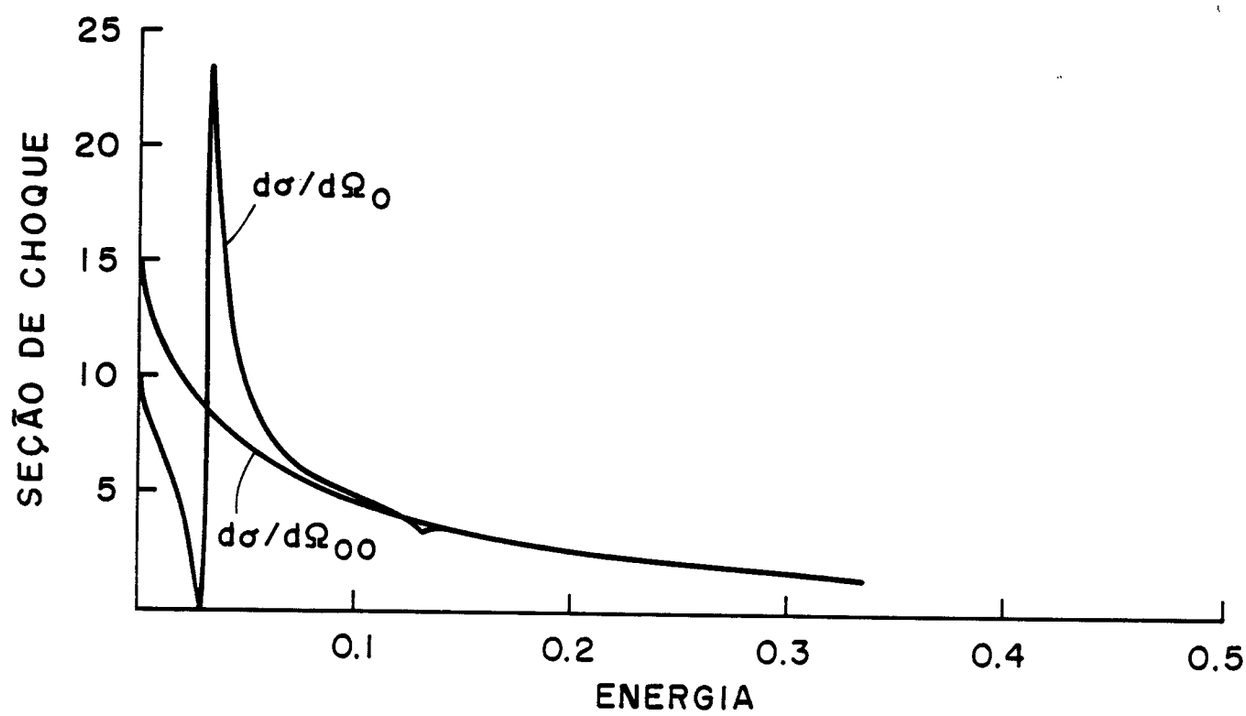


Figura (5a): Seção de Choque elástica, $d\sigma/d\Omega_0$, e elástica com acoplamento nulo, $d\sigma/d\Omega_{00}$, para $\lambda = 0.04$, $\hbar\omega = 0.1$ e $V_0 = -0.45$.

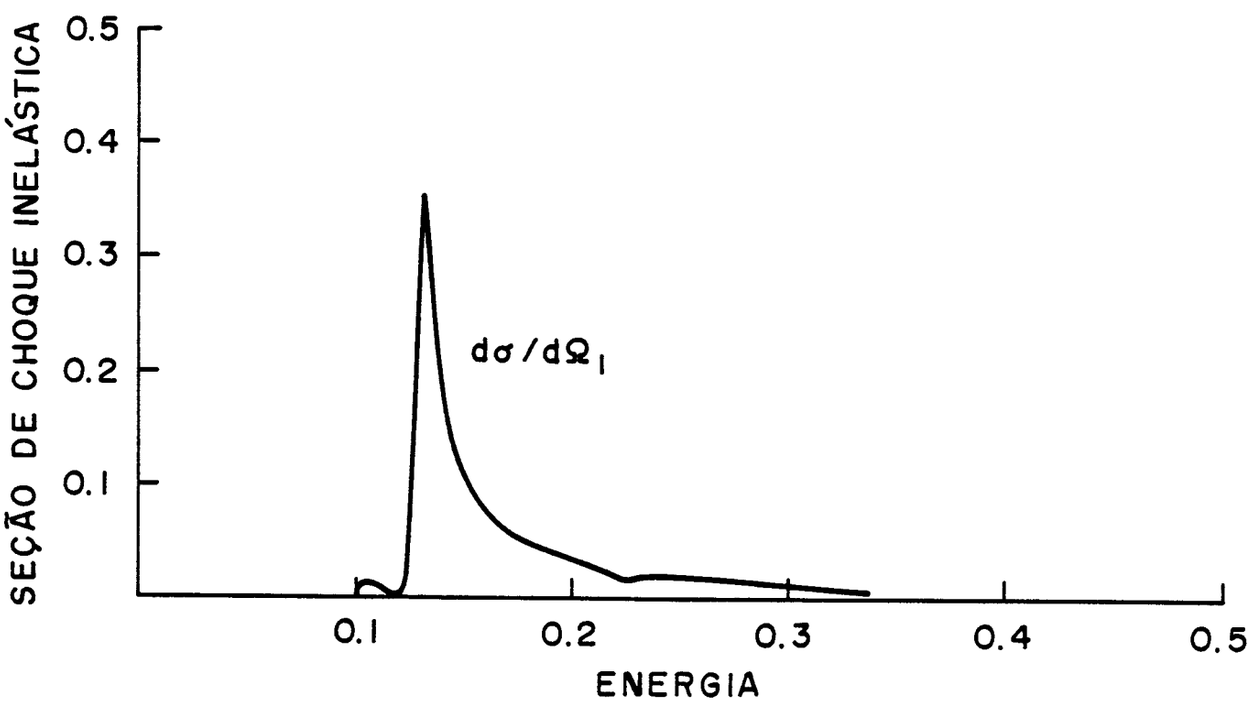


Figura (5b): Seção de choque inelástica, $d\sigma/d\Omega_1$, associada a perda de um quantum. Mesmos parâmetros que a figura (5a).

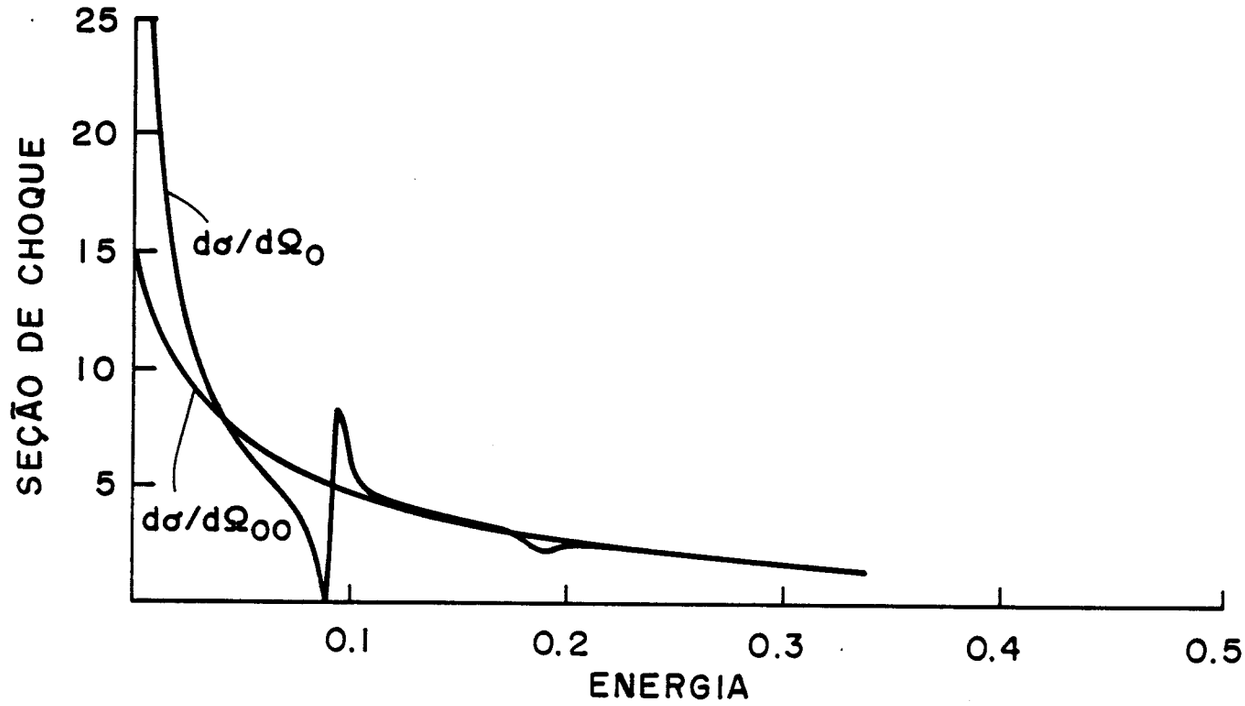


Figura (6a): Seção de choque elástica, $d\sigma/d\Omega_0$, e elástica com acoplamento nulo, $d\sigma/d\Omega_{00}$, para $\lambda = 0.08$, $\hbar\omega = 0.1$ e $\mu = -0.45$.

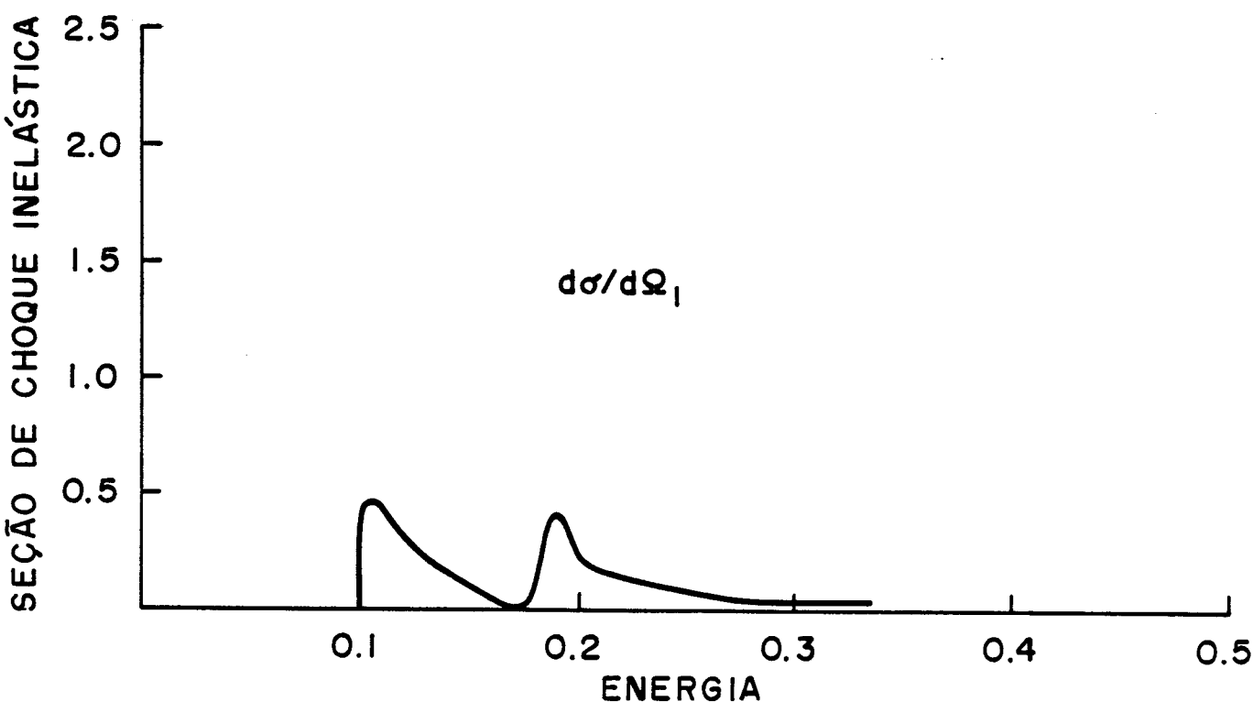


Figura (6b): Seção de choque inelástica, $d\sigma/d\Omega_1$. Mesmos parâmetros da figura (6a).

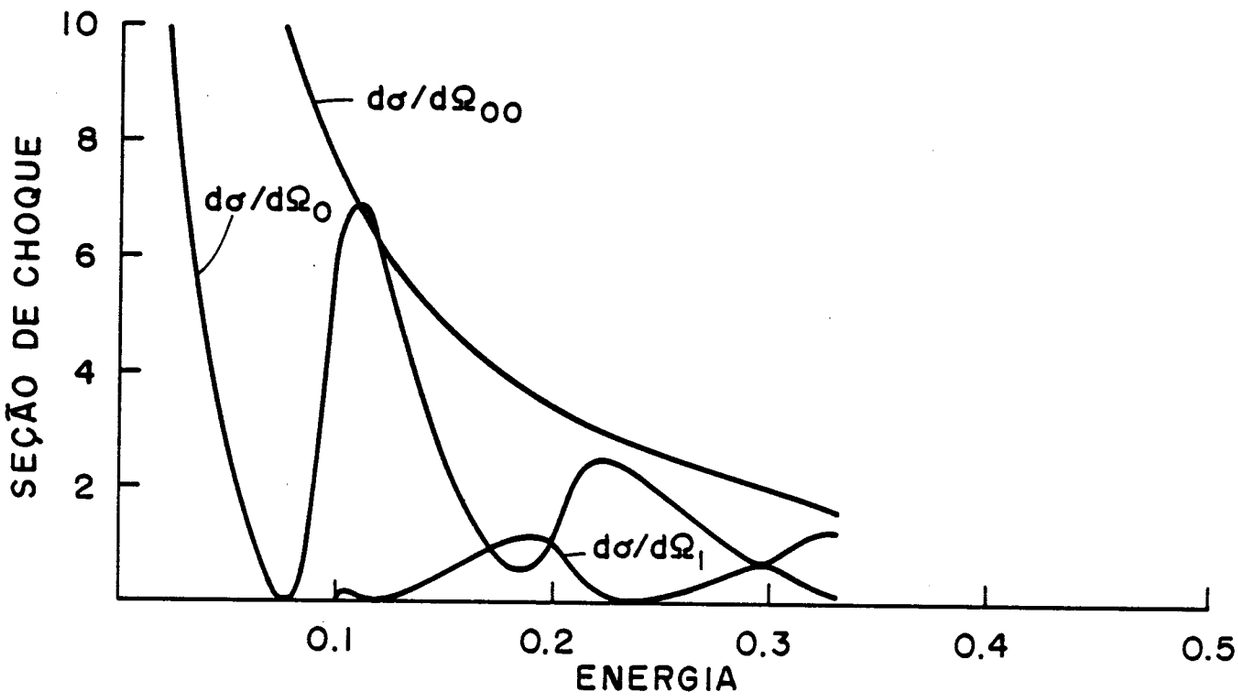


Figura (7): Seções de choque elástica, $d\sigma/d\Omega_0$, e inelástica, $d\sigma/d\Omega_1$, para $\lambda = 0.2$, $\hbar\omega = 0.1$ e $V_0 = -0.339$.

ressonantes[22] análogas as que aparecem nos coeficientes de transmissão associados ao problema eletrônico discutido no capítulo II. Na verdade, apesar de se tratar de um problema de espalhamento em um sólido tridimensional, ao contrário do problema eletrônico, unidimensional, de espalhamento usual, a física que descreve o espalhamento, em baixas energias, do éxciton e do elétron é a mesma. Obviamente, como já foi dito, o problema do éxciton é mais complexo. Assim sendo, as estruturas que aparecem nos gráficos da seção de choque elástica, figura (5a), e inelástica, figura (5b), devem também ser resultantes de fenômenos de interferência destrutiva e construtiva. Isto pode ser visto observando–se, por exemplo, a expressão de seção de choque elástica, obtida de

[22]Estas estruturas também se devem a existência de estados ligados quasi-estacionários no centro espalhador. Os estados ligados, bem como os ressonantes, para o problema do éxciton são discutidos no apêndice A seção 3–A.

(III.32)que é dada por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_o} = \left|\frac{1}{2\pi W}[V_o a_o + \lambda a_1]\right|^2 \tag{III.33}$$

com o auxílio de (III.24),podemos escrever

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_o} = \left|\frac{1}{2\pi W}\left[\frac{V_o}{1 - I_o V_o - \frac{\lambda^2 I_1 I_0}{1 - I_1 V_o - \lambda\sqrt{2}\, I_1 R_2}} + \lambda a_1\right]\right|^2$$

ou ainda[23] como

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_o} = \left|\frac{1}{2\pi W}[a_{oo} + (1 + a_{oo} I_o)\lambda a_1]\right|^2 \tag{III.34}$$

onde

$$a_{oo} = \frac{V_o}{1 - I_o V_o} \tag{III.35}$$

é a amplitude de espalhamento elástico para $\lambda = 0$. A partir de (III.34) vemos que a seção de choque elástica é o quadrado da soma da amplitude de espalhamento elástico, com $\lambda = 0$, e dos demais processos. Aqui valem todas as considerações feitas no problema eletrônico acerca de interferência, níveis ressonantes e etc. Para o caso das figuras (5a) e (5b), onde novamente escolhemos os parâmetros de modo a haver um único estado ligado com $E < 0$, para $\lambda = 0$, podemos mostrar, de modo análogo ao que foi feito para o elétron, que a_1 é do tipo Breit–Wigner para $E \simeq E_1'$, onde E_1' é uma energia próxima da energia do estado ligado, E_1, no qual o oscilador está no 1º estado, ou seja

$$a_1 = \frac{B}{(E - E_r) + i\Gamma/2} \tag{III.36}$$

[23]Estas contas são feitas no apêndice E

onde consideremos $a_j = 0$ para $j \geq 3$ e

$$B = \lambda I_1/\beta(E_1') \tag{III.37}$$

$$\beta(E_1') = \alpha(E_1')(1 - I_o V_o) \tag{III.38}$$

$$\alpha(E_1) = -V_o \frac{dI_1}{dE}\Big|_{E = E_1'} - \lambda\sqrt{2}\frac{dR}{dE}\Big|_{E = E_1'} \tag{III.39}$$

$$E_r = E_1' - \Delta \tag{III.40}$$

$$-\frac{\lambda^2\sqrt{2}I_0(E_1')I_1(E_1')}{\beta(E_1')} = \Delta + i\Gamma/2$$

As expressões acima são análogas às obtidas para o elétron, embora um tanto mais complexas. Entretanto, podemos tecer os mesmos comentários acerca de E_r, Δ, Γ e etc. feitos no problema do elétron pois temos uma situação análoga.

Convém ressaltarmos que em (III.34) as amplitudes se interferem de modo análogo às amplitudes em (II.38), ou seja, destrutivamente para $E < E_r$ e construtivamente para $E > E_r$.O gráfico do processo inelástico, figuras (5b), pode ser analisado de modo análogo ao caso elástico. No apêndice E, uma expressão análoga a (III.34) é obtida para $d\sigma/d\Omega_1$. Mostra–se também, para este caso, que a_2 é do tipo Breit–Wigner.

Os gráficos das figuras (6a) e (6b) são análogos aos das figuras (5a) e (5b), entretanto, são obtidos utilizando–se um parâmetro de acoplamento um pouco maior. O aumento de λ "puxa", devido a relaxação da rede, os níveis ressonantes para o fundo da banda de modo que o efeito de interferência observado em (5a) pode somente ser parcialmente visto, só a parte construtiva, em (6a). Podemos observar ainda o surgimento de uma nova estrutura ressonante que certamente corresponde a ressonância

com o nível quasi—estacionário ligado no qual o oscilador se encontra no 2º estado excitado. Se aumentarmos λ ainda mais, um novo autoestado ligado é criado abaixo do fundo da banda. Na figura (6b) podemos verificar que com aumento de λ a estrutura ressonante se alarga, em relação a figura(5b), e que a possibilidade de espalhamento inelástico aumenta. O gráfico da figura (7) nos mostra uma situação na qual escolhemos o valor de V_o de maneira que, para $\lambda = 0$, tenhamos um estado ligado om $E = 0$. Nestas circunstância, podemos utilizar um λ maior que os anteriores e mesmo assim termos somente um estado ligado abaixo da banda. Isto nos permite verificar o grande alargamento da estrutura ressonante, em função do aumento de λ, bem como o seu deslocamento para energias menores.

É importante enfatizarmos que não há, para seções de choque, em problemas tridimensionais, uma regra de soma bem definida, como no caso dos coeficientes de transmissão em uma dimensão, de maneira que o mecanismo de feedback para as seções de choque é bem menos evidente nestes problemas.

É importante assinalarmos que o tipo de estrutura ressonante que aparece nos coeficientes de transmissão e seções de choque, no caso de potenciais atrativos, e cuja origem física se fundamenta no fenômeno de interferência, entre uma amplitude ressonante e uma não ressonante, é uma característica comum a sistemas nos quais se tem um nível discreto acoplado a um contínuo, como no nosso caso (ver diagrama apendice A). No contexto da física nuclear, quando se estuda espalhamento de neutrons por núcleos, tais estruturas são há muito tempo conhecidas[30-32]. No espalhamento de neutrons por núcleos, o contínuo são os estados de espalhamento elástico no qual o neutron não "penetra" no núcleo e o nível discreto ressonante é aquele no qual o neutron "penetra" no núcleo formando um estado conposto com o mesmo. A seção de choque nestes casos pode ser escrita, para onda "s", como[33]

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \left| A_{pot} + A_{res} \right|^2 \qquad \text{(III.41)}$$

com

$$A_{pot} = e^{2ikR} - 1, \; R \rightarrow \text{raio do núcleo}$$

e

$$A_{res} = \frac{i\Gamma_o(E_s)}{(E - E_s) + i\Gamma_o(E_s)/2}$$

onde E_s é a energia ressonante e $\Gamma_o(E_s)$ é a largura da ressonância calculada em E_s. No limite $kR << 1$ e supondo que $E - E_s >> \Gamma_o(E_s)$ vê-se claramente que A_{pot} e A_{res} tem sinais opostos para $E < E_s$ e mesmo sinal para $E > E_s$. Dessa forma, espera-se que haja interferência destrutiva para $E < E_s$ e construtiva para $E > E_s$. Isto pode ser visto no gráfico dado por Blatt e Weisskopt

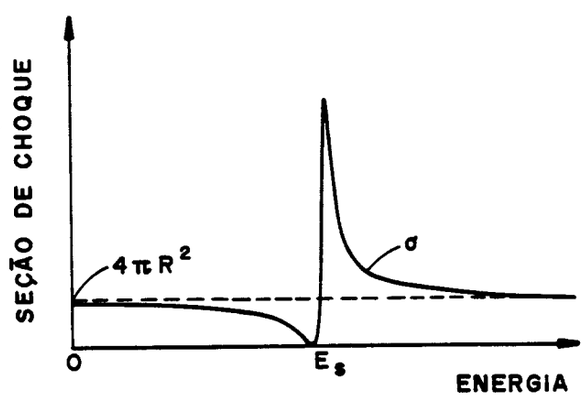


Figura (8): Seção de choque elástica para o espalhamento de neutrons (com $l = 0$) por núcleos.

A figura (9) nos mostra o comportamento de $d\sigma/d\Omega_o$ para $E = 0$ em função de V_o, com $V_o < 0$. Neste gráfico as estruturas são, aproximadamente, igualmente espaçadas e sua origem está relacionada ao "nascimento" de sucessivos estados ligados, com $E = 0$, com o aumento de V_o. Este comportamento peculiar é análogo ao que ocorre na seção de choque[34], para o potencial quadrado tridimensional, que é, para $E \simeq 0$, dada por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx [tg(a\sqrt{V_o})/a\sqrt{V_o} - 1]^2$$

onde "a" e a largura do poço e V_o sua profundidade. No potencial quadrado os sucessivos estados ligados, com $E = 0$, são estados do próprio potencial que surgem ao se aumentar V_o. Entretanto, no nosso caso, os estados ligados sucessívos, com $E = 0$, se originam devido ao acoplamento com os fônons, pois o sítio da impureza, sem acoplamento, só possui um único estado ligado, abaixo do fundo da banda.

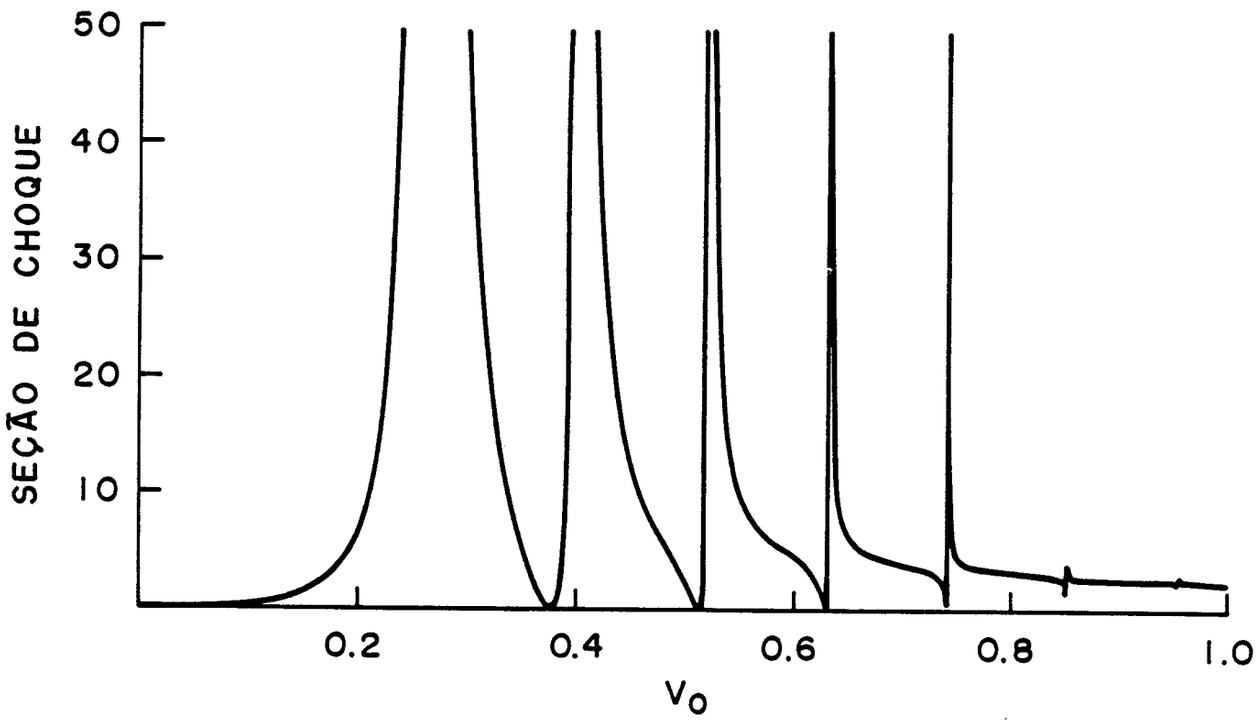


Figura (9): Variação da seção de choque como função de V_0 par $\lambda = 0.1$ e $\hbar\omega = 0.1$ com $E = 0$.

CONCLUSÃO

Dentre os vários efeitos observados no espalhamento inelástico/ressonante de partículas, tratado neste trabalho, podemos dizer que o mais interessante e peculiar é aquele associado ao fenômeno de interferência. Convém salientarmos que esse efeito, apesar de bastante conhecido no contexto da física nuclear, aparece aqui pela 1ª vez no contexto do espalhamento em sólidos. Como vimos, existe devido a esse efeito determinados valores de energia nos quais a partícula simplesmente não "vê" o centro espalhador, ou seja, $T_n = 1$ e $d\sigma/d\Omega_n = 0$. O fato do centro espalhador ficar transparente para alguns valores de energia e, sem dúvida, bastante interessante. Isto acarretaria, por exemplo no espalhamento de excitações por impurezas em sólidos, um livre caminho médio infinito.

Esperamos pois que este trabalho possa servir, de alguma maneira, como um ponto de partida no entendimento dos reais efeitos que ocorrem no espalhamento assistido por fônons ou, de modo geral, em problemas nos quais o centro espalhador está acoplado a modos vibracionais.

SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Em ambos os sistemas tratados neste trabalho, a partícula incidente jamais pode ficar ligada ao centro espalhador pois $<\phi_{lig}|\psi^{(+)}> = 0$. Assim sendo, um interessante trabalho que pode ser feito futuramente é a tentativa de se introduzir mecanismos de dissipação (banho de bosons) de modo a permitir que a partícula possa ficar ligada ao centro espalhador.

Para o problema unidimensional especificamente, pode–se tentar torná–lo mais realístico levando–se em conta a extensão, d, do potencial. Pode–se ainda calcular a corrente de tunelamento, a partir dos fluxos transmitidos, e observar como as ressonâncias se manifestam em tal corrente. No caso do espalhamento de excitações é interessante determinar–se como o livre caminho médio se modifica frente às ressonâncias pois, este é um dado importante em questões que envolvam migração de energia.

Apêndice A

Neste apêndice tratamos da determinação dos estados ligados dos problemas eletrônico, capítulo II, e excitônico, capítulo III. Tal interesse reside no fato de que, apesar de estarmos tratando de problemas de espalhamento, a existência de tais estados pode modificar drasticamente o comportamento dos coeficientes de transmissão e seções de choque pois os mesmos dão origem, como veremos, a estados ligados quasi–estacionários ($E > 0$ e $\lambda \neq 0$) os quais fazem com que haja possibilidade de ocorrência de espalhamento ressonante

1–A. ESTADOS LIGADOS DO MODELO DE HOPFIELD–BERATAN

A determinação dos estados ligados do sistema tratado no capítulo II já foi feita por Hopfield–Beratan. Entretanto, por uma questão didática, obteremos a mesma solução a partir dos resultados da seção 1, capítulo II. Para tanto, basta considerarmos o problema de estado ligado como um "problema de espalhamento" no qual, obviamente, não há onda incidente. Dessa forma, desprezando–se todos os termos oriundos do termo de onda incidente, obtemos a solução

$$\varphi_{l_g}(x,q) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n e^{-\kappa_n |x|} \phi_n(q) \tag{A.1}$$

onde

APÊNDICE A

$$\kappa_n = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(nh\omega - E)} \tag{A.2}$$

e os coeficientes b_n são dados pela relação de recorrência

$$b_n = \frac{1}{\kappa_n b}[\mu b_n - \lambda(\sqrt{n+1}\, b_{n+1} + \sqrt{n}\, b_{n-1})] \tag{A.3}$$

com $\mu < 0$.

Apesar de toda a aparente semelhança entre os dois problemas, espalhamento e estados ligados, os mesmos são bastantes distintos. Por exemplo, no espalhamento sabemos a energia, $E > 0$, do sistema e temos um fluxo incidente que define a normalização da função de onda de modo que a relação de recorrência, que lá aparece, é bem definida e sempre admite solução para uma dada energia dentro da banda. Por outro lado, no problema de estados ligados não se conhece, a priori, a energia, e a relação de recorrência, (A.3), que aqui aparece admite soluções somente para alguns valores discretos de energias, $E < 0$ ou $E > 0$, do sistema. Além disso, os coeficientes b_n não são normalizados.

Para resolvermos a relação (A.3) basta supor, como foi feito no capítulo II, que os coeficientes b_n são muito pequenos e podem ser desprezados a partir de um certo $n = N$. Assim sendo, podemos colocar (A.3) na forma tridiagonal

$$\begin{bmatrix} \kappa_0 b-\mu & \lambda\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & & 0 \\ \lambda\sqrt{1} & \kappa_1 b-\mu & \lambda\sqrt{2} & 0 & \dots & & 0 \\ 0 & \lambda\sqrt{2} & \kappa_2 b-\mu & \lambda\sqrt{3} & & & 0 \\ 0 & 0 & \lambda\sqrt{3} & \kappa_3 b-\mu & \dots & & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ & & & & & \ddots & \lambda\sqrt{N} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda\sqrt{N} & \kappa_N b-\mu \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} = [0] \tag{A.4}$$

A forma (A.4) é uma equação matricial do tipo

$$AX = 0 \tag{A.5}$$

onde A é uma matriz N x N e X é um vetor de N componentes. Sabemos que a equação (A.5) só admite soluções não triviais se detA = 0. Assim sendo, para determinarmos as autoenergias do sistema, basta procurarmos os zeros do determinante da matriz A como função da energia. Determinada as energias pode-se facilmente determinar os coeficientes b_n e consequentemente as autofunções. Entretanto, estaremos interessados somente nas autoenergias. Convém salientarmos o fato de que o problema só admite soluções,para $\lambda \neq 0$, com $E < 0$. Entretanto, para $\lambda = 0$ podemos ter estados ligados com $E > 0$ e $E < 0$. A expressão (A.4) abrange os dois casos bastando fazer $E = |E|$ para $E > 0$ e $E = -|E|$ para $E < 0$. Abaixo temos um gráfico ilustrativo de detA x E, para um dado conjunto de parâmetros, e também de E_1^o x λ, onde E_1^o é a energia do estado ligado de mais baixa energia (fundamental)

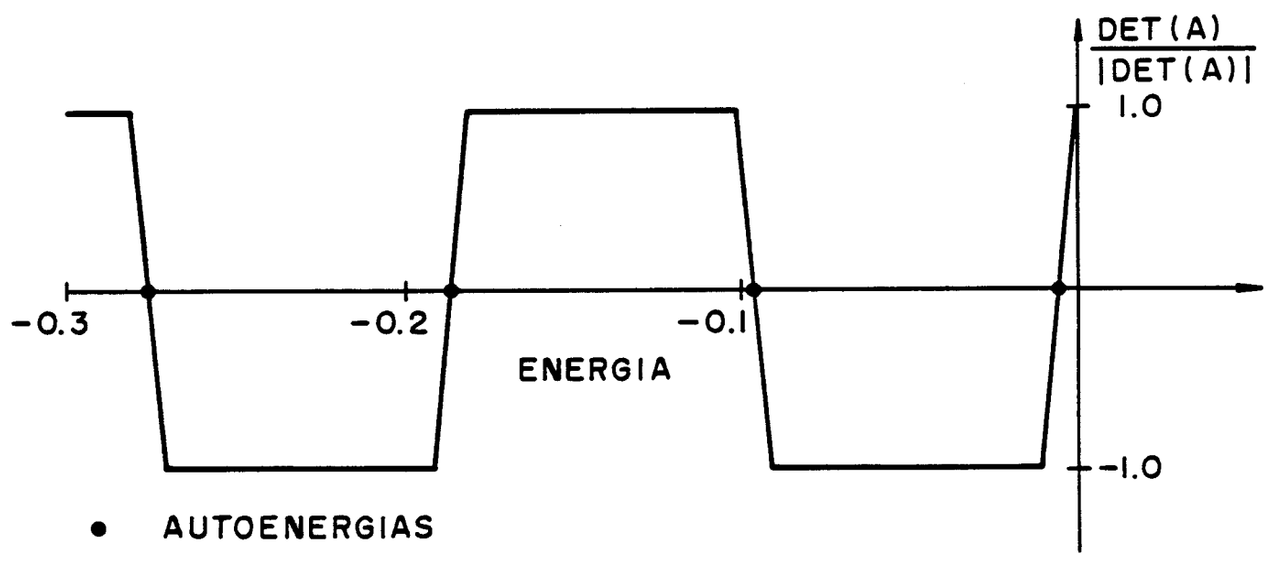


Figura (1–A): (DetA x E)/|DetA x E| par $\lambda = 0.1$, $\hbar\omega = 0.1$ e $\mu = -1.0$.

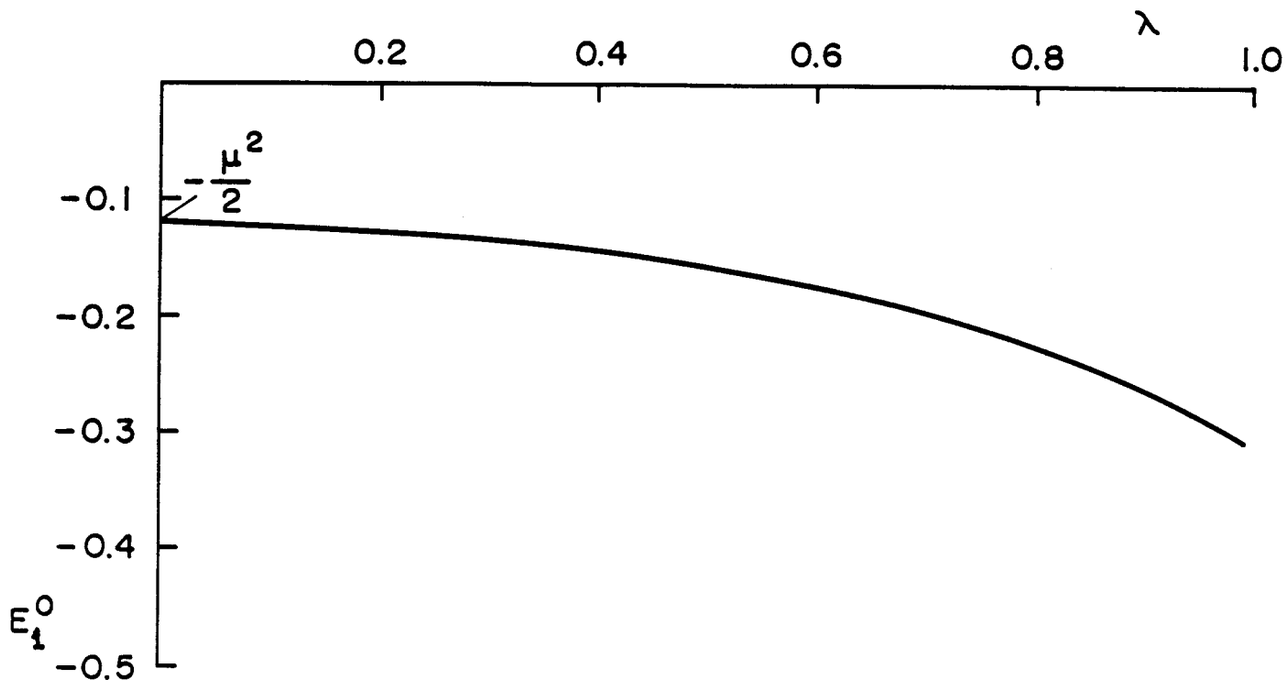


Figura (2–A): Variação da energia do estado ligado fundamental como função do parâmetro de acoplamento λ. Considera–se $\hbar\omega = 10$ e $\mu = -0.5$.

2–A. ESTADOS LIGADOS QUASI–ESTACIONÁRIOS (NÍVEIS RESSONANTES)

Como foi visto na seção anterior, o nosso sistema possui estados ligados com energia positiva ($E > 0$) para $\lambda > 0$ com $\mu < 0$. Para $\lambda = 0$, as energias dos estados ligados, positivas e negativas, são dadas por

$$E_{el} = \frac{m\mu^2}{2\hbar^2} + j\hbar\omega, \; j = 0, 1, 2, 3,... \qquad (A.6).$$

Existe também, para $E > 0$, os estados de espalhamento cujas energias, no limite $\lambda = 0$, são obtidas da expressão

$$E_{el} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + j\hbar\omega, \; j = 0, 1, 2, 3,... \qquad (A.7)$$

Das expressões (A.6) e (A.7) podemos notar que existem estados discretos, do espectro de estados ligados, os quais são degenerados com o contínuo formado pelas autoenergias do espalhamento. Isto fica mais evidente construindo–se um diagrama de níveis de energia para o sistema

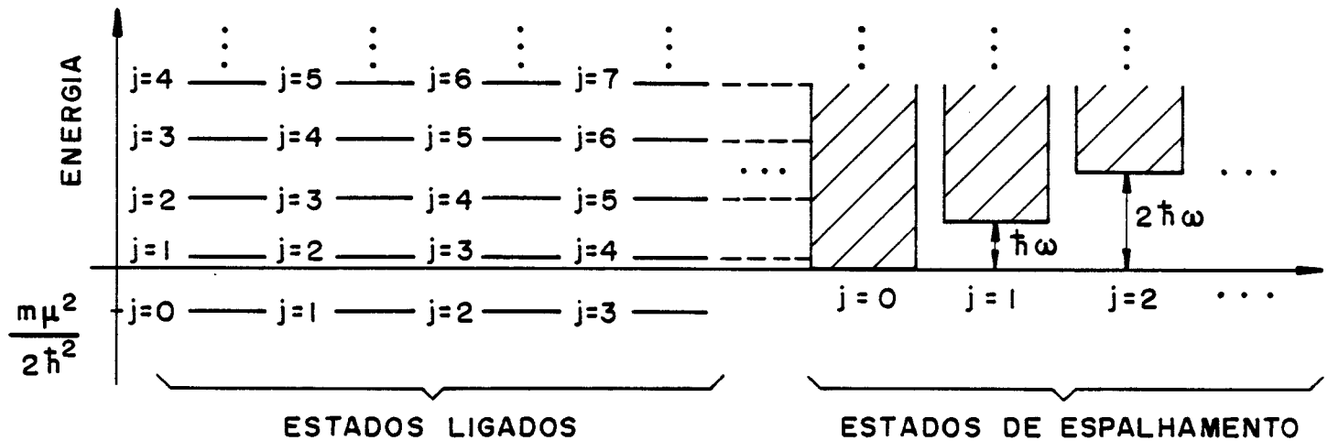


Figura (3–A): Diagrama de níveis de energia para o sistema (elétron + OH) com $\lambda = 0$. Considera–se as várias possibilidades para o estado inicial do OH.

A partir do diagrama da figura (3–A) fica evidente a existência de níveis discretos degenerados com o contínuo. Quando fazemos $\lambda \neq 0$ o diagrama acima deixa de representar, exatamente, os níveis do sistema. É bem sabido que um átomo de hélio, desprezando–se a interação elétron–életron, possui um diagrama de níveis de energia que também apresenta degenerescência entre um nível discreto e o contínuo e que o efeito da repulsão inter–eletrônica é induzir transições entre o discreto e o contínuo, ou vice–versa, fazendo com que tais níveis deixem de ser estacionários. Em particular,

podemos dizer que os níveis discretos se alargam adquirindo tempos de vida finitos tornando–se, dessa forma, estados denominados quasi–estacionários. Nos sistemas que estamos tratando, podemos pensar que o acoplamento λ desepenha papel análogo ao da repulsão elétron–elétron no átomo de hélio. Assim sendo, podemos considerar que, para acoplamentos λ pequenos, em analogia com o átomo de hélio, cada nível discreto do diagrama da figura (3–A), com $E > 0$, se torna um nível quasi–estacionário.

A importância da existência desses níveis quasi–estacionários reside no fato de que quando a particula incidente, possui uma energia tal que um desses estados quasi–estacionários pode ser constituido, drásticas alterações ocorrem nos coeficientes de transmissão. Dizemos então que nessas energias há espalhamento ressonante.

3–A. ESTADOS LIGADOS PARA O MODELO DO ÉXCITON ACOPLADO A UM MODO VIBRACIONAL

É bem sabido[35] que, ao contrário de sistemas unidimensionais e bidimensionais, a existência de estados ligados, em sólidos tridimensionais com impurezas puntuais, só é possível se a intensidade, $|V_o|$, do potencial da impureza for maior que um certo valor crítico, V_c. Sabe–se ainda que, supondo $|V_o| > V_c$, as autoenergias dos estados ligados situam–se abaixo do fundo da banda de energia ou acima do topo da mesma caso o potencial seja, respectivamente, atrativo ($V_o < 0$) ou repulsivo ($V_o > 0$.

Podemos resolver o problema de estados ligados do sistema excitônico de maneira análoga ao que foi feito na seção (1–A). A partir dos resultados do capítulo III, desprezando–se os termos de onda incidente, obtemos a seguinte relação de recorrência

$$b_n = - I_n(E,0)\,[V_o b_n + \lambda(\sqrt{n+1}\, b_{n+1} + \sqrt{n}\, b_{n-1})] \qquad (A.8)$$

onde

$$I_n(E,0) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{d^3k'_n}{[E - n\hbar\omega - E(\vec{k}'_n)]} \tag{A.9}$$

convém notarmos que em (A.9) não há a necessidade do termo $+i\epsilon$ no denominador pois, como $E - n\hbar\omega < 0$, para estados ligados a integral não possui polos. A forma assintótica, no limite $l\to\infty$ $(r_l\to\infty)$, dos coeficientes , b_n, os quais representam a amplitude do autoestado ligado, $|\varphi_{lig}>$, em um dado sítio $|l>$, pode ser obtida de maneira análoga ao que é feito o apêndice D, para o caso de espalhamento. Entretanto, o resultado obtido, como veremos, é inteiramente diferente pois os vetores de onda $\vec{k}_{on}$ só satisfarão a condição (D.2)

$$E - n\hbar\omega = E(\vec{k}_{on})$$

ou melhor

$$-|E - \hbar\omega| = E(\vec{k}_{on}) \tag{A.10}$$

caso $\vec{k}_{on} = i\vec{\gamma}_{on}$. Isto ocorre porque o lado direito de (A.10) somente pode assumir valores posítivos, contidos no intervalo [0,6W], de modo que (A.10) só pode ser satisfeita para $\vec{k}_{on}$ imaginários. Assim sendo, obtemos para b_n $(l\to\infty)$ a expressão

$$b_n(l\to\infty) = -\frac{1}{2\pi W}\frac{e^{-\gamma_{on}r_l}}{r_l}\cdot$$

$$\cdot\left[\frac{sh^2\gamma_{onx} + sh^2\gamma_{ony} + sh^2\gamma_{onz}}{sh^2\gamma_{onx}ch\gamma_{ony}ch\gamma_{onz} + sh\gamma_{ony}ch\gamma_{onx}ch\gamma_{onz} + sh^2\gamma_{onz}ch\gamma_{onx}ch\gamma_{ony}}\right]^2\cdot$$

$$\cdot\left[V_0 b_n + \frac{\hbar^2}{mb^2}\lambda(\sqrt{n+1}\, b_{n+1} + \sqrt{n}\, b_{n-1})\right]. \qquad (A.11)$$

A partir de (A.8) podemos determinar as autoenergias do sistema. Para tanto, basta escrevê–la na forma matricial

$$BX = 0$$

ou melhor

$$\begin{bmatrix} V_0+1/I_0 & \lambda\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & & 0 \\ \lambda\sqrt{1} & V_0+1/I_1 & \lambda\sqrt{2} & 0 & \dots & & 0 \\ 0 & \lambda\sqrt{2} & V_0+1/I_2 & \lambda\sqrt{3} & \dots & & 0 \\ 0 & 0 & \lambda\sqrt{3} & V_0+1/I_3 & \dots & & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda\sqrt{N} & V_0+1/I_N \end{bmatrix} x \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} = [0]$$

(A.12)

onde novamente fazemos uso de que os coeficientes, b_n, tendem a zero a partir de um certo número $n = N$, e procurar valores da energia, E, para os quais $\det B = 0$. Aqui valem as mesmas considerações feitas no caso unidimensional acerca da existência dos estados ligados com $E > 0$ e $E < 0$. A seguir temos o gráfico de E^o_{lig} x λ, onde E^o_{lig} é a energia do estado fundamental. O gráfico de detB x E é análogo ao da figura (1–A).

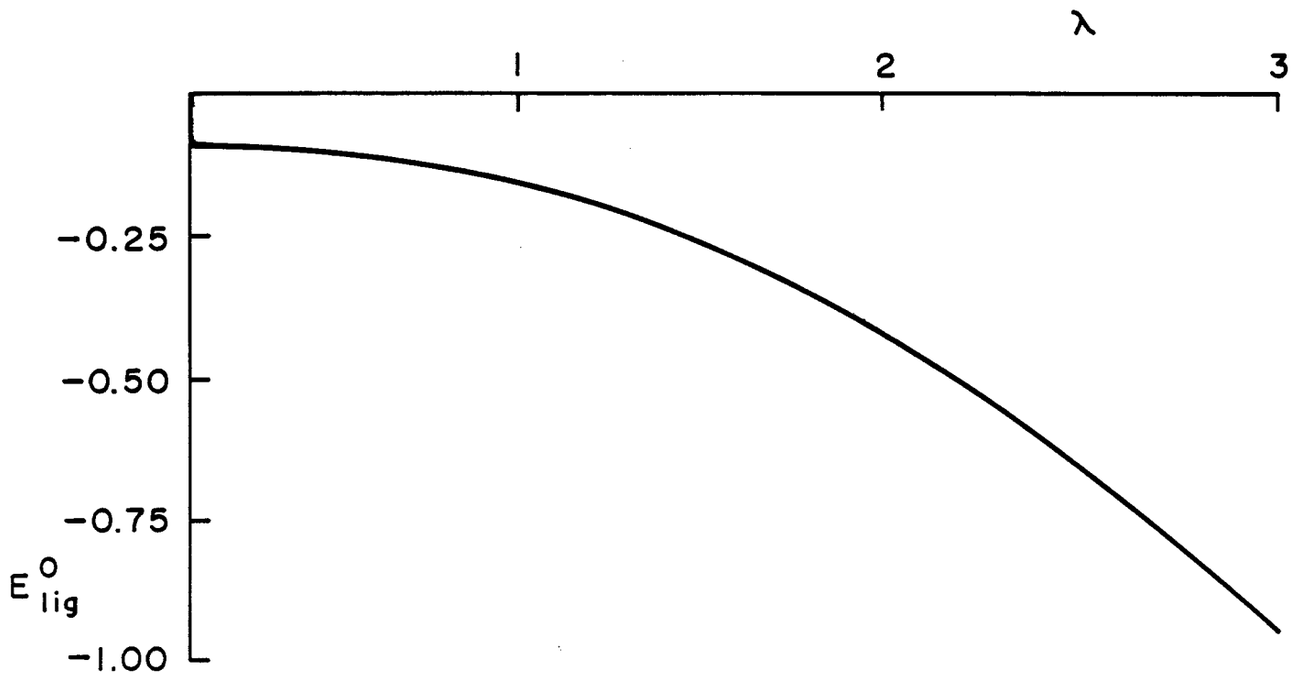


Figura (4–A): Variação da energia do estado ligado fundamental do sistema excitônico, para $\hbar\omega = 10$ e $V_0 = -0.5$, em função do parâmetro de acoplamento λ.

4–A. NÍVEIS RESSONANTES

De modo análogo ao problema unidimensional eletrônico, temos para o sistema do éxciton estados ligados, para $\lambda = 0$, com $E > 0$ que são degenerados com estados de espalhamento. As energias dos estados ligados são obtidas por

$$E_{ex} = E(V_o) + j\hbar\omega \quad j = 0,1,2,3 \ldots |V_o| > V_c \tag{A.13}$$

onde $E(V_o)$ é a energia, negativa, do estado ligado introduzido pela impureza e V_c é um certo valor crítico para que haja estados ligados. As energias do espalhamento são dadas por

$$E_{ex} = E(k_j) + j\hbar\omega, \quad j = 0,1,2,3 \tag{A.14}$$

Dessa forma, de acordo com o que foi dito na seção 3–A, quando se faz $\lambda \neq 0$ os níveis degenerados se acoplam de maneira que passa a existir a possibilidade de espalhamento ressonante devido a existência de níveis quasi–estacionários. Convém salientarmos que o diagrama de energia do éxciton, construido a partir de (A.13) e (A.14) e análogo ao do elétron excetuando–se o fato de que a parte contínua do diagrama não mais se estende até o infinito pois para o éxciton há um limite superior ditado pelo topo da banda.

APÊNDICE B

Apêndice B

Mostraremos neste apêndice que os coeficientes de transmissão elastico, T_0, e o inelástico associado a um quantum, T_1, podem ambos serem escritos como o quadrado de combinações lineares de amplitudes de espalhamento ressonantes e não ressonantes. Para T_o temos a partir de (II.37)

$$T_o = \left| \frac{ik_o b}{-\mu + ik_o b - \dfrac{\lambda^2}{-\mu + ik_1 b - \lambda\sqrt{2}\, R_2}} \right|^2 \tag{B.1}$$

somando e subtraindo a parcela $a_{oo} = ik_o a/(-\mu + ik_o a)$ obtemos

$$T_o = \left| a_{oo} + \frac{i k_o b \lambda^2}{(-\mu + ik_o b)[(-\mu + ik_1 b - \lambda\sqrt{2}\, R_2)(-\mu + ik_o b)\, \lambda^2]} \right|^2 \tag{B.2}$$

sabemos de (II.23), (II.31) e (II.32) que

$$a_1 = \frac{\lambda\, i\, k_o b}{(-\mu + ik_1 b - \lambda\sqrt{2}\, R_2)(-\mu + ik_o b) - \lambda^2} \tag{B.3}$$

com o auxílio de (B.3) podemos escrever T_o como

$$T_o = \left| a_{oo} + \frac{\lambda}{-\mu + ik_o b}\, a_1 \right| \tag{B.4}$$

que é a expressão (II.38). No capítulo II, seção 2.2 mostramos que a_1 é do tipo Breit–Wigner. Assim sendo, podemos reescrever (B.4) na forma

$$T_o = \left| A_{NR} + A_{RES} \right| \tag{B.5}$$

onde A_{RES} e A_{NR} representam, respectivamente, uma amplitude ressonante e uma não

ressonante.

Para o coeficiente T_1 temos a partir de (II.28)

$$T_1 = |a_1| \frac{k_1}{k_o} \tag{B.6}$$

ou utilizando (B.3) e (II.32)

$$T_1 = \left| \frac{\lambda i k_o b}{\left[-\mu + i k_1 b - \frac{2\lambda^2}{-\mu + i k_2 b - \lambda\sqrt{3}\, R_3} \right] (-\mu + i k_o b) - \lambda^2)} \right|^2 \tag{B.7}$$

somando e subtraindo a parcela

$$a_{o1}(\lambda) = \frac{\lambda i k_o b}{(-\mu + i k_1 b)(-\mu + i k_o b) - \lambda^2} \tag{B.8}$$

obtemos

$$T_1 = \left| a_{o1}(\lambda) + \right.$$

$$\left. + \frac{2 i k_o b \lambda^3 / (-\mu + i k_2 b - \lambda\sqrt{3}\, R_3}{(-\mu + i k_1 b)(-\mu + i k_o b) \left\{ \left[(-\mu + i k_1 b) - \frac{2\lambda^2}{-\mu + i k_2 b - \lambda\sqrt{3}\, R_3} \right] (-\mu + i k_o b) - \lambda^2 \right\}} \right|^2$$

(B.9)

que pode ser escrita como

$$T_1 = \left| a_{o1}(\lambda) + \frac{\sqrt{2}\, \lambda}{[(-\mu + i k_1 b)(-\mu + i k_o b) - \lambda^2]} a_2 \right|^2 \tag{B.10}$$

onde

$$a_2 = \frac{\lambda^2\sqrt{2}\ ik_ob\ (-\mu + ik_2b - \lambda\sqrt{3}\ R_3)}{\left[-\mu + ik_1b - \frac{2\lambda^2}{-\mu + ik_2b - \lambda\sqrt{3}\ R_3}\right](-\mu + ik_ob) - \lambda^2} \qquad .(B.11)$$

Para que (B.10) passa ser escrita de maneira análoga a (B.5) é preciso mostrarmos que a_2 é do tipo Breit–Wigner. De (B.11) temos

$$a_2 = \frac{\lambda^2\sqrt{2}\ ik_ob}{(-\mu + ik_2b + \lambda\sqrt{3}\ R_3)[(-\mu + ik_1b)(-\mu + ik_ob) - \lambda^2] - 2\lambda^2(-\mu + ik_ob)}$$

.(B.12)

No caso da figura (3b) do capítulo (II) temos, na região de ressonância, $E < 2\hbar\omega$ de modo que

$$ik_2 \longrightarrow -\kappa_2$$
$$ik_3 \longrightarrow -\kappa_3 \qquad (B.13)$$

k_n e κ_n dados, respectivamente por (II.11) e (A.2). Devemos esperar que na região da 2ª ressonância, $E \simeq E_2'$, tenhamos, fazendo $R_4 = 0$

$$(-\mu - \kappa_2b - \lambda\sqrt{3}R_3)\Big|_{E = E_2'} \approx 0 \qquad (B.14)$$

onde E_2' é uma energia proxima à energia do estado ligado, E_2, com $\lambda = 0$, no qual o oscilador se encontra no 2º estado excitado. De modo análogo ao que foi feito no capítulo II, expressão (II.43), podemos fazer

$$(-\mu - \kappa_2b\ \lambda\sqrt{3}R_3) \approx \alpha_2(E_2')(E - E_2') + ... \qquad (B.15)$$

onde

$$\alpha_2(E_2') = \sqrt{\frac{mb^2}{2\hbar^2}}\left[\frac{1}{\sqrt{(2\hbar\omega - E_2')}} + \frac{3\lambda^2}{(\mu + \kappa_3 b)^2}\cdot\frac{1}{\sqrt{(3\hbar\omega - E_2')}}\right] \tag{B.16}$$

substituindo (B.16) e (B.15) em (B.12) obtemos

$$a_2 = \frac{\lambda^2\sqrt{2}\, ik_o b/\beta_2(E_2')}{(E - E_2') - \frac{2\lambda^2(-\mu + ik_o b)}{\beta_2(E_2')}} \tag{B.17}$$

com

$$\beta_2 = \alpha(E_2')[(-\mu + ik_1 b)(-\mu + ik_o b) - \lambda^2]$$

definindo

$$-\frac{2\lambda^2(-\mu + ik_o b)}{\beta(E_2')} = \Delta_2 + \frac{i\Gamma_2}{2} \tag{B.18}$$

$$A_2 = \lambda^2\sqrt{2}\, ik_o b/\beta_2(E_2') \tag{B.19}$$

e

$$E_{2_{ress}} = E_2' - \Delta_2 \tag{B.20}$$

obtemos

$$a_2 = \frac{A_2}{(E - E_{2_{ress}}) + \frac{i\Gamma_2}{2}} \tag{B.21}$$

A expressão (B.21) é do tipo Breit–Wigner o que nos permite dizer que T_1 pode também ser escrita na forma (B.5), como pretendíamos mostrar.

APÊNDICE–C

Apêndice C

Neste apêndice, veremos como a integral tripla, $I_m(E,0)$, definida pela expressão (III.23),pode ser convertida em uma integral simples de modo a se tornar facilmente integrável numericamente.

Dá expressão (III.23) temos

$$I_m(E,0) = \frac{1}{(2\pi)^3}\iiint_{-\pi}^{\pi} \frac{dk'_x dk'_y dk'_z}{[E - m\hbar\omega - 3W - (\cos k'_x + \cos k'_y + \cos k'_z) + i\epsilon]} \tag{C.1}$$

ou melhor

$$I_m(E,0) = \frac{1}{W(2\pi)^3}\iiint_{-\pi}^{\pi} \frac{dk'_x dk'_y dk'_z}{[D_m - i\eta - \cos k'_x - \cos k'_y - \cos k'_z]} \tag{C.2}$$

com

$$D_m = -\frac{E - m\hbar\omega - 3W}{W}$$

A integral em (C.2) deve ser analisada em três casos distintos com relação a $E - m\hbar\omega$. A saber

1º) Dentro da banda $\longrightarrow 0 \leq E - m\hbar \leq 6W \longrightarrow -3 \leq D_m\ 3$

2º) Abaixo da banda $\longrightarrow E - m\hbar\omega < 0 \longrightarrow D_m > 3$

3º) Acima da banda $\longrightarrow E - m\hbar\omega > 0 \longrightarrow D_m < -3$

1º CASO

Neste caso, o integrando possui polos no eixo real e a inclusão da parcela $i\eta$ no denominador se faz necessária para que a integral exista. Podemos escrever (C.2) na forma

$$I_m(E,0) = -\frac{i}{W}\int_0^{\infty}\iiint_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(2\pi)^3}\cdot$$

$$\cdot\exp\{-i[(D_j - i\eta) - \cos k'_x - \cos k'_y - \cos k'_z]t\}dt dk'_x dk'_y dk'_z \qquad (C.3)$$

Sabemos que a função de Bessel de 1ª classe de ordem zero é definida, na forma integral, por

$$J_o(t) = \frac{1}{(2\pi)}\int_{-\pi}^{\pi} e^{it\cos\xi}d\xi \qquad (C.4)$$

utilizando (C.4) podemos escrever (C.3) como

$$I_m(E,0) = -\frac{1}{W}\int_0^{\infty} e^{-(D_m - i\eta)t}[J_0(t)]^3 dt \qquad (C.5)$$

fazendo $\eta \to 0$ e separando as partes real e imaginária obtemos

$$I_m(E,0) = -\frac{1}{W}\int_0^{\infty}[J_0(t)]^3 \mathrm{sen} D_m t - \frac{i}{W}\int_0^{\infty}[J_0(t)]^2 \cos D_m t \qquad (C.6)$$

2º CASO

Aqui,o integrando não possui polos e a integral é real pois

$$\mathrm{Im}[\mathrm{Im}(E,0)] = -\frac{1}{8\pi^2 W}\int d^3k\,\delta[E - E(\vec{k})] \qquad (C.7).$$

Como o integrando não possui polos a parcela $i\eta$ não mais se faz necessária no denominador de (C.2). Dessa forma, pode-se escrever

$$I_m(E,0) = -\frac{1}{W}\int_0^{\infty}\iiint_{-\pi}^{\pi} \exp[-(D_m - \cos k'_x - \cos k'_y - \cos k'_z)t]dt\,dk'_x dk'_y dk'_z$$

(C.8).

A função de Bessel modificada de 1ª classe de ordem zero é dada por

$$I_0(t) = -\frac{1}{W}\int_0^{\infty} e^{-t\cos\theta}d\theta \qquad (C.9)$$

com o auxílio de (C.9), (C.8) fica

$$I_m(E,0) = -\frac{1}{W}\int_0^{\infty} e^{-D_m t}[I_0(t)]^3 dt \qquad (C.10)$$

sabemos ainda que

$$I_n(x) = i^n J_n(ix) \qquad (C.11)$$

obtemos pois

$$I_m(E,0) = -\frac{1}{Wi}\int_0^\infty e^{iD_m t}[J_0(t)]^3 dt \qquad (C.12)$$

ou melhor

$$I_m(E,0) = -\frac{1}{W}\int_0^\infty [J_0(t)]^3 \mathrm{sen}(D_m t) dt \qquad (C.13)$$

3º CASO

Este caso é análogo ao anterior. Obtemos

$$I_m(E,0) = \frac{1}{W}\int_0^\infty [J_0(t)]^3 \mathrm{sen}(D_m t) dt \qquad (C.14).$$

As integrais em (C.6), (C.13) e (C.14) são agora facilmente integráveis numericamente. Na integração utilizamos a regra 1/3 de Simpson e a forma polinomial para $J_0(t)$[36] .

APÊNDICE D

Apêndice D

Neste apêncide, deduziremos a expressão (III.28) a qual representa a forma assintótica, no limite $l \to \infty$, da integral $I_m(E,l)$. Faremos a dedução totalmente voltada para o caso, de nosso interesse, em que a rede é cúbica simples. Um dedução mais rigorosa, e de caráter geral, qualquer $E(\vec{k})$, pode ser encontrada nos trabalhos de Koster[3], Lifshitz[26], Callaway[24,27] e sobretudo de Preziosi[29] que discute, utilizando pacotes, as questões de causalidade.

Consideremos a expressão (III.26)

$$I_m = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{Z.B} \frac{d^3k'_m \; e^{i\vec{k}_m.\vec{r}_l}}{(E - m\hbar\omega - E(\vec{k}'_m) + i\epsilon)}, \quad \vec{k}'_m = \vec{k}_m a.$$

A expressão acima pode ser reescrita na forma

$$I_m(E,l) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dt \int d^3\vec{k}'_m \exp\{ i[E - E(\vec{k}'_m) - m\hbar\omega + i\epsilon]t + i\vec{k}'_m.\vec{r}_l\} \tag{D.1}$$

No limite $\vec{r}_l \to \infty$ podemos resolver (D.1) utilizando o método das fases estacionárias (MFE)[28]. Este método nos diz que as principais contribuições para a integral vem, em primeira aproximação, dos pontos para os quais o expoente é estacionário, ou seja, pontos $(\vec{k},t)$ em que o gradiente no espaço $\vec{k}'_m$, do expoente, bem como sua derivada com relação a t são ambos nulos. Dessa forma, segundo o MFE, tais pontos, $(\vec{k}_{om},t_o)$, são determinados pelas condições

$$E - m\hbar\omega = E(\vec{k}_{om}) \tag{D.2}$$

e

$$t_o[\vec{\nabla}(E(\vec{k}'_m))]\Big|_{\vec{k}'_m = \vec{k}_{om}} = \vec{r}_l \tag{D.3}$$

A condição (D.2) nos diz que as principais contribuições virão daqueles valores de $\vec{k}'_m$ situados na superfície de energia constante $E - m\hbar\omega$. Por outro lado, (D.3) nos diz que, da superfície de energia constante, somente haverá contribuição daqueles pontos nos quais o gradiente é paralelo à direção "observada" $\vec{r}_l$, isto é, pontos onde a velocidade de grupo tem a mesma direção e sentido de $\vec{r}_l$.

Podemos fazer uma expansão em série de Taylor do expoente em (D.1) em torno do ponto (k_{om}, t_o). Mantendo termo até 2ª ordem e lembrando que os termos de 1ª ordem são nulos, devido a condição (D.3), temos

$$i[E - E(\vec{k}'_m) - m\hbar\omega + i\epsilon]t + i\vec{k}'_m.\vec{r}_l = i\{\vec{k}'_{om}.\vec{r}_l - [\nabla E(\vec{k}'_m)]\Big|_{\vec{k}'_m = \vec{k}_{om}} (\vec{k}'_m - \vec{k}_{om})(t - t_o) - \frac{1}{2}$$
$$t_o[(\vec{k}'_m - \vec{k}_{om}).\vec{\nabla}]^2 E(\vec{k}'_m)\Big|_{\vec{k}'_m = \vec{k}_{om}} + ...\} \tag{D.4}$$

com o auxílio de (D.4) podemos escrever (D.1) como

$$I_m(E,l) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \sum e^{i\vec{k}_{om}.\vec{r}_l} \int d^3\vec{k}'_m \int dt \exp\Big\{-i[\vec{\nabla}E(\vec{k}'_m)]_{\vec{k}'_m = \vec{k}_{om}} (\vec{k}'_m - \vec{k}_{om})(t - t_o)$$
$$+$$
$$+ \frac{i}{2} t_o[(\vec{k}'_m - \vec{k}_{om}).\vec{\nabla}]^2 E(\vec{k}'_m)_{\vec{k}'_m = \vec{k}_{om}}\Big\} \tag{D.5}$$

onde o somatório inclui todos os pontos estacionários $(\vec{k}_{om}, t_o)$. Para a rede cúbica simples, sabemos que

$$E(\vec{k}_m) = W(3 - \cos k'_{mx} - \cos k'_{my} - \cos k'_{mz}), \text{ com } E_o = 3W \tag{D.6}$$

substituindo (D.6) em (D.5) e extendendo os limites de integração de $-\infty$ a $+\infty$, isto pode ser feito pois as contribuições principais vêm dos pontos estacionários, obtemos

$$= -\frac{i}{(2\pi)^3} \sum e^{i\vec{k}_{om}.\vec{r}_l} \iiiint_{-\infty}^{\infty}$$

$$.e^{-i[W(t-t_o)\operatorname{sen} k_{omx}(k_{mx}-k_{omx}) + \frac{t_o W}{2}\cos k_{omx}(k_{mx}-k_{omx})^2} dk'_{mx} \,.$$

$$.e^{-i[W(t-t_o)\operatorname{sen} k_{omy}(k_{my}-k_{omy}) + \frac{t_o W}{2}\cos k_{omy}(k_{my}-k_{omy})^2} dk'_{my} \,.$$

$$.e^{-i[W(t-t_o)\operatorname{sen} k_{omz}(k_{mz}-k_{omz}) + \frac{t_o W}{2}\cos k_{omz}(k_{mz}-k_{omz})^2} dk'_{mz}\, dt \tag{D.7}$$

Completando o quadrado em k_{mx}, k_{my}, k_{mz} e utilizando a integral de Fresnel

$$\int e^{\pm i\chi^2\rho^2} d\rho = \frac{\sqrt{\pi}}{\chi} e^{\pm\frac{i\pi}{4}} \tag{D.8}$$

A integral (D.7) fica

$$= -\frac{i}{(2\pi)^3} \sum e^{i\vec{k}_{om}.\vec{r}_l} \int \frac{\pi^{3/2}(1-i)^3\, 2^{3/2}}{\sqrt{\cos k_{omx}\cos k_{omy}\cos k_{omz}}\; \frac{t_o^{3/2} W^{3/2} 2^3}{2^{3/2}}}.$$

$$.e^{i\frac{W}{2t_o}\left[\frac{\operatorname{sen}^2 k_{omx}}{\cos k_{omx}} + \frac{\operatorname{sen}^2 k_{omy}}{\cos k_{omy}} + \frac{\operatorname{sen}^2 k_{omz}}{\cos k_{omz}}\right](t-t_o)^2} dt$$

novamente utilizando (D.8), temos

$$I_m(E,l) = \sum e^{i\vec{k}_{om}\cdot\vec{r}_l}[2\pi\ |t_o|\ (\mathrm{sen}^2k_{omx}\cos k_{omy}\cos k_{omz} + \mathrm{sen}^2k_{omy}\cos k_{omx}\cos k_{omz} +$$

$$+ \mathrm{sen}^2k_{omz}\cos k_{omx}\cos k_{omy})^{1/2}\ W^2]^{-1} \tag{D.9}$$

de (D.3) temos

$$|t_o| = \frac{|\vec{r}_l|}{W\sqrt{\mathrm{sen}^2k_{0mx} + \mathrm{sen}^2k_{omy} + \mathrm{sen}^2k_{0mz}}} \tag{D.10}$$

substituindo (D.10) em (D.9) obtemos, finalmente

$$I_m(E,l) = -\frac{e^{i\vec{k}_{om}\cdot\vec{r}_l}}{2\pi W|\vec{r}_l|}\cdot$$

$$\cdot\left[\frac{\mathrm{sen}^2k_{omx} + \mathrm{sen}^2k_{omy} + \mathrm{sen}^2k_{omz}}{\mathrm{sen}^2k_{omx}\cos k_{omy}\cos k_{omz} + \mathrm{sen}^2k_{omy}\cos k_{omx}\cos k_{omz} + \mathrm{sen}^2k_{omz}\cos k_{omx}\cos k_{omy}}\right]$$

(D.11)

que é a expressão (III.28). Em (D.11) suprimimos o somatório. Tal simplificação decorre da forma particular da estrutura de banda da rede cúbica simples cujas superficies de energia[37] constante são tais que, para cada dada direção $\vec{r}_l$, há somente um único ponto estacionário, quando houver, $(\vec{k}_{om}, t_o)$, satisfazendo as condições (D.2) e (D.3).

APÊNDICE–E

Apêndice E

Neste apêndice mostraremos, de modo análogo ao que foi feito no apêndice C, que as seções de choque elástica, $d\sigma/d\Omega_o$, e inelástica associada a um fônon, $d\sigma/d\Omega_1$, podem ser escritas como o quadrado da soma de amplitudes de espalhamento ressonante e não ressonante. De (III.32) temos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_o} = \left| \frac{1}{2\pi W} (V_o a_o + \lambda a_1) \right|^2 \tag{E.1}$$

a partir de (III.24) podemos escrever

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_o} = \left| \frac{1}{2\pi W} \left[\frac{V_o}{1 - I_o V_o - \overline{I\ I_1 V_o\ \lambda\sqrt{2}\ I_1 R_2}} + \lambda a_1 \right] \right|^2 \tag{E.2}$$

onde utilizamos o fato de que associada a (III.24) há uma relação análoga a (II.32) entre coeficientes $R_m = (a_m/a_{m-1})$. Somando–se e subtraindo–se a quantidade

$$f_{oo} = \frac{V_o}{1 - I_o V_o} \tag{E.3}$$

e lembrando que

$$a_1 = \frac{\lambda I_1}{(1 - I_1 V_o - \lambda\sqrt{2} R_2)(1 - I_o V_o) - \lambda^2 I_o I_1} \tag{E.4}$$

obtemos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_o} = \left| \frac{1}{2\pi W} (f_{oo} + \gamma a_1) \right|^2, \ \gamma = I_o f_{oo} + 1. \tag{E.5}$$

Sabemos, expressão (III.36), que a_1 é do tipo Breit–Wigner. Dessa forma (E.5) fica

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_o} = |f_{NR} + f_{RES}|^2 \tag{E.6}$$

Para $d\sigma/d\Omega_1$ temos, a partir de (III.32) e (III.24), que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_1} = \left|\frac{1}{2\pi W}\frac{a_1}{I_1}\right|^2 \tag{E.7}$$

ou melhor

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_1}\left|\frac{1}{2\pi W}\left[\frac{\lambda}{(1-I_oV_o)\left\{(1-I_1V_o)-\frac{2\lambda^2 I_1 I_2}{(1-I_2V_o-\lambda\sqrt{3}\,R_3I_2)}\right\}-\lambda^2 I_oI_1}\right]\right|^2$$

(E.8)

somando–se e subtraindo–se a quantidade

$$f_{o1} = \frac{\lambda}{(1-I_oV_o)(1-I_1V_o)-\lambda^2 I_oI_1}$$

e lembrando que

$$a_2 = \frac{\lambda a_1 I_2\sqrt{2}}{1-I_2V_o-\lambda\sqrt{3}\,R_3I_2} \tag{E.9}$$

obtemos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_1} = \left|\frac{1}{2\pi W}\left[f_{o1}+\frac{2\lambda(1-I_oV_o)}{[(1-I_oV_o)(1-I_1V_o)\,\lambda^2 I_oI_1}\,a_2\right]\right| \tag{E.10}$$

pode–se verificar que o fator multiplicativo de a_2 é bem comportado. Devemos mostrar que na região da 2ª ressonância a_2 é do tipo Breit–Wigner de modo que (E.10) tenha a forma (E.6).

De (E.9) e (E.4) temos que

$$a_2 = \frac{\lambda^2 I_2 I_1 \sqrt{2}}{[(1 - I_o V_o)(1 - I_1 V_o) - \lambda^2 I_o I_1](1 - I_2 V_o - \lambda\sqrt{3}\, R_3 I_2) - 2\lambda^2 (1\, I_o V_o) I_1 I_2} \tag{E.6}$$

Na vizinhança da 2ª ressonância podemos fazer

$$1 - I_2 V_o - \lambda\sqrt{3} R_3 I_2 \approx \alpha_2 (E_2')(E - E_2') + \ldots \tag{E.7}$$

onde E_2' é uma energia próxima a energia do estado ligado, $\lambda = 0$, no qual o oscilador está no 2º estado excitado. Substituindo (E.7) em (E.6) e após tediosas contas é possível escrever a_2 na forma

$$a_2 = \frac{C}{E - E_r + i\Gamma/2}$$

de maneira que (E.10) pode também ser escrita como (E.6).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

(1). L.L.Chang, L.Esaki, and R.Tsu, Appl.Phy.Lett.24,593(1974)

(2). V.J.Goldman, D.C.Tsui, and J.E.Cunningham, Phys.Rev.Lett.,58,1256(1987)

(3). N.S.Wingreen, K.W.Jacobsen, and J.W.Wilkins,Phys.Rev.,B61,1396(1988)

(4). R.T.Collins, J.Lambe, T.C.Mcgill, and R.O.Burnham, appl.Phys.Lett.,44,532(1984)

(5). B.Y.Gelfand, S.Schmitt–Rink, and A.F.J.Levi, Phys.Rev.Lett.,62,1683(1989)

(6). J.M.Blatt and V.F.Weisskopf, Theoretical Nuclear Physics, pag.401.

(7). K.Gottfried, Quantum Mechanics, vol.I

(8). D.J.Chadi and K.J.Chang, Phys.Rev.,B39,10063(1989)

(9). D.V.Chang and R.A.Logan, Phys.Rev.,B39,1015(1979)

(10). C.Kittel, The Modern Theory of Solids

(11). J.J.Hopfield and D.N.Beratan, J.Chem.Phys.,81,5753(1984)

(12). E.Merzbacher, Quantum Mechanics, cap.19

(13). E.Merzbacher, Quantum Mechanics, cap.11

(14). G.Breit, Phys.Rev.,B107,1612(1957

(15). E.P.Wigner, Phys.Rev.,73,1002(1948)

(16). L.Landau and I.M.Lifshitz, Quantum Mechanics

(17). W.M.Yen and P.M.Selzer eds.,Laser Spectroscopy of Solids, Spring Verlag (1981)cap.1 e 7

(18). J.N.Onuchic, D.N.Beratan and J.J.Hopfield, J.Chem.Phys.,90,(1986)

(19). G.F.Koster and J.C.Slater, Phys.Rev.,95,1167(1954)

(20).G.F.Koster, Phys.Rev.,95,1436(1954)

(21). G.F.Koster and J.C.Slater, Phys.Rev.,96,1208(1954)

(22). R.P.Peirs, Ann.Phys.,13,905(1932)

(23). G.H.Wannier, Phys.Rev.,52,191(1937)

(24). J.Callaway, Phys.Rev.,5,783(1964)

(25). The Theory of Imperfect Crystalline Solids, Trieste Lectures–

(26). Ver por exemplo: I.M.Lifshitz, Nuovo Cimento Suppl.,3,716(1956) ou I.M.Lifshitz and M.I.Kadanov,Sov.Phys.Usp.,69,831(1959)

(27). J.callaway, Phys.Rev.,132,2003(1963)

(28). A.Erdélyi, Asymptotic Expansions

(29). B.Preziosi, Nuovo Cimento,6B,131(1971)

(30). H.A.Bethe, Rev.of Mod.Phys.,969(1937)

(31). Adair, Bockelman and Peterson, Phys.Rev.,76,308(1949)

(32). Peterson, Barschall and Bockelman, Phys.Rev.,79,593(1950)

(33). Ver ref. (6)

(34). Douglas Henderson ed.,Physical Chemistry an Advanced Treatise, vol.XIB/Mathematical Methods–Ac.Press

(35). E.N.Economou, Green's Functions in Quantum Physics, Springer Series in Solid State Sciences–vol. 07

(36). M.Abramowitz. Handbook of Mathematical Functions

(37). J.P.Mckelvey, Solid State and Semiconductors Physics, pag. 239