

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

**AUTO-ENERGIA DE FÔNONS LO
EM SUPER-REDES δ -DOPADAS.**

Leonardo Kleber Castelano

USP/IFSC/SBI

04



8-2-001447

Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de **Mestre em Ciências: Física Básica.**

Orientador: Prof. Dr. Lidério Cintrângulo Ioriatti Jr.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA
SÃO CARLOS - 2002

Castelano, Leonardo Kleber

Auto-energia de fônons LO em super-redes δ -dopadas. /Leonardo Kleber Castelano.–São Carlos, 2002.

<69> p.

Dissertação (Mestrado)–Instituto de Física de São Carlos, 2002.

Orientador: Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Jr.

1.Super-rede. 2.Fônon longitudinal ótico. 3.Excitações eletrônicas.

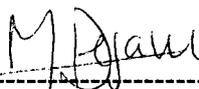
I.Título.

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE LEONARDO KLEBER CASTELANO, APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA, ÁREA DE CONCENTRAÇÃO FÍSICA BÁSICA, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 12/04/2002.

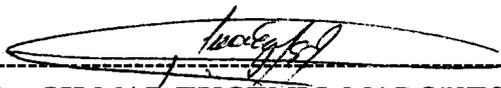
COMISSÃO JULGADORA:



Prof. Dr. LIDÉRIO CITRÂNGULO IORIATTI JR(Orientador) – IFSC/USP



Prof. Dr. MARCOS HENRIQUE DEGANI – USF



Prof. Dr. GILMAR EUGENIO MARQUES – UFSCar

Aos meus pais
Marta e Jorge,
por todo carinho e apoio.

*Este trabalho teve o apoio
financeiro da FAPESP.*

Agradecimentos

- Agradeço ao prof. Lidério que é um exemplo de um verdadeiro cientista e me orientou com toda sua experiência.
- À Maria Cristina pela ajuda com todas as papeladas.
- Aos funcionários do instituto que tornam nosso trabalho mais fácil e confortável.
- À todos os meus amigos, que aguentaram as minhas reclamações durante estes anos.
- Aos meus familiares que sempre estão ao meu lado.
- Ao meu único irmão, Leandro.
- À todos aqueles que esqueci de agradecer.
- Especialmente à Marina por todo o amor e carinho.

Sumário

Resumo	iii
Abstract	iv
1 Introdução.	1
2 Teoria de Espalhamento de luz.	6
2.1 Teoria de espalhamento em sólidos.	6
2.2 Espalhamento por flutuações de densidade de carga em semicondutores uniformemente dopados.	13
3 Estrutura eletrônica de uma super-rede δ-dopada.	22
3.1 Introdução.	22
3.2 A aproximação de Thomas-Fermi.	23
3.3 Aplicação à super-rede dopada planarmente.	26
3.4 Estrutura de minibandas.	31
4 Determinação da auto-energia do fônon LO.	37
4.1 Introdução.	37
4.2 Expressões para ΔE_0 e Γ	38

4.3	Cálculo do deslocamento de energia para um fônon.	39
4.4	Mecanismo flutuação densidade de carga para um gás de elétrons não-interagentes.	42
4.5	Amortecimento das flutuações de densidade.	44
4.6	Cálculo da função resposta para elétrons interagentes.	46
4.7	O deslocamento e o alargamento de energia para o sistema de elé- trons interagentes.	50
5	Resultados e Discussões.	51
5.1	Introdução	51
5.2	Resultados para o gás de elétrons livres.	52
5.3	Resultados para a super-rede.	56
6	Conclusão.	63
	Referências Bibliográficas	65

Resumo

Espectros Raman de super-redes δ -dopadas, na geometria de retro-espalhamento, mostram uma estrutura na região do fônon LO que é alargada e deslocada em relação à correspondente linha observada no material intrínseco. Neste trabalho, este fenômeno é teoricamente explicado através do acoplamento de um fônon LO de momento \mathbf{q} , propagando-se ao longo da super-rede, com as excitações eletrônicas desse sistema. O deslocamento e o alargamento da linha são obtidos através do cálculo da auto-energia desse fônon, a qual pode ser expressa em termos da função resposta densidade-densidade do gás de elétrons modulado. Efeitos da interação elétron-elétron são tratadas através da aproximação das fases aleatórias (RPA).

Abstract

The Raman spectra of δ -doping superlattice, in backscattering geometry, show a structure in the region of the LO phonon which is broadened and shifted in comparison with the same structure in the intrinsic material. In this work, this phenomena is interpreted as consequence of the coupling of LO xne-phonon of momentum \mathbf{q} , along the axis of the superlattice, with the excitations of the modulate electron gas, that exists in this system. The shift and the broadening of the phonon are calculated as the real and imaginary parts of the phonon self-energy, which in turn is related to the density-density response function of modulate electron gas. Effects of electron-electron interaction are calculated within the Random Phase Approximation (RPA).

Capítulo 1

Introdução.

Excitações eletrônicas podem ser modificadas pelo acoplamento com fônons e vice-versa. Pode-se citar dois tipos desses efeitos, um devido ao acoplamento de fônons não-polares ou fônons polares transversais com o sistema eletrônico e outro devido ao acoplamento de fônons polares longitudinais óticos (fônons LO) com elétrons ou plasmons. O primeiro é descrito pelo Hamiltoniano Potencial Deformação e o segundo pelo Hamiltoniano de Fröhlich. Investigações destes fenômenos revelam informações sobre as partes real e imaginária da auto-energia do fônon e, em alguns casos, o parâmetro de assimetria de Fano devido ao acoplamento de fônons com o contínuo eletrônico [1], [2]. Espalhamento inelástico de luz é uma técnica que fornece informações consideráveis sobre estes fenômenos. Para o caso de plasmas de semicondutores, que são excelentes candidatos para o estudo de espalhamento de luz, tem-se frequências que situam-se numa faixa que é acessível a este tipo de espectroscopia, também conhecida como espectroscopia Raman. Um plasma é uma coleção de partículas carregadas relativamente móveis, que interagem com as outras via forças de Coulomb. Os semicondutores possu-

em a característica de formar plasmas degenerados com interação elétron-elétron substancial. Estes plasmas podem ter sua densidade variada por dopagem, por excitações óticas ou térmicas, aumentando-se desta forma a mobilidade das partículas carregadas. A primeira observação de espalhamento de luz em um plasma de estado sólido foi feita por Mooradian e Wright [3] em GaAs uniformemente dopado do tipo n.

O espalhamento Raman é descrito por um processo onde um quantum de radiação incidente é aniquilado e um quantum de radiação espalhado é criado, gerando-se por sua vez uma criação ou aniquilação de uma excitação no gás de elétrons ou uma excitação vibracional. A estrutura de banda também pode influenciar o espectro de espalhamento de luz através da substituição da massa eletrônica pelo tensor massa efetiva [4], do comportamento ressonante da seção de choque de espalhamento para frequências incidentes próximas aos gaps óticos e da não parabolicidade da banda, que por sua vez aumenta as contribuições correspondentes a excitações de partícula independente [5].

Através do espalhamento de luz pode-se observar modos acoplados entre o fônon LO e o plasmon. A excitação destes modos pelo campo de radiação são resultantes de três diferentes mecanismos. Estes mecanismos estão relacionados com a flutuação de densidade de carga eletrônica, com o mecanismo eletro-ótico, e por último com o mecanismo potencial deformação no que se refere à fônons. O mecanismo responsável pelas flutuações de densidade de carga leva em conta as transições interbandas e intrabandas. O termo interbanda envolve os fótons incidentes e espalhados, enquanto o termo intrabanda sofre a ação das interações elétron-elétron e elétron-fônon do tipo Fröhlich. O mecanismo potencial

deformação é o mecanismo pelo qual o espalhamento ocorre devido a modulação da suscetibilidade eletrônica do cristal, enquanto o mecanismo eletro-ótico diz respeito a modulação da energia de polarização do cristal pelo campo elétrico longitudinal. A parte do fônon LO que contribui para o espalhamento de radiação por modos acoplados possui tanto o mecanismo eletro-ótico como o mecanismo potencial deformação. Por sua vez, a parte do plasmon que dá contribuição para os modos acoplados, leva em conta o mecanismo de flutuação de densidade de carga eletrônica e o mecanismo eletro-ótico, mas estes estão 90° fora de fase, por isso as intensidades de espalhamento devidas a estes são simplesmente adicionadas. Todos esses mecanismos podem ser separados pelas regras de seleção de polarização de modo que quando a polarização incidente é perpendicular a espalhada observa-se os mecanismos eletro-ótico juntamente com o potencial deformação. Entretanto se as polarizações estiverem paralelas o mecanismo observado é o de flutuação de densidade de carga. Para o GaAs dopado uniformemente observa-se que todos os mecanismos possuem intensidades comparáveis [6]. Do espectro de espalhamento de luz observado em amostras de GaAs dopadas uniformemente, a longos comprimentos de onda, observa-se linhas com frequências ω^+ e ω^- , resultantes da interação entre o plasmon e o fônon LO, a qual produz modos acoplados L^+ e L^- , respectivamente. Nestes espectros ainda observa-se a linha do fônon LO desacoplado, a qual é originada pela presença da camada de depleção, localizada na interface vácuo-semicondutor que existe nas amostras. Ao observar o comportamento do gás de elétrons formado em semicondutores dopados uniformemente, verifica-se a existência de uma frequência máxima para o espectro de transições de partícula independente. Essa frequência, dada pela conservação de energia e

momento para os comprimentos de onda usualmente disponíveis na espectroscopia Raman, não se superpõe a do fônon LO e desta forma interferências entre o fônon LO e as excitações eletrônicas nestes sistemas não devem ocorrer.

O desenvolvimento das técnicas de crescimento epitaxial de cristais possibilitou a construção de novas estruturas semicondutoras. Uma destas é a super-rede δ -dopada, que tem como principal característica a quebra da simetria translacional, o que acarreta na formação de um gás de elétrons híbrido. Este possui dois comportamentos distintos, ou seja, comporta-se tanto como um gás de elétrons quase-bidimensional quanto um quase-tridimensional. Neste caso a energia do fônon LO se superpõe com as energias do quase contínuo geradas a partir do gás quase-tridimensional. Desta forma foi previsto a existência de interferências quânticas entre um fônon LO e o quase-contínuo de excitações eletrônicas [1], que foram posteriormente constatadas experimentalmente a baixas temperaturas e a temperatura ambiente [7], [8]. Interferências quânticas entre um nível discreto e um quase-contínuo de níveis de energia manifestam-se como assimetrias nas formas da linha de seção de choque de espalhamento. Estas assimetrias são esperadas ocorrer na região de energia do fônon LO como consequência do acoplamento de Fröhlich dos fônons LO com o quase-contínuo das flutuações de carga eletrônica. O objetivo deste trabalho é o de calcular a auto-energia de um fônon LO neste sistema, que se manifesta através do deslocamento de sua frequência e de um tempo de vida finito e compará-la com os dados experimentais [7], [8]. Esses resultados podem ser observados na figura (1.1).

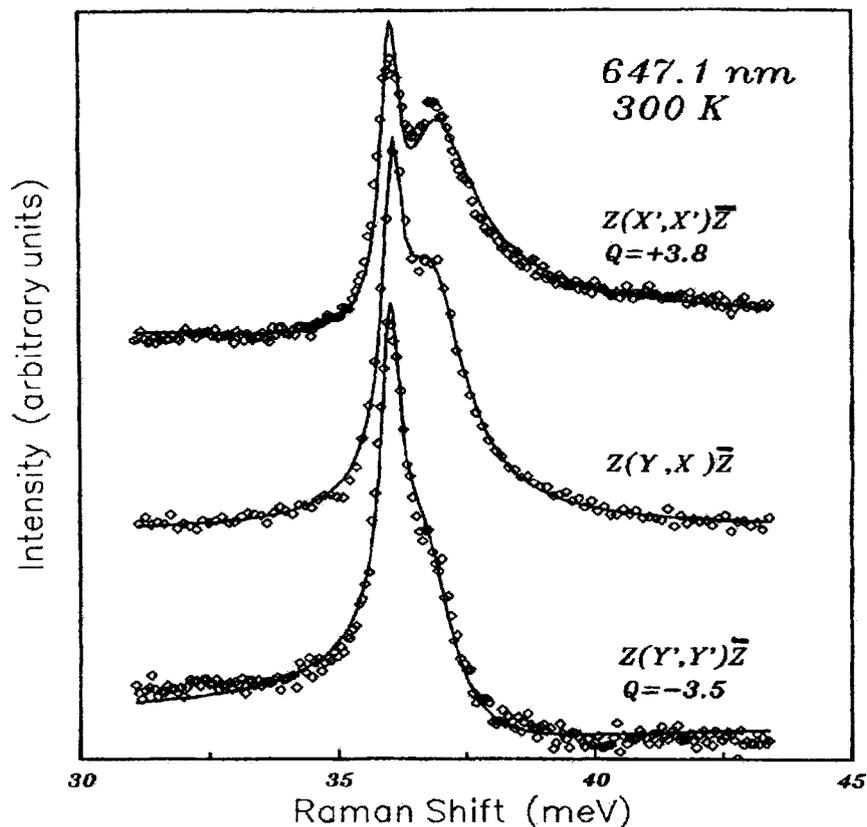


Figura 1.1: Espectro Raman (Stokes) de uma super-rede dopada planarmente em três diferentes configurações de espalhamento à $T=300\text{K}$, onde Q é o fator de assimetria de Fano.

A figura (1.1), a qual foi extraída da referência [8], apresenta os resultados do espalhamento Raman em três diferentes geometrias de espalhamento, onde $Z(X', Y')\bar{Z}$ representa o espectro despolarizado, $Z(Y, X)\bar{Z}$ representa o espectro na geometria de retro-espalhamento e $Z(Y', Y')\bar{Z}$ representa o espectro polarizado. Nestes espectros observa-se a linha do fônon LO do GaAs intrínseco ($\omega_{LO} = 36,2\text{meV}$), nota-se também uma outra estrutura, a qual é deslocada e alargada. O alargamento e o deslocamento da linha utilizados no ajuste são os mesmos para todas as curvas, conforme descrito na referência [8].

Capítulo 2

Teoria de Espalhamento de luz.

O objetivo deste capítulo é o de discutir de forma geral os conceitos envolvidos na teoria de espalhamento de luz por fônons e por excitações eletrônicas em sólidos. Primeiramente descreve-se o espalhamento por fônons usando-se a chamada teoria da polarizabilidade, a qual possui uma estrutura macroscópica e somente é válida na aproximação adiabática. A seção 2.2 é designada ao tratamento do espalhamento por flutuações de densidade de carga. Descreve-se também nesta seção o comportamento de um gás de elétrons livres, ou seja, um semiconductor dopado uniformemente, o qual apresenta o caráter de um plasma quântico.

2.1 Teoria de espalhamento em sólidos.

Considerando primeiramente o tratamento clássico da teoria de espalhamento, o qual é baseado no estudo da energia de radiação emitida por momento de dipolo elétrico \vec{M} vibrando com frequência ω , por unidade de tempo. Pode-se

determinar a seguinte equação para a energia de radiação emitida:

$$\frac{dW_s}{d\Omega} = \frac{\omega^4}{(4\pi)^2 \epsilon_0 c^3} |\hat{e}_s \cdot \vec{M}|^2 \quad (2.1)$$

onde $d\Omega$ é o elemento de ângulo sólido, ϵ_0 a constante dielétrica do meio, c a velocidade da luz e \hat{e}_s , o vetor unitário que representa a direção de polarização da luz espalhada. Supõe-se que o dipolo situa-se em um átomo, molécula ou um outro complexo que possua dimensões comparáveis com o comprimento de onda da luz. Sendo $\tilde{\alpha}$, o tensor polarizabilidade de um destes complexos, determina-se o momento de dipolo induzido pelo campo elétrico incidente $\vec{E}_L = \hat{e}_L E_L$ da seguinte forma:

$$\vec{M} = \tilde{\alpha} \cdot \hat{e}_L E_L \quad (2.2)$$

Substituindo (2.2) na equação (2.1) obtém-se:

$$\frac{dW_s}{d\Omega} = \frac{\omega^4}{(4\pi)^2 \epsilon_0 c^3} |\hat{e}_s \cdot \tilde{\alpha} \cdot \hat{e}_L|^2 E_L^2 \quad (2.3)$$

A seção de choque de espalhamento diferencial $d\sigma/d\Omega$ é obtida dividindo-se (2.3)

pela energia incidente por unidade de área e unidade de tempo $W_L = \epsilon_0 c E_L^2$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\omega^4}{(4\pi \epsilon_0 c^2)^2} |\hat{e}_s \cdot \tilde{\alpha} \cdot \hat{e}_L|^2 \quad (2.4)$$

O caso mais simples de polarizabilidade anisotrópica é de um corpo com simetria axial, neste caso $\tilde{\alpha}$ possui duas componentes independentes α_{\parallel} e α_{\perp} :

$$\hat{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{\perp} & & \\ & \alpha_{\perp} & \\ & & \alpha_{\parallel} \end{pmatrix} = \langle \alpha \rangle \mathbf{I} + \beta \begin{pmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & 2 \end{pmatrix} = \langle \tilde{\alpha} \rangle + \tilde{\beta} \quad (2.5)$$

Desta forma o tensor $\tilde{\alpha}$ foi decomposto na soma de um tensor diagonal $\langle \tilde{\alpha} \rangle$ e um tensor de traço nulo $\tilde{\beta}$. O tensor $\tilde{\alpha}$ é isotrópico e produz espalhamento polarizado, enquanto $\tilde{\beta}$ muda a polarização do campo incidente.

Antes de entender o espalhamento em sólidos pode-se analisar o espalhamento em moléculas, pois este sistema tem os ingredientes necessários para a compreensão de sistemas mais complicados.

Considerando-se um modo vibracional da molécula de frequência ω_v , o qual é caracterizado pelo deslocamento de N átomos com dependência temporal $\exp(\pm i\omega_v t)$ e amplitudes $\mathbf{u}_j (j = 1, 2, \dots, N)$. As amplitudes \mathbf{u}_j estão relacionadas com a coordenada do modo normal ξ através da seguinte transformação:

$$M_j^{1/2} \mathbf{u}_j(\pm \omega_v t) = (\mathbf{e}_j \xi e^{-i\omega_v t} + \mathbf{e}_j^* \xi^* e^{i\omega_v t}) \quad (2.6)$$

onde $\sum_{j=1}^N |\mathbf{e}_j|^2 = 1$ e M_j é a massa do j -ésimo átomo. O conjunto de vetores \mathbf{e}_j representa os auto-vetores dos modos vibracionais.

Considerando a aproximação chamada de quasi-estática, ou adiabática, da teoria de espalhamento Raman, a qual está baseada em (2.1) e assumindo que ω_v é pequeno comparado com as "energias eletrônicas", onde tal condição pode ser expressa por:

$$\omega_v^2 \ll |\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma|, \quad (2.7)$$

pode-se considerar que a frequência do laser está "vários ω_v 's" longe da ressonância. Na eq.(2.7) γ é o amortecimento das excitações eletrônicas. Sob estas condições, pode-se tratar o fônon como uma deformação estática da molécula definindo em cada instante de tempo a polarizabilidade $\tilde{\alpha}(\omega_L, \xi)$, que pode ser expandida da seguinte forma:

$$\tilde{\alpha}(\omega_L, \xi) = \tilde{\alpha}(\omega_L) + \frac{\partial \tilde{\alpha}}{\partial \xi} \xi e^{-i\omega_v t} + \frac{\partial \tilde{\alpha}}{\partial \xi^*} \xi^* e^{-i\omega_v t} + \dots \quad (2.8)$$

A seção de choque de espalhamento de um fônon é obtida substituindo-se (2.8)

em (2.4):

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = \frac{\omega_s^4}{(4\pi\epsilon_0 c^2)^2} |\hat{e}_s \cdot \frac{\partial \tilde{\alpha}}{\partial \xi} \cdot \hat{e}_L|^2 \langle \xi \xi^* \rangle \quad (Stokes) \quad (2.9)$$

$$\frac{d\sigma_a}{d\Omega} = \frac{\omega_s^4}{(4\pi\epsilon_0 c^2)^2} |\hat{e}_s \cdot \frac{\partial \tilde{\alpha}}{\partial \xi^*} \cdot \hat{e}_L|^2 \langle \xi^* \xi \rangle \quad (antistokes) \quad (2.10)$$

onde $\langle \rangle$ representa a média termodinâmica sobre o estado fundamental da molécula. Assumindo-se que a frequência ω_v é muito bem definida pode-se dizer que a linha Raman observada será uma função delta $\delta(\omega_R - \omega_v)$ em função do "Raman shift" $\omega_R = \omega_L - \omega_S$, onde ω_L é a frequência do fóton incidente e ω_S a do espalhado. As equações (2.9) e (2.10) podem ser reescritas da seguinte forma:

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = \frac{\omega_s^4}{(4\pi\epsilon_0 c^2)^2} |\hat{e}_s \cdot \frac{\partial \tilde{\alpha}}{\partial \xi} \cdot \hat{e}_L|^2 \langle \xi \xi^* \rangle \delta(\omega_R - \omega_v) \quad (Stokes) \quad (2.11)$$

$$\frac{d\sigma_a}{d\Omega} = \frac{\omega_s^4}{(4\pi\epsilon_0 c^2)^2} |\hat{e}_s \cdot \frac{\partial \tilde{\alpha}}{\partial \xi^*} \cdot \hat{e}_L|^2 \langle \xi^* \xi \rangle \delta(\omega_R - \omega_v) \quad (antistokes) \quad (2.12)$$

Em geral, ω_v é alargado e para levar este fato em conta pode-se substituir $\delta(\omega_R - \omega_v)$ por uma Lorentziana ou outra função apropriada.

Afim de quantizar os deslocamentos ξ e ξ^* , pode-se substituí-los por operadores ξ e ξ^\dagger , respectivamente. As contribuições Stokes e antistokes podem ser escritas como:

$$Stokes : \langle \xi \xi^\dagger \rangle = \langle n | \xi | n+1 \rangle \langle n+1 | \xi^\dagger | n \rangle = \frac{\hbar}{2\omega_v} (n+1)$$

$$antistokes : \langle \xi^\dagger \xi \rangle = \langle n | \xi^\dagger | n-1 \rangle \langle n-1 | \xi | n \rangle = \frac{\hbar}{2\omega_v} n$$

Os operadores de criação e aniquilação de fônon b^\dagger e b estão relacionados com ξ^\dagger e ξ por:

$$b = \sqrt{\frac{2\omega_v}{\hbar}} \xi, \quad b^\dagger = \sqrt{\frac{2\omega_v}{\hbar}} \xi^\dagger \quad (2.13)$$

Para estender este formalismo e poder aplicá-lo em sólidos deve-se considerar que o sólido tem um volume de espalhamento V e um número N de células unitárias e considerá-lo como sendo uma grande molécula. Usando-se o teorema de Bloch, os auto-vetores da l -ésima célula unitária, podem ser relacionados com a célula unitária na origem \mathbf{e}_j através de :

$$\mathbf{e}_{jl}(\vec{q}) = \mathbf{e}_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_l} \quad (2.14)$$

onde \vec{q} é o momentum cristalino, pseudomomentum ou vetor de onda do modo.

A normalização de \mathbf{e}_{jl} é feita convenientemente dentro da célula unitária:

$$\sum_j^{\text{cél. unit.}} |\mathbf{e}_j(\vec{q})|^2 = 1 \quad (2.15)$$

A amplitude de vibração do átomo de massa M_j da célula \mathbf{R}_l no modo de frequência $\omega_\nu(\vec{q})$ é dada por:

$$\mathbf{u}_{jl}(\vec{q}) = \frac{M_j^{-1/2}}{\sqrt{N}} (\mathbf{e}_j(\vec{q}) \xi_j(\vec{q}) e^{-i(\omega_\nu(\mathbf{q})t - \vec{q} \cdot \vec{R}_l)} + \mathbf{e}_j^*(\vec{q}) \xi_j^*(\vec{q}) e^{i(\omega_\nu(\mathbf{q})t - \vec{q} \cdot \vec{R}_l)}) \quad (2.16)$$

O campo espalhado possui os seguintes fatores de fase:

$$e^{-i[\omega_L \pm \omega_\nu(\mathbf{q})]t} e^{i(\mathbf{k}_L \pm \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}} \quad (2.17)$$

onde o sinal $+$ dá o espalhamento antistokes e o sinal $-$ o Stokes. Pela equação acima determina-se a lei de conservação de energia e de vetor de onda:

$$\omega_s = \omega_L \pm \omega_\nu$$

$$\mathbf{k}_s = \mathbf{k}_L \pm \mathbf{q}$$

A seção de choque de espalhamento pode ser obtida através de (2.11) introduzindo-se a suscetibilidade, que é definida como o momento de dipolo por unidade de

volume induzido por um campo unitário, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 \chi(\mathbf{r}) &= \sum \alpha(\mathbf{R}_j) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \\ \frac{d\sigma_s}{d\Omega} &= \frac{\omega_s^4 V^2}{(4\pi c^2)^2} |\hat{e}_s \cdot \frac{\partial \tilde{\chi}}{\partial \xi} \cdot \hat{e}_L|^2 \langle \xi \xi^\dagger \rangle \end{aligned} \quad (2.18)$$

A expressão para a suscetibilidade Raman pode ser definida como:

$$\frac{\partial \tilde{\chi}}{\partial \xi} = \sum_j^{\text{cél. unit.}} \frac{\partial \tilde{\chi}}{\partial \mathbf{u}_j} \times \frac{\partial \mathbf{u}_j}{\partial \xi} = \sum_j^{\text{cél. unit.}} \frac{\partial \tilde{\chi}}{\partial \mathbf{u}_j} \frac{M_j^{-1/2}}{\sqrt{N}} \hat{e}_j \quad (2.19)$$

O fator $N^{-1/2}$ depende de V , entretanto é usual definir a suscetibilidade Raman independente do volume, por isso escreve-se:

$$\frac{\partial \tilde{\chi}'}{\partial \xi} = V^{1/2} \frac{\partial \tilde{\chi}}{\partial \xi} = V_c^{1/2} \sum_j^{\text{cél. unit.}} \frac{\partial \tilde{\chi}}{\partial \mathbf{u}_j} M_j^{-1/2} \hat{e}_j \quad (2.20)$$

onde V_c é o volume da célula unitária. Em termos da suscetibilidade Raman renormalizada e independente do volume, a equação (2.18) torna-se igual a:

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = \frac{\omega_s^4 V}{(4\pi c^2)^2} |\hat{e}_s \cdot \frac{\partial \tilde{\chi}'}{\partial \xi} \cdot \hat{e}_L|^2 (n+1) \frac{\hbar}{2\omega_\nu} \quad (2.21)$$

ou, equivalentemente, introduzindo-se uma função espectral, que usualmente é uma Lorentziana:

$$\frac{\partial^2 \sigma_s}{\partial \Omega \partial \omega_R} = \frac{\omega_s^4 V}{(4\pi c^2)^2} |\hat{e}_s \cdot \frac{\partial \tilde{\chi}'}{\partial \xi} \cdot \hat{e}_L|^2 (n+1) \frac{\Gamma/2\pi}{(\Gamma/2)^2 + (\omega_\nu - \omega_R)^2} \frac{\hbar}{2\omega_\nu} \quad (2.22)$$

Uma forma mais conveniente é obtida utilizando-se o chamado tensor Raman R_{ij} , que é proporcional a $\frac{\partial \chi'_{ij}}{\partial \xi}$. As propriedades de simetria de R_{ij} podem ser derivadas através do fato que a eficiência de espalhamento para polarizações \hat{e}_s e \hat{e}_L é dada por:

$$dS \propto \left| \hat{e}_s \cdot \tilde{\mathbf{R}} \cdot \hat{e}_L \right|^2 \quad (2.23)$$

A geometria que foi considerada nos experimentos que está relacionada a este trabalho, que por sua vez é bastante utilizada, é a de retro-espalhamento. A

geometria de retro-espalhamento considera que a luz incidente e a espalhada coincidem com a normal à direção de dopagem, desta forma pode-se dizer que os fônons excitados possuem vetores de onda paralelos à normal. Nesta geometria, com espalhamento na direção (001) e com $\hat{e}_s \parallel \hat{e}_L$ tem-se o seguinte tensor Raman, para os mecanismos de potencial deformação e eletro-ótico:

$$\tilde{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

onde d é uma constante. Como conclusão do que foi descrito nesta seção, a linha Lorentziana ligeiramente deslocada e alargada observada no espectro despolarizado da fig. (1.1), deve ser interpretada como resultante do retro-espalhamento de luz, através do mecanismo potencial deformação, por um fônon LO que adquiriu um tempo de vida finito e cuja frequência foi deslocada pelo seu acoplamento com as excitações eletrônicas da super-rede. Como será visto a seguir, o espalhamento eletrônico devido a excitações eletrônicas inexiste na geometria despolarizada, e portanto assimetrias não são esperadas nesta configuração.

2.2 Espalhamento por flutuações de densidade de carga em semicondutores uniformemente dopados.

O Hamiltoniano para a interação de um elétron de carga $-e$ na posição \mathbf{r} com um campo de radiação designado pelo potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ é:

$$H_{el-rad} = \frac{e^2 |\mathbf{A}|^2}{2mc^2} + \frac{e}{2mc} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) \quad (2.25)$$

onde m é a massa do elétron e c a velocidade da luz. Seja $A_L \hat{e}_L \exp[i(\mathbf{k}_L \cdot \mathbf{r} - \omega_L t)] + \text{H.C.}$ e $A_S \hat{e}_S \exp[i(\mathbf{k}_S \cdot \mathbf{r} - \omega_S t)] + \text{H.C.}$, os potenciais vetores associados aos fótons incidentes e espalhados, respectivamente. Onde H.C. denota hermitiano conjugado. O termo $|\mathbf{A}|^2$ em (2.25) é a força de Lorentz que atua no elétron devido ao produto vetorial da velocidade adquirida pelo campo \mathbf{E} com o campo \mathbf{B} . Os termos cruzados dominam no processo de espalhamento [9]. O Hamiltoniano de espalhamento é dado por:

$$H' = r_0 (\hat{e}_L \cdot \hat{e}_S) A_L A_S^\dagger \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] + \text{H.C.} \quad (2.26)$$

onde $\mathbf{q} = \mathbf{k}_L - \mathbf{k}_S$ e $\omega = \omega_L - \omega_S$, e onde $r_0 = e^2/mc^2$ é o raio clássico do elétron. A força aplicada no elétron por (2.26) é ao longo de \mathbf{q} . Se $|i\rangle$ e $|f\rangle$ denotarem os estados iniciais e finais de ondas planas para o elétron, a seção de choque de espalhamento resultará da aplicação da teoria de perturbação dependente do tempo (a regra de ouro de Fermi) usando-se como termo perturbativo o Hamiltoniano (2.26). Obtém-se para a seção de choque de espalhamento a seguinte forma:

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \left(\frac{\omega_S}{\omega_L}\right)^2 r_0^2 (\hat{e}_L \cdot \hat{e}_S)^2 \sum_f |\langle f | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} | i \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_f + \omega_i) \quad (2.27)$$

Para uma coleção de elétrons $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ é escrito por um operador, o qual é essencialmente a componente de Fourier da densidade de número:

$$\rho_q \equiv \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} = \sum_k c_{k+q}^\dagger c_k \quad (2.28)$$

onde ρ_q é a flutuação de densidade eletrônica e c_{k+q}^\dagger e c_k são operadores de criação e aniquilação, respectivamente. A equação (2.26) fica sendo igual a:

$$H' = r_0(\hat{e}_L \cdot \hat{e}_S) A_L A_S^\dagger \exp(-i\omega t) \rho_q + H.C. \quad (2.29)$$

Quando usa-se a regra de ouro de Fermi em (2.29), tem-se o seguinte resultado para a eficiência de espalhamento:

$$\frac{\partial^2 S}{\partial \Omega \partial \omega} = r_0^2 (\hat{e}_L \cdot \hat{e}_S)^2 S(q, \omega) \quad (2.30)$$

onde

$$S(q, \omega) = Av_i \sum_f | \langle f | \rho_q | i \rangle |^2 \delta(\omega - \omega_f + \omega_i) \quad (2.31)$$

é o fator de estrutura dinâmico. Av_i é igual a $\frac{e^{-\beta \hbar \omega_i}}{\sum_k e^{-\beta \hbar \omega_k}}$, onde $\beta = 1/k_B T$. Os estados $|i\rangle$ e $|f\rangle$ são estados exatos de muitos corpos. Para fazer o cálculo de (2.31) usa-se a aproximação denominada de RPA (*Random Phase Approximation*), que pode ser facilmente obtida usando-se o teorema flutuação-dissipação. Este diz que $S(q, \omega)$, o espectro de potência de flutuações de densidade, é igual a $(-\pi^{-1})$ multiplicado pela parte imaginária da função resposta densidade-densidade, a qual é denotada por $\bar{R}(q, \omega)$, multiplicado pelo fator dependente da temperatura $(1 + n_\omega)$, onde $n_\omega = [\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]^{-1}$. $\bar{R}(q, \omega)$ descreve a resposta do sistema sobre a ação de um potencial externo que varia no tempo da forma $\varphi_{ext} = \varphi_q e^{-i\omega t}$. O Hamiltoniano perturbativo tem a mesma forma de (2.26), ou seja, $H' = -e \varphi_{ext} \rho_q + H.C.$. Devido a presença deste uma densidade de carga

será induzida $\rho_{ind} = \langle \rho_q \rangle$, a qual em mais baixa ordem de teoria de perturbação dependente do tempo será proporcional à φ_{ext} . O coeficiente $R(q, \omega)$ que define ρ_{ind} é dado por:

$$\rho_{ind} = -e \varphi_{ext} R(q, \omega) \quad (2.32)$$

Desta forma, os efeitos de muitos elétrons devido as interações de Coulomb estão incluídos em R . A aproximação RPA consiste em supor que o gás de elétrons responde ao potencial total, dado pela soma do potencial induzido e o potencial externo, como se fosse um gás de partículas independentes. A resposta linear à perturbação $H' + H'_{ind}$ é portanto determinada através de teoria de perturbação usando-se estados de elétrons livres [10], ou seja,

$$\rho_{ind} = -e (\phi_{ext} + \phi_{ind}) R(q, \omega) \quad (2.33)$$

onde $R(q, \omega)$ é a função resposta para elétrons livres que é dada por:

$$\hbar R(q, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{[n(\mathbf{k}) - n(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{[\omega + i0^+ + \omega(\mathbf{k}) - \omega(\mathbf{k} + \mathbf{q})]} \quad (2.34)$$

onde $n(\mathbf{k})$ denota o número de ocupação térmica por unidade de volume.

A expressão para a eficiência de espalhamento de luz é então dada por:

$$\frac{d^2 S}{d\omega d\Omega} = \left(\frac{\omega_S}{\omega_L}\right)^2 \tau_0^2 (\hat{e}_L \cdot \hat{e}_S)^2 (1 + n_\omega) \hbar \pi^{-1} \left(\frac{-Im[R]}{|\varepsilon|^2} \right) \quad (2.35)$$

$$= \left(\frac{\omega_S}{\omega_L}\right)^2 \tau_0^2 (\hat{e}_L \cdot \hat{e}_S)^2 (1 + n_\omega) \left(\frac{\hbar q^2}{4\pi e^2} \right) Im \left[\frac{-1}{\varepsilon} \right] \quad (2.36)$$

de acordo com a referência [11]. Nas equações acima ε denota função dielétrica resposta, a qual para o gás de elétrons livres é igual a:

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 - 4\pi e^2 \frac{R(q, \omega)}{q^2} \quad (2.37)$$

Se a correção da RPA for descartada, (ϵ em (2.35) é colocado como sendo igual a um), isto resultará no espectro de excitação de partículas independentes isto é, $\frac{d^2 S}{d\omega d\Omega} \propto \pi^{-1} Im[R]$. Quando as interações de Coulomb são consideradas na aproximação RPA o espectro de excitação de partícula independente é blindado pelo fator $|\epsilon|^{-2}$ e a natureza da blindagem dependente de q e ω . Substituindo-se a eq.(2.34) na equação (2.37) determina-se,

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{\hbar q^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{[n(\mathbf{k}) - n(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{[\omega + i0^+ - \omega(\mathbf{q}, \mathbf{k})]} \quad (2.38)$$

onde $\omega(\mathbf{q}, \mathbf{k}) = \omega(\mathbf{q} + \mathbf{k}) - \omega(\mathbf{k})$. O desenvolvimento do cálculo de $\epsilon(q, \omega)$ foi baseado em Pines [12], o qual escreve $\epsilon(q, \omega)$ na sua parte real e imaginária e desta forma obtém:

$$Re[\epsilon(q, \omega)] = 1 - \frac{8\pi e^2}{\hbar q^2} \sum_n \frac{f_{0n}}{\omega^2 - \omega(\mathbf{q}, \mathbf{k})^2} \quad (2.39)$$

$$Im[\epsilon(q, \omega)] = \frac{4\pi e^2}{\hbar q^2} \sum_{\mathbf{k}} (n(\mathbf{k}) - n(\mathbf{k} + \mathbf{q})) \delta(\omega - \omega(\mathbf{q}, \mathbf{k})) \quad (2.40)$$

onde f_{0n} é a força de oscilador para ondas planas, a qual é descrita por:

$$f_{0n} = \frac{2m^*}{\hbar q^2} \omega_{n0} | \langle n | \rho_{\mathbf{q}} | 0 \rangle |^2 = \frac{2m^*}{\hbar q^2} \omega(\mathbf{q}, \mathbf{k}) (n(\mathbf{k}) - n(\mathbf{k} + \mathbf{q})) \quad (2.41)$$

O cálculo de $\varepsilon(q, \omega)$ foi primeiramente determinado por Lindhard [13], que encontrou:

$$\begin{aligned}
 \text{Re}[\varepsilon(q, \omega)] = & 1 + \frac{q_{TF}^2}{2q^2} + \frac{q_{TF}^2 k_F}{4q^3} \left\{ \left[1 - \frac{\left(\omega - \frac{\hbar q^2}{2m^*}\right)^2}{q^2 v_F^2} \right] \times \right. \\
 & \times \ln \left| \frac{\omega - qv_F - \hbar q^2/2m^*}{\omega + qv_F - \hbar q^2/2m^*} \right| + \left[1 - \frac{\left(\omega + \frac{\hbar q^2}{2m^*}\right)^2}{q^2 v_F^2} \right] \times \\
 & \left. \times \ln \left| \frac{\omega + qv_F + \hbar q^2/2m^*}{\omega - qv_F + \hbar q^2/2m^*} \right| \right\} \quad (2.42)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Im}[\varepsilon(q, \omega)] = & \frac{\pi}{2} \frac{\omega}{qv_F} \frac{q_{TF}^2}{q^2}, \quad \omega \leq qv_F - \hbar q^2/2m^* \\
 = & \frac{\pi}{4} \frac{k_F}{q} \frac{q_{TF}^2}{q^2} \left[1 - \frac{\left(\omega - \frac{\hbar q^2}{2m^*}\right)^2}{q^2 v_F^2} \right], \quad qv_F - \hbar q^2/2m^* \leq \omega \leq qv_F + \hbar q^2/2m^* \\
 = & 0, \quad \omega \geq qv_F + \hbar q^2/2m^* \quad (2.43)
 \end{aligned}$$

onde o vetor de onda de blindagem q_{TF} é dado pelo resultado de Thomas-Fermi:

$$q_{TF} = \left(\frac{6\pi n e^2}{E_F} \right)^{1/2} = \sqrt{3} \frac{\omega_p}{v_F} \quad (2.44)$$

Na equação acima $\omega_p = (4\pi n e^2/m)^{1/2}$ é a frequência de plasma. Para pequenos q e para baixas frequências onde $\omega \lesssim qv_F$, ε é aproximadamente:

$$\varepsilon(q, 0) \cong 1 + \frac{q_{TF}^2}{q^2} \quad (2.45)$$

Determinando-se os pólos de $\text{Im}[1/\varepsilon(q, \omega)]$, descobre-se quais são as frequências ressonantes do sistema, que por sua vez correspondem a frequência de plasma no caso do gás de elétrons livres. Os pólos podem ser determinados calculando-se:

$$\text{Re}[\varepsilon(q, \omega_q)] = 0 \quad (2.46)$$

onde ω_q representa a relação de dispersão do plasmon (quantum da oscilação de plasma). No segundo termo da equação (2.39), pode-se mudar os índices da

seguinte forma: $k \rightarrow -(q+k)$; $(q+k) \rightarrow -k$, desta maneira obtém-se:

$$\begin{aligned} \text{Re}[\varepsilon(q, \omega)] &= 1 - \frac{4\pi e^2}{\hbar q^2} \sum_{k, \sigma} \frac{n(\mathbf{k}) \omega(q, k)}{\omega^2 - \omega(\mathbf{q}, \mathbf{k})^2} = \\ &= 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \sum_{k, \sigma} n(\mathbf{k}) \left(\frac{1}{\omega - \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m} - \frac{\hbar q^2}{2m}} - \frac{1}{\omega + \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m} + \frac{\hbar q^2}{2m}} \right). \end{aligned} \quad (2.47)$$

Se agora trocar-se $k \rightarrow -k$ no segundo termo da equação acima determina-se a seguinte equação:

$$\text{Re}[\varepsilon(q, \omega)] = 1 - \frac{4\pi e^2}{m^*} \sum_{k, \sigma} \frac{n(\mathbf{k})}{\left(\omega - \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{m}\right)^2 - \left(\frac{\hbar q^2}{2m}\right)^2} \quad (2.48)$$

Para determinar a relação de dispersão do plasmon, considera-se que $(\omega \gg \omega_{n0})$ e desta forma pode-se expandir $\text{Re}[\varepsilon(q, \omega)]$.

$$\text{Re}[\varepsilon(q, \omega)] = 1 - \frac{4\pi e^2}{m^*} \sum_n \frac{f_{0n}}{\omega^2} - \frac{4\pi e^2}{m^*} \sum_n \frac{f_{0n} \omega_{n0}^2}{\omega^4} + \dots \quad (2.49)$$

Usando-se a regra de soma (*f-sum rule*), que diz

$$\sum_n f_{n0} = \sum_n \frac{2m^*}{\hbar q^2} \omega_{n0} | \langle n | \rho_q | 0 \rangle |^2 = N \quad (2.50)$$

onde N é o número total de partículas.

$$\text{Re}[\varepsilon(q, \omega)] = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} - \frac{4\pi e^2}{m^*} \sum_n \frac{f_{0n} \omega_{n0}^2}{\omega^4} + \dots \quad (2.51)$$

Se considerar-se que $\omega \simeq \omega_p \gg \omega_{n0}$ e igualando-se a eq.(2.51) a zero determina-se:

$$\omega_q \simeq \omega_p \left(1 + \frac{3}{10} \frac{q^2 v_F^2}{\omega_p^2} + \dots \right) \quad (2.52)$$

Para o caso de elétrons (ou buracos) movendo-se através de um cristal perfeito, dentro da banda de condução (valência), estes sofrerão espalhamento de luz intrabandas via os termos $|A|^2$ (2.26). O termo p.A usado em teoria de

perturbação de segunda ordem produzirá transições virtuais intrabandas e interbandas. O efeito das transições virtuais interbandas é o de produzir espalhamento real interbandas e intrabandas de elétrons (buracos) de Bloch acompanhados por absorção de um fóton e emissão de outro. O espalhamento produzido por transições reais intrabandas é proporcional a dois termos que possuem denominadores da forma $\omega_G - \omega_L$ e $\omega_G + \omega_S$, onde $\hbar\omega_G$ é a energia de um gap apropriado para as transições interbandas. Para q pequeno e para ω_L suficientemente menor que ω_G , os denominadores podem ser recolocados por ω_G^{-1} . As expressões resultantes combinadas com a contribuição de $|A|^2$, completando a expressão de massa efetiva de \mathbf{k}, \mathbf{p} , dão o seguinte Hamiltoniano de espalhamento:

$$H'_\rho = r_0 \mu A_L A_S^\dagger e^{-i\omega t} \rho_q + H.C. \quad (2.53)$$

para portadores em uma banda simples, onde $\mu = \mathbf{e}_L \cdot \tilde{\mu} \cdot \mathbf{e}_S$, com $\tilde{\mu}$ dado por m multiplicado pelo tensor massa efetiva. Quando a energia do fóton $\hbar\omega_L$ está próxima a energia do gap (2.53) deve ser multiplicado por um fator ressonante R_{LS}^2 , o qual para os portadores de massa leve (elétrons) é :

$$R_{LS}^2 \cong \frac{E_G^2}{E_G^2 - \hbar^2 \omega_L^2} \quad (2.54)$$

Com estas mudanças feitas, a RPA continua válida para a eficiência de espalhamento, a qual pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{d^2 S}{d\omega d\Omega} = \left(\frac{\omega_S}{\omega_L} \right)^2 R_{LS}^2 \mu^2 r_0^2 (1 + n_\omega) \left(\frac{\hbar q^2}{4\pi e^2} \right) \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon} \right] \quad (2.55)$$

A equação (2.55) não é completa, pois não inclui os efeitos causados pelos fônons. Determinando-se a função resposta $R(q, \omega)$ para o sistema no qual estão presentes estes efeitos, pode-se calcular a eficiência de espalhamento usando-se (2.55).

Em semicondutores, os melhores exemplos de plasmas ocorrem em compostos $III - V$ dopados uniformemente do tipo-n. Estes são cristais polares, os quais devem ser considerados o acoplamento do plasma eletrônico com o fônon LO. Em RPA, a função dielétrica longitudinal total é dada por:

$$\varepsilon(q, \omega) = \varepsilon_\infty + \chi(q, \omega) + \chi_L(\omega) \quad (2.56)$$

onde

$$\chi_L(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} \quad (2.57)$$

é a contribuição da rede polar para a suscetibilidade. Na equação acima, ω_{LO} e ω_{TO} denotam as frequências dos fônons longitudinais óticos e transversais óticos, respectivamente. Desprezando-se os efeitos de dispersão, ou seja, no limite de $q \rightarrow 0$, determina-se que $\chi(q, \omega)$ toma a forma de Drude.

$$\chi(q, \omega) = \chi(0, \omega) = -\varepsilon_\infty \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (2.58)$$

Como pode ser visto pela eq.(2.55), a eficiência de espalhamento é proporcional a $Im[-1/\varepsilon(q, \omega)]$ e seus picos aparecem quando $Re[\varepsilon(q, \omega)] = 0$. Combinando-se as equações (2.56-2.58) juntamente com a condição em que aparecem os picos determina-se as frequências para os modos acoplados, as quais são dadas por:

$$\omega_\pm^2 = \frac{1}{2} \{ (\omega_p^2 + \omega_{LO}^2) \pm [(\omega_p^2 - \omega_{LO}^2)^2 + 4\omega_p^2(\omega_{TO}^2 - \omega_{LO}^2)]^{1/2} \} \quad (2.59)$$

Desta forma, para semicondutores uniformemente dopados o espectro Raman apresenta dois modos L^+ e L^- correspondentes a frequências ω^+ e ω^- dadas pela eq.(2.59), como pode ser visto pela figura (2.1).

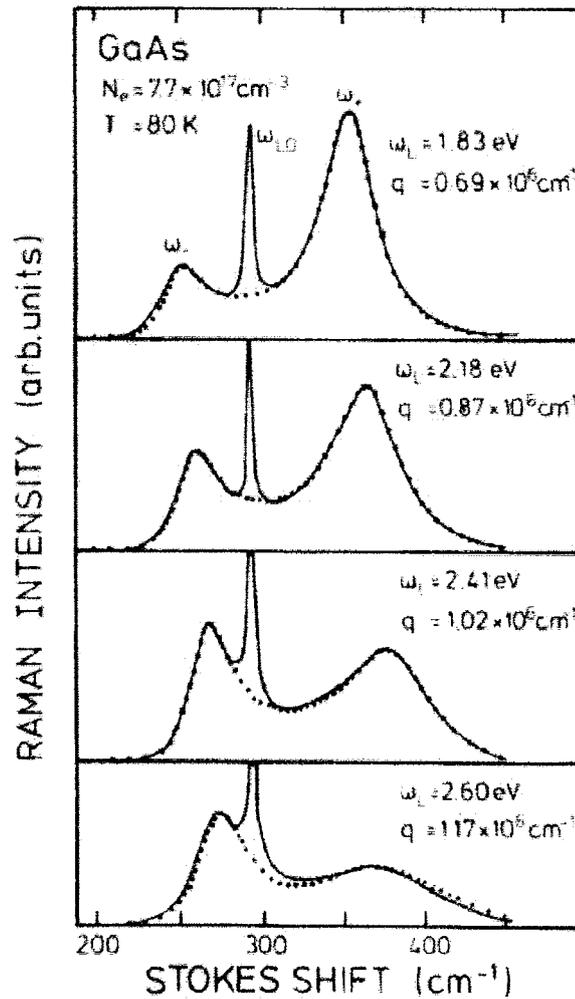


Figura 2.1: Espectro Raman para o GaAs uniformemente dopado do tipo-n, obtido na geometria de retroespalhamento usando-se diferentes energias de excitação, as linhas pontilhadas são os espectros calculados [14].

Capítulo 3

Estrutura eletrônica de uma super-rede δ -dopada.

3.1 Introdução.

Com o desenvolvimento das técnicas de crescimento epitaxial de cristais, tais como crescimento epitaxial por feixe molecular (MBE) ou crescimento epitaxial através de fase de vapor (VPE), possibilitou-se a fabricação de uma grande variedade de estruturas onde os elétrons podem ser quanticamente confinados em dimensões menores que três. Um tipo especial de confinamento, o qual será utilizado neste trabalho, é o chamado dopagem planar ou δ -doping. Para construir tal estrutura deve-se dopar o cristal semiconductor de forma que os átomos dopantes fiquem distribuídos estatisticamente num único plano do cristal hospedeiro. Portanto ao dopar-se GaAs com Si planarmente, cria-se um potencial V e um gás de elétrons confinado neste potencial, dando assim origem a um gás de elétrons quase-bidimensional. Entende-se por um gás de elétrons quase-bidimensional,

aquele no qual os elétrons possuem níveis de energia quantizados numa direção, mas são livres nas outras. Nas direções onde os elétrons são livres tem-se que o vetor de onda é um bom número quântico.

Quando o cristal é dopado através de uma sequência periódica de planos, o que é conhecido como super-rede δ -dopada, forma-se um sistema que não é estritamente bidimensional, pois a função de onda do elétron se estende na direção em que este estaria em princípio ligado, dependendo do período e da concentração de impurezas. A grande dificuldade de tratar tal sistema de muitos elétrons está no fato deles constituírem um sistema de muitos corpos.

Na descrição de um sistema de muitos corpos interagentes, como elétrons num sólido por exemplo, tem-se dificuldades na determinação da função de onda do sistema. Para tentar contornar estas dificuldades, Hartree e Fock fizeram algumas aproximações, as quais também são conhecidas como método auto-consistente. Uma outra aproximação foi proposta por Thomas [15] em 1927 e Fermi [16] em 1928, a qual é baseada na densidade de elétrons do sistema, esta por sua vez possuindo um formalismo bastante simples e a vantagem de consumir pequena quantidade de tempo computacional.

3.2 A aproximação de Thomas-Fermi.

Quando a densidade eletrônica $n(\vec{r})$, ou o potencial que a gera, varia de uma pequena fração sobre um comprimento de onda eletrônico característico, a aproximação de Thomas-Fermi se constitui em um método bem eficaz. Mesmo quando tal condição não se verifica, por exemplo próximo ao núcleo do átomo, onde o

potencial se torna singular, existe um regime da validade da teoria, a qual é denominada de limite estatístico de muitos elétrons. Existem, portanto, dois limites de validade para a aproximação de Thomas-Fermi: o limite de densidade variando lentamente e o de altas densidades.

O objetivo da aproximação de Thomas-Fermi é de fornecer um método em que a densidade eletrônica seja obtida a partir de um potencial efetivo $V_{ef}(\mathbf{r})$. Como a teoria de Thomas-Fermi parte das relações de um gás de elétrons uniforme tridimensional, deve-se primeiramente determinar o comportamento deste, para depois generalizá-lo.

Para tal fim, considera-se um gás de elétrons uniforme a $T=0K$ composto de N elétrons de massa efetiva m^* localizados numa caixa de volume V , onde sua densidade média é dada por:

$$n_0 = \frac{N}{V} \quad (3.1)$$

No estado fundamental todos os estados estão preenchidos até um estado de energia máxima e todos acima deste estão vazios. Pode-se portanto representar estes estados por pontos no interior de uma esfera no espaço k , de raio $k = k_F$, onde k_F é o módulo do vetor de onda de Fermi do sistema. Tem-se então que o número de elétrons é dado pelo volume da esfera dividido pelo volume elementar do espaço k dado por:

$$N = 2 \frac{4\pi \frac{k_F^3}{3}}{(2\pi)^3} = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3 \quad (3.2)$$

onde o fator 2 se deve ao fato de que cada estado k possui dois níveis eletrônicos (um para cada spin). A densidade eletrônica pode ser escrita em função de k_F

da seguinte forma:

$$n_0 = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (3.3)$$

Para um gás de elétrons não homogêneo pode-se generalizar as equações acima supondo que permaneçam válidas localmente para cada posição \vec{r} , portanto:

$$n(\vec{r}) = \frac{k_F^3(\vec{r})}{3\pi^2} \quad (3.4)$$

Supõe-se agora que a energia de Fermi local na posição \vec{r} seja igual a energia de Fermi (potencial químico a $T = 0K$) subtraída da energia potencial eletrostática efetiva tomada neste ponto, ou seja:

$$E_F - V_{ef}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n(\vec{r}))^{2/3} \quad (3.5)$$

A equação de Thomas-Fermi para a energia potencial eletrostática vista por um elétron é obtida usando-se a equação de Poisson,

$$\nabla^2 V_{ef}(\vec{r}) = -\frac{4\pi e^2 n(\vec{r})}{\epsilon_0} \quad (3.6)$$

em conjunção com a equação (3.5). Na equação acima ϵ_0 denota a constante dielétrica do semiconductor.

Para levar-se em conta os efeitos da temperatura deve-se generalizar as equações acima usando-se a distribuição de Fermi:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} + 1} \quad (3.7)$$

onde $f(\epsilon)$ é a probabilidade que um estado de energia ϵ esteja ocupado, k_B é a constante de Boltzmann e μ o potencial químico que no limite de temperatura tendendo a zero $\mu = E_F$. Para um gás ideal em equilíbrio térmico, tem-se que o

número de partículas é dado por:

$$N = \sum_{\epsilon} f(\epsilon) = \sum_{\epsilon} \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} + 1} \quad (3.8)$$

Usando-se novamente a aproximação de que a equação seja válida localmente para cada posição \vec{r} , tem-se a seguinte equação:

$$n(\vec{r}) = \sum_{\epsilon} \frac{1}{e^{(\epsilon(\vec{r})-\mu)/k_B T} + 1} \quad (3.9)$$

A energia total ϵ pode também ser escrita como sendo a diferença de duas parcelas, uma parte cinética e outra potencial, da mesma forma que foi feito em (3.5).

$$\epsilon(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - V_{ef}(\vec{r}) \quad (3.10)$$

Substituindo-se (3.10) em (3.9) e reescrevendo a equação (3.9) em termos do momento, fica-se com a seguinte equação:

$$n(\vec{r}) = 2 \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - V_{ef}(\vec{r}) - \mu)/k_B T} + 1} \quad (3.11)$$

onde o fator 2 é devido ao spin.

3.3 Aplicação à super-rede dopada planarmente.

A aplicação da aproximação de Thomas-Fermi foi usada pela primeira vez num semiconductor dopado planarmente por Ioriatti [17], que mostrou uma ótima concordância com o método auto-consistente, depois também foi usada em super-redes [18], [19].

Para o caso de um delta isolada localizada em $z = 0$ e $T=0K$, onde z é a coordenada perpendicular ao plano de dopagem, a equação que resulta para este

sistema é determinada através de (3.5) e (3.6). Para incluir os efeitos da temperatura tem-se que substituir a eq.(3.11) em (3.5) e (3.6). Escolhe-se um sistema de unidades naturais de distância e energia introduzindo-se o raio de Bohr efetivo a_0^* e o Rydberg efetivo $Ry^* = \frac{e^2}{2\epsilon_0 a_0^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*(a_0^*)^2}$, que para o GaAs são 97,43 Å e 5,92 meV, respectivamente. Portanto a equação para o potencial eletrostático para o caso de uma delta isolada a T=0K é dado por:

$$\frac{d^2 V_{ef}}{dz^2} = -\frac{8}{3\pi} (E_F - V_{ef}(z))^{3/2} + 8\pi n_d \delta(z) \quad (3.12)$$

onde n_d é o número de doadores por unidade de área de Bohr efetiva e a função delta de Dirac representa o plano de impurezas. Para o caso de temperatura finita deve-se fazer as mudanças na densidade de carga como está descrito em (3.11) e o resultado fica sendo igual a:

$$\frac{d^2 V_{ef}}{dy^2} = \frac{4\tau^{1/2}}{\pi} F_{1/2}(V_{ef}) - \frac{8\pi}{\tau} n_d \delta(y) \quad (3.13)$$

onde

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{\hbar^2}{(k_B T) 2m^* a_0^*} & V_{ef} &= \tau(\mu - V(z)) \\ y &= \frac{z}{a_0^*} & F_{1/2} &= \int_0^\infty \frac{t^{1/2} dt}{e^{t-V_{ef}} + 1} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Do fato que $F_{1/2}(V_{ef})$ não poder ser numericamente computada através de método simples de integração, procurou-se determiná-la por meio de um método semi-analítico desenvolvido na referência [20].

A super-rede por sua vez consiste numa estrutura onde é feita a deposição de maneira periódica de camadas dopantes, neste caso os planos de Si. Como a super-rede possui um potencial periódico por construção, vale o teorema de Bloch em primeira aproximação. A estrutura deste sistema pode ser determinada

considerando-se somente uma cela do potencial, $-a/2 \leq z \leq a/2$, onde a é o parâmetro de super-rede e em $z = 0$ tem-se o plano de Si. Sendo assim a equação a ser resolvida é a mesma que foi desenvolvida no modelo de Thomas-Fermi para uma delta isolada. Entretanto deve-se usar uma condição de contorno diferente, isto é $\frac{dV_{ef}(La/2)}{dz} = 0$, onde $L=3,5,7\dots$, a qual leva em conta a presença de outros planos de impurezas simetricamente localizados.

Deve-se considerar que durante o processo de crescimento do semiconductor hospedeiro, os átomos que constituem o sólido vão ligando-se tetraédricamente uns aos outros. Entretanto, na interface vácuo-semiconductor, existem estados eletrônicos fortemente localizados, os quais estão associados às ligações pendentes (não saturadas). Sabe-se que a energia de ligação destes estados localiza-se aproximadamente no meio do gap do material hospedeiro, portanto para que os efeitos da interface sejam considerados deve-se impor a condição de que a energia potencial efetiva em $z = 0$ seja igual a metade da energia do gap $V_{ef}(0) = E_G/2$, para o GaAs a energia do Gap é $E_G = 1520meV$ a $T = 0K$ e $E_G = 1420meV$ a $T = 300K$. Vale mencionar que os resultados a $T=0K$ e $T=300K$ apresentados a seguir neste capítulo foram primeiramente determinados por Barbosa [18],[19] e Degani [21], entretanto os resultados que levam em conta a camada de depleção são originais deste trabalho. As características do sistema usado neste trabalho seguem as mesmas que foram utilizadas por Nunes, Ioriatti *et al* [8],[7], o qual basicamente constitui de uma sequência periódica de planos dopados planarmente de Si separados por uma camada de GaAs intrínseco. Tem-se 11 períodos separados igualmente de uma distância $a = 500\text{Å}$ e densidade de doadores $n_d = 1.0 \times 10^{12}cm^{-2}$.

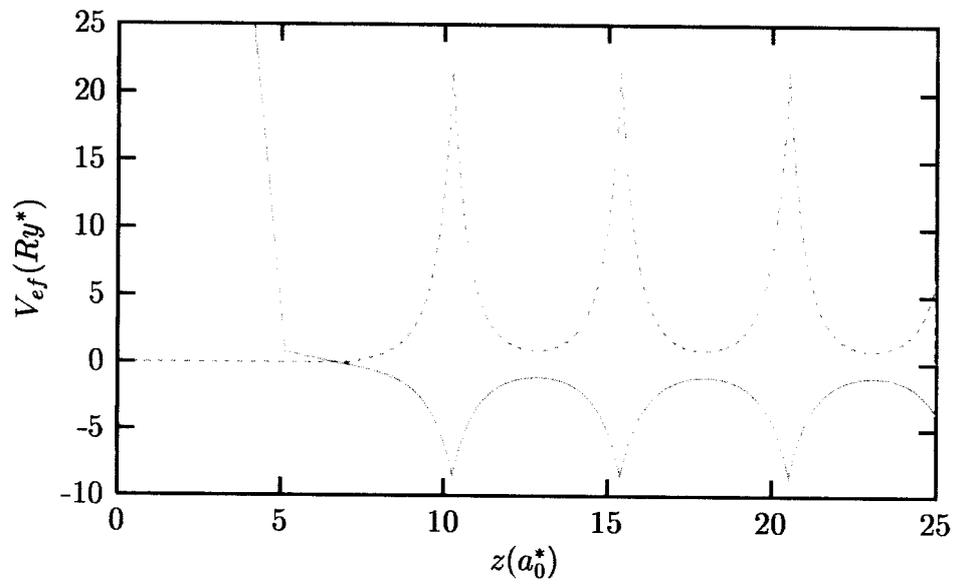


Figura 3.1: A curva em vermelho representa o potencial da super-rede calculado a $T=0K$. A curva azul a respectiva densidade eletrônica em unidades reduzidas e $\mu = 0$.

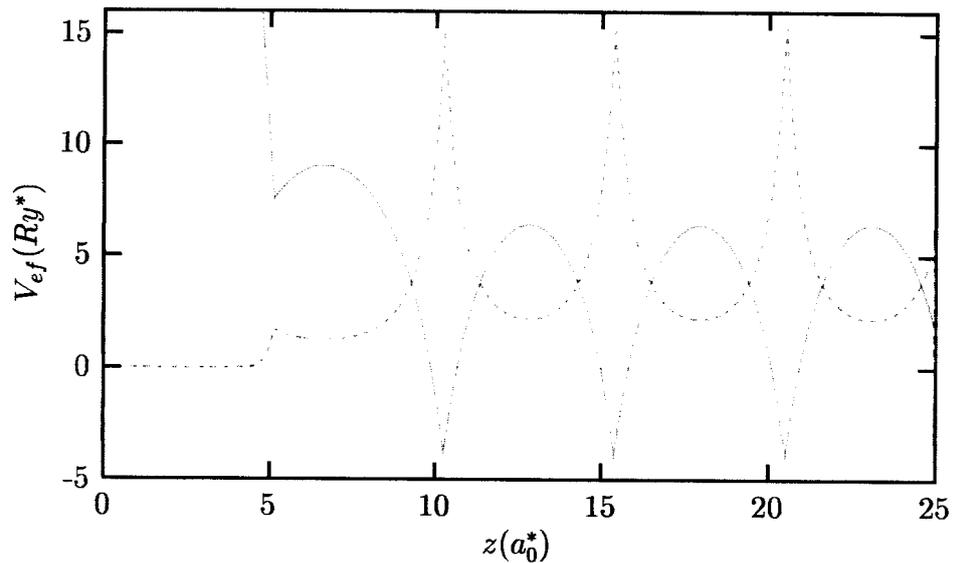


Figura 3.2: A curva em vermelho representa o potencial da super-rede calculado a $T=300K$. A curva azul a respectiva densidade eletrônica em unidades reduzidas e $\mu = 0$.

As figs.(3.1) e (3.2) mostram que o efeito da interface é o de depletar os elétrons da primeira camada dopada localizada a 500\AA da interface. Entretanto, a periodicidade do potencial a partir da camada depletada é praticamente inalterada tanto a $T = 0K$ como a $T = 300K$.

Nos experimentos realizados em super-redes dopadas planarmente [7], [8] é observado uma linha que corresponde ao fônon LO do GaAs intrínseco, como pode ser visto na fig.(1.1), este pico está relacionado aos efeitos causados pela interface. Como os elétrons são depletados da primeira camada, estes não participam do acoplamento com o fônon LO, desta forma surge a linha do fônon LO do GaAs intrínseco. Conhecendo-se o tamanho da camada de depleção pode-se determinar a razão entre a intensidade da linha devida ao material intrínseco e a intensidade da linha deslocada. Pode-se determinar esta razão da seguinte maneira. Considerando primeiramente a intensidade da linha intrínseca, a qual é dada por:

$$I_{LO} = \sigma_0 \int_0^d e^{-2\alpha x} dx = \frac{\sigma_0(1 - e^{-2\alpha d})}{2\alpha} \quad (3.15)$$

onde d é o tamanho da camada de depleção, α o coeficiente de absorção e σ_0 é a intensidade total. Considerando agora a intensidade da linha proveniente da parte da amostra em que os elétrons não foram depletados:

$$I_1 = \sigma_0 \int_d^\infty e^{-2\alpha x} dx = \frac{\sigma_0 e^{-2\alpha d}}{2\alpha} \quad (3.16)$$

o limite superior da integral da equação acima pode ser colocado com sendo igual a ∞ , pois o coeficiente de absorção $\alpha = 4 \times 10^4 \text{cm}^{-1}$ para este sistema diz que a luz é totalmente absorvida em 2500\AA , mas a amostra usada é muito maior do que esta distância (11 períodos de 500\AA). A razão entre as intensidades pode ser

escrita como:

$$\frac{I_1}{I_{LO}} = \frac{1}{e^{2\alpha d} - 1} \quad (3.17)$$

Ao analisar a fig. (1.1) nota-se que o resultado experimental do espectro despolarizado, parece apresentar uma seção de choque total a qual é composta por duas Lorentzianas, onde cada uma possui um alargamento e deslocamento de energia próprio. Portanto, pode-se relacionar este resultado com a seção de choque de espalhamento definida na eq.(2.22). A razão entre as intensidades das linhas é obtida ao calcular-se a razão entre as seções de choque, ou seja, calculando-se a razão entre as áreas das duas curvas. No caso de temperatura ambiente a razão entre a curva de menor intensidade e a de maior intensidade é de aproximadamente 1.5. Através da eq.(3.17) determina-se o tamanho da camada de depleção da ordem de 640Å. O tamanho da camada de depleção calculado corresponde aproximadamente a região onde o potencial da super-rede fica periódico, como pode ser visto na fig.(3.2), o que mostra que as aproximações feitas são coerentes com os resultados experimentais. No caso T=0K não existe resultado experimental para a razão entre as linhas.

3.4 Estrutura de minibandas.

Uma vez resolvido o potencial efetivo dentro da cela pode-se determinar a estrutura eletrônica da super-rede resolvendo-se a equação de Schrödinger na aproximação de massa efetiva. As funções de onda nas direções x, y são ondas planas, considerando uma distribuição uniforme de carga em primeira aproximação. Enquanto que para a coordenada z o sistema está sobre ação do potencial efetivo.

A equação de Schrödinger na direção z , em unidades reduzidas, é dada por:

$$\frac{d^2\Psi_{nq}}{dz^2} + V_{ef}(z)\Psi_{nq} = E_{nq}(q)\Psi_{nq} \quad (3.18)$$

Utilizando o teorema de Bloch pode-se escrever:

$$\Psi_{nq}(z) = e^{iqz}u_{nq}(z) \quad (3.19)$$

$$u_{np}(z) = u_{nq}(z + na) \quad (3.20)$$

Impondo-se condições de contorno periódicas nas soluções da equação de Schrödinger em um comprimento $L=Na$ (N é o número de períodos da super-rede e " a " o parâmetro de super-rede) de tal forma que a super-rede se feche num círculo, pode-se escrever a seguinte relação:

$$\Psi_{nq}(z + Na) = \Psi_{nq}(z) \quad (3.21)$$

onde $q = \frac{2\pi p}{Na}$, com p igual a um inteiro.

Neste tipo de formulação q é um número quântico que reflete a simetria translacional discreta do potencial. Por sua vez, o vetor de onda q está confinado na primeira zona de Brillouin e qualquer outro vetor q' pode ser escrito como $q' = q + G_z$, sendo G_z o vetor de onda da rede recíproca.

O índice n que aparece nas funções de onda é necessário, pois para um dado vetor de onda q existem muitas soluções distintas, ou seja, para cada n existe um conjunto de níveis eletrônicos dado por $E_n(q)$ que é chamado de minibanda de energia. Os diferentes valores permitidos para $E_n(q)$ são separados por lacunas (gaps) de energia.

Para determinar-se a estrutura de minibandas deste sistema tem-se que resolver a equação (3.18). Escolhendo-se a origem do sistema de coordenadas de modo

que a energia potencial seja par, a equação de Schrödinger para uma dada energia E admite duas soluções linearmente independentes dentro da cela unitária, que podem ser escolhidas tendo simetria par ou ímpar, denotadas por $\psi_p(z)$ e $\psi_i(z)$ respectivamente. Para estas soluções pode-se supor as seguintes condições de contorno:

$$\begin{aligned} \psi_i(0) &= 0 & \frac{d\psi_i}{dz}\Big|_0 &= 1 \\ \psi_p(0) &= 1 & \frac{d\psi_p}{dz}\Big|_0 &= 0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

cujo wronskiano para todo z é:

$$W = \psi_p(z)\dot{\psi}_i(z) - \psi_i(z)\dot{\psi}_p(z) = 1 \quad (3.23)$$

onde $\dot{\psi} = \frac{d\psi}{dz}$.

Com estas condições pode-se resolver a equação (3.18) por meio de métodos numéricos padrões (Runge-Kutta de 4ª ordem). A solução mais geral, no intervalo $|z| \leq a/2$, para uma dada energia E pode ser escrita como:

$$\psi(z) = \alpha\psi_p(z) + i\beta\psi_i(z) \quad (3.24)$$

com α e β constantes arbitrárias. Usando-se o teorema de Bloch em (3.24) determina-se a seguinte equação:

$$\beta = \alpha \left(\frac{e^{iqa} - 1}{e^{iqa} + 1} \right) \frac{\psi_p(a/2)}{\psi_i(a/2)} \quad (3.25)$$

Impondo-se a continuidade da função de onda e de sua derivada em $z = a/2$, verifica-se que para cada valor E da energia tem-se:

$$\cos(qa) = \psi_p(a/2)\dot{\psi}_i(a/2) + \psi_i(a/2)\dot{\psi}_p(a/2) = F(E) \quad (3.26)$$

As energias permitidas são aquelas tais que a função $F(E)$ satisfaz a equação (3.26), ou seja, estão entre $-1 \leq F(E) \leq 1$. Para determinar a constante α , usa-se a normalização de $|\psi(z)|^2$.

$$|\alpha|^2 \int_{-a/2}^{a/2} \left[|\psi_p(z)|^2 + \frac{1 - F(E)}{1 + F(E)} \left(\frac{\psi_p(a/2)}{\psi_i(a/2)} \right)^2 |\psi_i(z)|^2 \right] dz = 1 \quad (3.27)$$

com $F(E)$ satisfazendo (3.26). Assim as auto-funções são determinadas univocamente. Portanto uma vez determinado o potencial efetivo dentro de uma cela, a qual apresenta periodicidade, pode-se determinar toda a estrutura eletrônica do sistema usando-se a equação (3.26). A estrutura de minibandas pode ser determinada numericamente calculando-se as energias permitidas, as quais satisfazem $-1 \leq F(E) \leq 1$ e discretizando-se os vetores de onda q em 11 pontos e resolvendo-se a eq.(3.26).

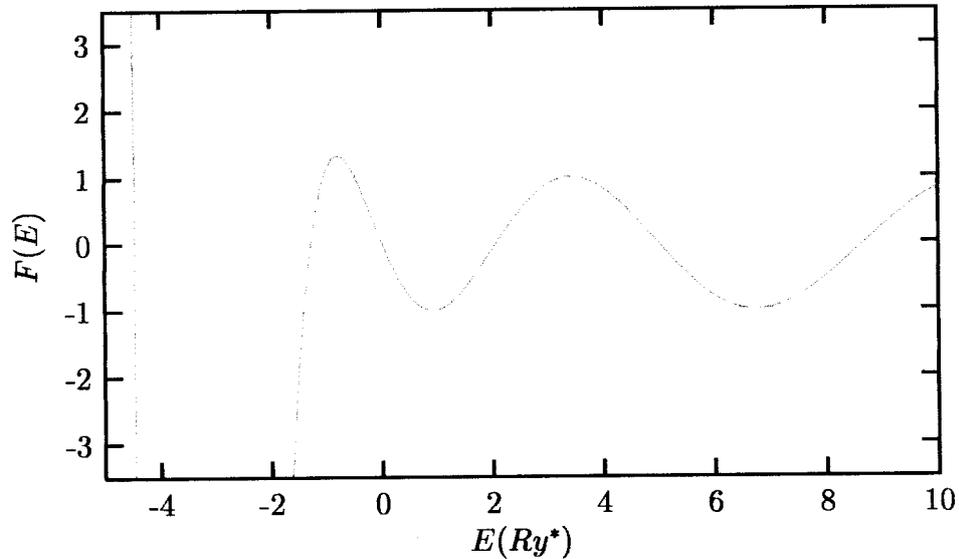
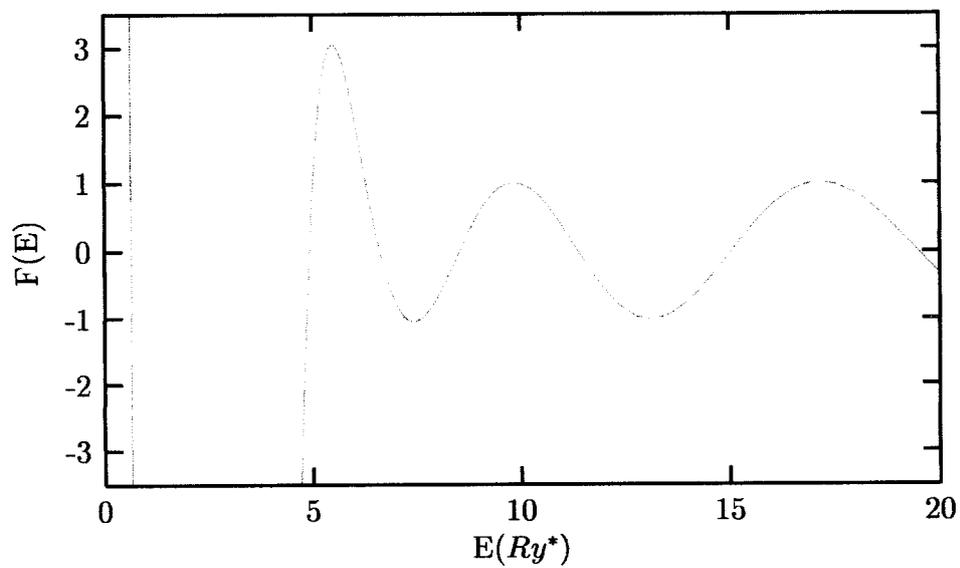
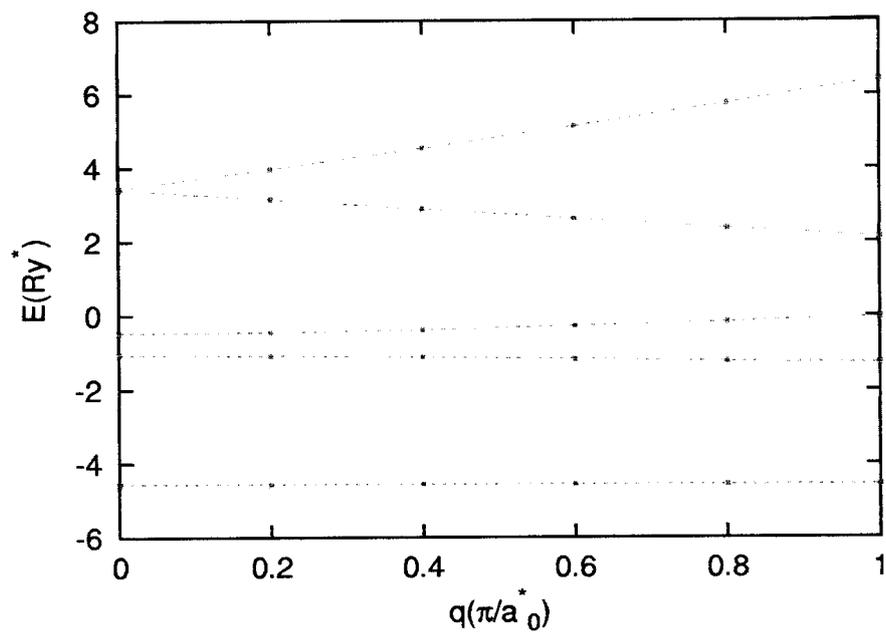


Figura 3.3: Gráfico da função $F(E)$ a $T=0K$.

Figura 3.4: Gráfico da função $F(E)$ a $T=300K$.Figura 3.5: Gráfico da estrutura de minibandas a $T=0K$, com $\mu = 0$.

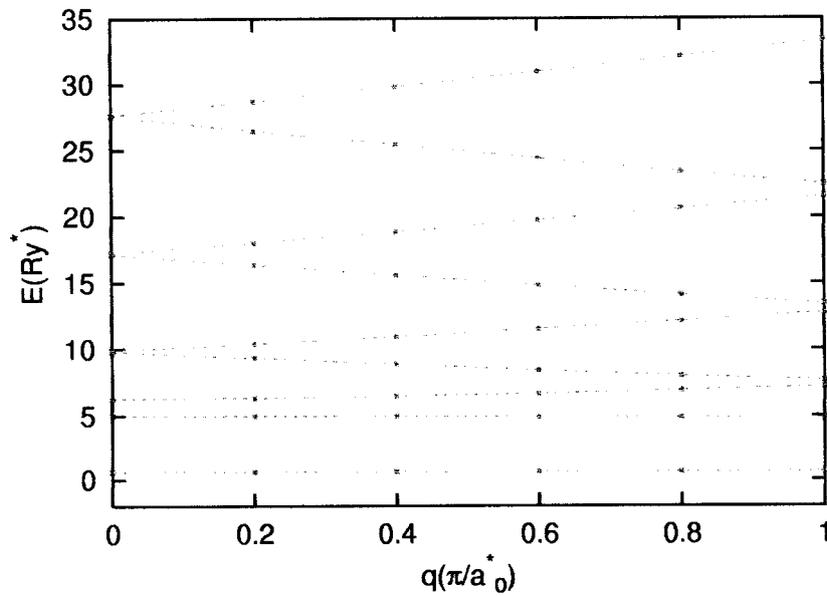


Figura 3.6: Gráfico da estrutura de minibandas a $T=300K$, com $\mu = 0$.

Em $T=300K$ foram colocadas 9 minibandas, enquanto que a $T=0K$ utilizou-se somente 5, o intuito desta diferença é a preservação da regra de soma, a qual está intimamente ligada a densidade eletrônica. Para o caso $T = 0K$ fig.(3.5) existem três minibandas ocupadas, ou seja, abaixo da energia de Fermi. A minibanda de mais baixa energia corresponde a 76% da ocupação total dos estados disponíveis, a qual não apresenta dispersão. Quando o sistema está a temperatura ambiente, as bandas ficam parcialmente ocupadas. A banda de energia mais baixa possui 46% de todos os portadores livres de carga, esta por sua vez não apresenta dispersão. As outras minibandas tanto a $T=0K$ com a $T=300K$ apresentam um comportamento de um quase contínuo de estados eletrônicos. Desta forma conclui-se que o gás de elétrons formado por esta estrutura constitui um sistema híbrido onde coexistem um gás de caráter estritamente bidimensional, o qual corresponde a primeira minibanda, e outro de caráter quase-tridimensional análogo a um sistema uniformemente dopado.

Capítulo 4

Determinação da auto-energia do fônon LO.

4.1 Introdução.

Neste capítulo será desenvolvido o modelo teórico para o cálculo da auto-energia do fônon LO de momento q ao longo do eixo da super-rede e será mostrado que este está diretamente relacionado com o mecanismo flutuação de densidade de carga do gás de elétrons. Apresenta-se também uma maneira de incluir amortecimento nas flutuações de densidade de carga sem que haja a quebra da lei de conservação de carga. Depois será considerado o sistema de elétrons interagentes e será demonstrado a equivalência deste sistema com um conjunto de osciladores harmônicos forçados e acoplados. Finalmente as equações para o deslocamento e alargamento de energia para o sistema eletrônico interagente serão determinadas.

4.2 Expressões para ΔE_0 e Γ .

Nesta seção deseja-se determinar as auto-energias do fônon LO devido a interação entre este e as excitações eletrônicas num regime onde a interação elétron-fônon pode ser considerada como sendo fraca. O acoplamento elétron-fônon pode ser dito fraco, pois ao analisar a fig.(1.1) vê-se que o deslocamento de energia causado por este acoplamento é muito menor que a própria energia do fônon LO, caracterizando-se desta forma uma perturbação no sistema. Por isso as auto-energias do fônon podem ser definidas utilizando-se teoria de perturbação de 2ª ordem, pois o termo em 1ª ordem é nulo.

$$\Delta E = \sum_I \frac{|\langle I|V|0 \rangle|^2}{E_0 - E_I} \quad (4.1)$$

onde E_0 é a energia do estado inicial e E_I a energia dos estados intermediários, entretanto considerando-se E_0 como sendo complexo, $E_0 = E_0 + i\eta$ com $\eta \rightarrow 0+$. A parte real de (4.1) dá o deslocamento de energia ΔE_0 enquanto que a parte imaginária dá o alargamento $-\Gamma/2$, ou seja:

$$\Delta E_0 = \text{Re}(\Delta E) = \sum_I \frac{|\langle I|V|0 \rangle|^2 (E_0 - E_I)}{(E_0 - E_I)^2 + \eta^2} \quad (4.2)$$

$$\frac{\Gamma}{2} = -\text{Im}(\Delta E) = \sum_I \frac{|\langle I|V|0 \rangle|^2 \eta}{(E_0 - E_I)^2 + \eta^2} \quad (4.3)$$

Que no limite de $\eta \rightarrow 0$ resultam em:

$$\Delta E_0 = \sum_I \frac{|\langle I|V|0 \rangle|^2}{(E_0 - E_I)} \quad (4.4)$$

$$\frac{\Gamma}{2} = \pi \sum_I |\langle I|V|0 \rangle|^2 \delta(E_0 - E_I) \quad (4.5)$$

As equações acima representam o deslocamento de energia em teoria de perturbação e o alargamento dado pela regra de ouro de Fermi usual. A interação

que acopla as excitações eletrônicas com os fônons LO é devida ao potencial de Fröhlich, o qual pode ser escrito como:

$$V_F = iM_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{q}} (a_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} - a_{\mathbf{q}}^{\dagger} \rho_{\mathbf{q}}) \quad (4.6)$$

onde $\rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} = \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} C_{\vec{k}}$ e $a_{\mathbf{q}}$, $a_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ são os operadores de destruição e criação de fônons, respectivamente e

$$M_{\mathbf{q}} = \frac{1}{|\mathbf{q}|} \sqrt{\frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{LO}}{V} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)}$$

com V sendo o volume do sistema.

4.3 Cálculo do deslocamento de energia para um fônon.

Necessita-se primeiramente definir qual é o deslocamento de energia causado pela presença de um fônon de momentum $\mathbf{q} = q\hat{z}$ ao longo do eixo da super-rede. Para definir-se este deslocamento considera-se o sistema em duas configurações distintas, primeiro o sistema sem nenhum fônon e segundo o sistema possuindo um fônon.

No primeiro caso tem-se a seguinte configuração inicial $|0\rangle = |0_q, i\rangle$, sendo i um estado eletrônico qualquer com energia E_i e onde 0_q denota nenhum fônon.

Usando-se a equação (4.1) com o potencial dado por (4.6), obtém-se:

$$\begin{aligned} \Delta E_{0q} &= M_{\mathbf{q}}^2 \sum_I \frac{|\langle I | (a_{\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}^{\dagger} - a_{\mathbf{q}}^{\dagger} \rho_{\mathbf{q}}) | 0_q, i \rangle|^2}{(E_0 - E_I)} = \\ &= -M_{\mathbf{q}}^2 \sum_f \frac{|\langle f | \rho_{\mathbf{q}} | i \rangle|^2}{(E_f - E_i + \hbar\omega_0)} \end{aligned} \quad (4.8)$$

onde o índice f designa um estado eletrônico de energia E_f e $\hbar\omega_o$ é a energia do fônon.

Considerando-se agora o outro caso, tem-se que o estado inicial é dado por $|0\rangle = |1_q, i\rangle$, aqui 1_q denota um fônon de momentum q . Calculando-se ΔE_{1q} , o deslocamento para um fônon, determina-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}\Delta E_{1q} &= M_q^2 \sum_I \frac{|\langle I | (a_q \rho_q^\dagger - a_q^\dagger \rho_q) | 1_q, i \rangle|^2}{(E_0 - E_I)} = \\ &= M_q^2 \sum_f \left[\frac{|\langle f | \rho_q^\dagger | i \rangle|^2}{(E_i - E_f + \hbar\omega_o)} - 2 \frac{|\langle f | \rho_q | i \rangle|^2}{(E_f - E_i + \hbar\omega_o)} \right]\end{aligned}\quad (4.9)$$

Portanto o deslocamento de energia dado por um fônon é igual ao dado pelo deslocamento causado pela presença de um fônon no sistema menos o deslocamento causado sem a presença do fônon no sistema, ou seja,

$$\Delta E = \Delta E_{1q} - \Delta E_{0q} = \frac{M_q^2}{\hbar} \sum_f \left[\frac{|\langle f | \rho_q^\dagger | i \rangle|^2}{(\omega_o - \omega_{fi})} - \frac{|\langle f | \rho_q | i \rangle|^2}{(\omega_{fi} + \omega_o)} \right]$$

com $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$. Supondo que o sistema possua invariância por reflexão, ou seja, invariante pela mudança $q = -q$ ao longo do eixo da super-rede, tem-se finalmente que o deslocamento de energia do fônon é igual a:

$$\Delta E = \frac{|M_q|^2}{\hbar} \sum_f \frac{2\omega_{fi} |\langle f | \rho_q^\dagger | i \rangle|^2}{(\omega_o^2 - \omega_{fi}^2)}\quad (4.10)$$

Para uma temperatura T diferente de zero a equação acima deve ser multiplicada por $n_\omega + 1$ onde $n_\omega = (e^{\beta\hbar\omega} - 1)^{-1}$, para a linha Stokes. O lado direito da equação (4.10) representa uma grandeza de fundamental importância, a qual é chamada de função resposta densidade densidade do gás de elétrons que pode ser definida da seguinte forma:

$$R(q, \omega) = \frac{1}{V\hbar} \sum_f \frac{2\omega_{fi} |\langle f | \rho_q^\dagger | i \rangle|^2}{(\omega^2 - \omega_{fi}^2)}\quad (4.11)$$

Note que $\frac{-1}{\pi} \text{Im}[R(q, \omega)]$ é idêntica a função $S(q, \omega)$ definida na eq.(2.31). Os estados $|i\rangle$ e $|f\rangle$ são estados de muitos corpos que contém o spin σ , o vetor de onda perpendicular a direção de crescimento da super-rede \mathbf{k}_{\parallel} , o vetor de onda na direção de crescimento \mathbf{k}_z e o índice de subbanda n . Pode-se calcular a expressão (4.11) para o caso em que os elétrons não interagem entre si. Supõe-se para este caso que a super-rede seja invariante por rotações em torno da direção z , desta forma considera-se somente o potencial externo que varia ao longo do eixo da super-rede (direção z). Supõe-se que a conservação do momento seja válida, ou seja, os estados que serão levados em conta são aqueles cuja a diferença de momento entre o estado final e inicial seja igual a q , com as considerações acima pode-se reescrever a função resposta da seguinte forma:

$$R(\omega) = \frac{1}{V\hbar} \sum_{\beta} N_{\beta\alpha} \frac{2\omega_{\beta\alpha} |\langle \alpha | e^{iqz} | \beta \rangle|^2}{(\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2)} \quad (4.12)$$

na qual

$$N_{\beta\alpha} = 2 \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} [n_{\alpha}(\mathbf{k}_{\parallel}) - n_{\beta}(\mathbf{k}_{\parallel})] \quad (4.13)$$

onde $n_{\alpha}(\mathbf{k}_{\parallel}) = [e^{(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2m} + \epsilon_{\alpha})/k_B T} + 1]^{-1}$ é o número de ocupação de Fermi e o fator 2 é devido as configurações de spin. O número quântico $|\lambda\rangle$ denota o estado eletrônico pertencente a uma minibanda n com energia ϵ_{λ} e função de onda $\psi_{\lambda}(z)$, com ($\lambda = \alpha$ ou β).

4.4 Mecanismo flutuação densidade de carga para um gás de elétrons não-interagentes.

O significado físico de $R(\omega)$ pode ser obtido ao observar qual é a flutuação de densidade $\delta n(z, t)$ causada por uma perturbação da forma

$\delta V^{ext}(z, t) = \delta V_q^{ext} e^{iqz} e^{-i(\omega+i\eta)t}$, levando-se em conta somente os termos proporcionais a δV_q^{ext} , ou seja, apenas interessa o regime de resposta linear do sistema.

Multiplicando-se $\delta n(z, t)$ pela carga eletrônica $-e$ obtém-se a flutuação de densidade de carga. Considerando-se estados eletrônicos inicial $|\alpha\rangle$ e intermediários $|\beta\rangle$, com funções de onda $\psi_\alpha(z)$ e $\psi_\beta(z)$ respectivamente, determina-se $\delta n(z, t)$.

$$\delta n(z, t) = \sum_{\alpha, \mathbf{k}_{\parallel}, \sigma} n_\alpha (\psi_\alpha^*(z) \delta \psi_\alpha(z, t) + \psi_\alpha(z) \delta \psi_\alpha^*(z, t)) \quad (4.14)$$

onde n_α é o número de ocupação de Fermi.

Para determinar $\delta \psi_\alpha(z, t)$ usa-se teoria de perturbação dependente do tempo, onde a perturbação é $\delta V(z, t)$. O estado final pode ser escrito da seguinte forma:

$$\Psi(z, t) = e^{-i\frac{E_\alpha t}{\hbar}} (\psi_\alpha(z) + \delta \psi_\alpha(z, t)) \quad (4.15)$$

onde

$$\delta \psi_\alpha(z, t) = \sum_{\beta \neq \alpha} c_\beta(t) e^{-i\frac{(E_\beta - E_\alpha)t}{\hbar}} \psi_\beta(z) \quad (4.16)$$

Para determinar $c_\beta(t)$ usa-se a seguinte equação:

$$c_\beta(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \langle \alpha | \delta V(z, t') | \beta \rangle \psi_\beta(z) e^{i\frac{(E_\beta - E_\alpha)t'}{\hbar}} dt' \quad (4.17)$$

Desta forma obtém-se o seguinte resultado para $\delta \psi_\alpha(z, t)$.

$$\delta \psi_\alpha(z, t) = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\langle \alpha | e^{iqz} | \beta \rangle \delta V_q^{ext}}{\hbar(\omega - \omega_{\beta\alpha} + i\eta)} \psi_\beta(z) e^{-i(\omega+i\eta)t} \quad (4.18)$$

onde $\omega_{\beta\alpha} = \frac{E_\beta - E_\alpha}{\hbar}$ é a frequência de Bohr associada ao par de transição (α, β) .

Ao considerar o par de transição (α, β) , deve-se também considerar o par de transição (α^*, β^*) , os quais possuem energia ϵ_α e ϵ_β e função de onda $\psi_\alpha^*(z)$ e $\psi_\beta^*(z)$, respectivamente. Esta consideração deve ser feita devido a invariância temporal da equação de Schrödinger, a qual diz que se um estado representado pela função de onda Ψ , com energia ϵ é solução, existe um outro estado, cuja a função de onda é Ψ^* , que também é solução com a mesma energia ϵ .

Considerando os pares de transição (α, β) e (α^*, β^*) , substituindo-se (4.18) no limite de $\eta \rightarrow 0$ em (4.14) e rearranjando-se os termos, obtém-se:

$$\delta n(z, t) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\beta, \alpha} \frac{2\omega_{\beta\alpha} \langle \alpha | e^{iqz} | \beta \rangle}{\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2} \psi_\alpha^*(z) \psi_\beta(z) \delta V_q^{ext} e^{-i\omega t} \quad (4.19)$$

Calculando-se a transformada de Fourier de (4.19) determina-se:

$$\delta n_q = \frac{1}{\hbar} \sum_{\beta, \alpha} N_{\beta\alpha} \frac{2\omega_{\beta\alpha} |\langle \alpha | e^{iqz} | \beta \rangle|^2}{\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2} \delta V_q^{ext} \quad (4.20)$$

onde

$$\begin{aligned} \delta n(z, t) &= \delta n_q e^{-i\omega t} \\ \delta n_q &= \frac{1}{V} \int e^{iqz} \delta n(z) dz \end{aligned} \quad (4.21)$$

Reescrevendo-se a equação (4.20) verifica-se que

$$R(q, \omega) = \frac{\delta n_q}{\delta V_q^{ext}} = \frac{1}{V\hbar} \sum_{\beta, \alpha} N_{\beta\alpha} \frac{2\omega_{\beta\alpha} |\langle \alpha | e^{iqz} | \beta \rangle|^2}{\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2} \quad (4.22)$$

a qual é exatamente a mesma equação dada por (4.12).

Conclui-se que a interpretação física que se dá a função resposta é a de que se o sistema está sob à ação de uma perturbação da forma de $\delta V^{ext}(\vec{z}, t) = \delta V_q^{ext} e^{iqz} e^{-i(\omega+i\eta)t}$, este produzirá uma flutuação de densidade de carga, a qual é

proporcional à perturbação. A função resposta é quem determina como a flutuação de densidade de carga responde à perturbação externa.

4.5 Amortecimento das flutuações de densidade.

O tratamento teórico de efeitos dissipativos são de grande importância em física, pois estes são difíceis de serem incorporados teoricamente. Entretanto como em todo sistema físico existe a presença de tais efeitos necessita-se da construção de modelos teóricos que contenham o amortecimento. Apresenta-se nesta seção a inclusão do amortecimento nas flutuações de densidade de carga.

Para incluir o amortecimento deve-se considerar a equação da continuidade, observando que a corrente local deve ser conservada.

$$\frac{\partial}{\partial t}n(\vec{z}, t) + \nabla \cdot \vec{J} = 0 \quad (4.23)$$

No caso em que não há perturbação externa o sistema não produz corrente, por isso só serão consideradas as flutuações de densidade como as flutuações de corrente. Somente o regime de resposta linear ao potencial externo será considerado nos cálculos. Pode-se escrever a corrente de probabilidade da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} \sum_{\alpha, \mathbf{k}_{\parallel}} n_{\alpha} (\psi_{\alpha}(z)^* \nabla \delta \psi_{\alpha}(z, t) + \psi_{\alpha}(z, t)^* \nabla \psi_{\alpha}(z) \\ - \psi_{\alpha}(z) \nabla \delta \psi_{\alpha}(z, t)^* - \delta \psi_{\alpha}(z, t) \nabla \psi_{\alpha}(z)^*) \end{aligned} \quad (4.24)$$

Como no caso da flutuação de densidade, deve-se considerar a invariância temporal da equação de Schrödinger que por sua vez acarreta na inclusão do par de transição (α^*, β^*) . Substituindo-se a equação (4.18) no limite de $\eta \rightarrow 0$ em

(4.24) e considerando o par (α^*, β^*) , determina-se:

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} \sum_{\alpha, \beta, k_{\parallel}} n_{\alpha} \left[\frac{V_{\beta\alpha}}{\omega - \omega_{\beta\alpha}} (\psi_{\alpha}^* \nabla \psi_{\beta} - \psi_{\beta} \nabla \psi_{\alpha}^*) + \frac{V_{\alpha\beta}}{\omega + \omega_{\beta\alpha}} (\psi_{\beta}^* \nabla \psi_{\alpha} - \psi_{\alpha} \nabla \psi_{\beta}^*) \right] e^{-i\omega t} \quad (4.25)$$

onde $V_{\beta\alpha} = \langle \alpha | e^{iqz} | \beta \rangle \delta V_q^{ext}$. Aplicando o divergente dentro do parênteses da equação acima tem-se:

$$\nabla \cdot (\psi_{\alpha}^* \nabla \psi_{\beta} - \psi_{\beta} \nabla \psi_{\alpha}^*) = \psi_{\alpha}^* \nabla^2 \psi_{\beta} - \psi_{\beta} \nabla^2 \psi_{\alpha}$$

Lembrando-se que:

$$\psi_{\nu}^* \frac{-\hbar^2 \nabla^2 \psi_{\mu}}{2m} + V \psi_{\mu} \psi_{\nu}^* = \epsilon_{\mu} \psi_{\mu} \psi_{\nu}^* \quad (4.26)$$

onde μ, ν são quaisquer índices. Usando as equações acima obtém-se:

$$\vec{J} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha, \beta, k_{\parallel}} n_{\alpha} \left[\frac{V_{\beta\alpha}}{\omega - \omega_{\beta\alpha}} \omega_{\alpha\beta} \psi_{\alpha}^* \psi_{\beta} + \frac{V_{\alpha\beta}}{\omega + \omega_{\beta\alpha}} \omega_{\beta\alpha} \psi_{\beta}^* \psi_{\alpha} \right] e^{-i\omega t} \quad (4.27)$$

Trocando-se os índices α por β e vice-versa, no segundo termo da eq.(4.27) determina-se finalmente a expressão para \vec{J} .

$$\vec{J} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha, \beta} N_{\beta\alpha} \frac{2\omega_{\beta\alpha} V_{\beta\alpha}}{\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2} \omega_{\alpha\beta} \psi_{\alpha}^* \psi_{\beta} e^{-i\omega t} \quad (4.28)$$

Para calcular a derivada temporal da flutuação de densidade de carga, usa-se a seguinte equação.

$$\delta n(z, t) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\beta, \alpha} N_{\beta\alpha} \left[\frac{V_{\beta\alpha}}{\omega - \omega_{\beta\alpha}} \psi_{\alpha}^* \psi_{\beta} - \frac{V_{\alpha\beta}}{\omega + \omega_{\beta\alpha}} \psi_{\alpha} \psi_{\beta}^* \right] e^{-i\omega t} \quad (4.29)$$

Derivando-se a equação acima com relação ao tempo e manipulando os termos, determina-se o seguinte resultado:

$$\delta n(z, t) = \frac{i}{\hbar} \sum_{\beta, \alpha} N_{\beta\alpha} \frac{2\omega_{\beta\alpha} V_{\beta\alpha}}{\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2} \omega_{\beta\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\beta} e^{-i\omega t} \quad (4.30)$$

Comparando-se a equação (4.30) com (4.28) vê-se que a conservação da corrente é confirmada. Para incluir o amortecimento na flutuação de densidade de carga faz-se a seguinte modificação, substitui-se ω^2 por $\omega^2 + i\gamma_{\beta\alpha}\omega$ no denominador da equação (4.30), onde a constante de amortecimento $\gamma_{\alpha\beta}$ possui estes índices porque para diferentes transições podem haver diferentes constantes de amortecimento. Ao fazer esta mudança a conservação da corrente e a regra de soma são mantidas [22]. Outra justificativa para tal mudança é que a equação para o sistema não amortecido possui a forma da equação de um conjunto de osciladores harmônicos forçados acoplados, então espera-se que o comportamento para o amortecimento da flutuação de densidade de carga seja igual ao amortecimento de um conjunto de osciladores harmônicos. A equação para a flutuação de densidade resultante fica sendo igual a:

$$\delta n(z, t) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\beta, \alpha} \frac{2\omega_{\beta\alpha} \langle \alpha | e^{iqz} | \beta \rangle}{\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2 + i\gamma_{\beta\alpha}\omega} \psi_{\alpha}^*(z) \psi_{\beta}(z) \delta V_q^{ext} e^{-i\omega t} \quad (4.31)$$

4.6 Cálculo da função resposta para elétrons interagentes.

No caso do sistema interagente, os estados $|i\rangle$ e $|f\rangle$ da equação (4.11) são estados exatos de muitos corpos, os quais são desconhecidos, por isso constrói-se uma teoria aproximada para a função resposta. A aproximação mais usada é a chamada RPA (Random Phase Approximation), onde supõe-se que os elétrons respondem ao potencial total como se fossem independentes. O potencial total entretanto, possui duas parcelas, a primeira devida ao potencial aplicado δV^{ext} e

a segunda devida a um potencial induzido pela flutuação de densidade de carga δV^{ind} .

$$\delta V^{total}(\vec{z}, t) = \delta V^{ext}(\vec{z}, t) + \delta V^{ind}(\vec{z}, t) \quad (4.32)$$

Considera-se o potencial induzido como sendo o potencial de Coulomb para a flutuação de densidade de carga, o qual é descrito pela seguinte expressão:

$$\delta V^{ind}(\vec{z}, t) = \int d\vec{y} \frac{e^2 \delta n(\vec{y}, t)}{\epsilon_{\infty} |\vec{z} - \vec{y}|} \quad (4.33)$$

Como a dependência temporal é a mesma $e^{-i\omega t}$ para todas as grandezas, pode-se resolver o problema desconsiderando o tempo. Na aproximação RPA os elétrons agem sob a ação de um potencial total como se fossem independentes, desta forma pode-se calcular a flutuação de densidade de carga entre um par de excitação (α, β) causada pelo potencial total.

$$\delta n(\vec{z}) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha, \beta} \frac{2\omega_{\beta\alpha} \langle \alpha | \delta V^{total}(\vec{z}) | \beta \rangle}{\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2 + i\gamma_{\beta\alpha}\omega} \psi_{\alpha}^*(\vec{z}) \psi_{\beta}(\vec{z}) \quad (4.34)$$

Substituindo-se a equação (4.32) em (4.34) determina-se a seguinte equação:

$$\begin{aligned} \delta n(\vec{z}) &= \frac{1}{\hbar} \sum_{\alpha, \beta} \frac{2\omega_{\beta\alpha} \langle \alpha | \delta V^{total}(\vec{z}) | \beta \rangle}{\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2 + i\gamma_{\beta\alpha}\omega} \psi_{\alpha}^*(\vec{z}) \psi_{\beta}(\vec{z}) = \\ &= \sum_{\alpha, \beta} \frac{2\omega_{\beta\alpha} (\langle \alpha | \delta V^{ext}(\vec{z}) | \beta \rangle + \langle \alpha | \delta V^{ind}(\vec{z}) | \beta \rangle)}{\hbar(\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2 + i\gamma_{\beta\alpha}\omega)} \psi_{\alpha}^*(\vec{z}) \psi_{\beta}(\vec{z}) \end{aligned} \quad (4.35)$$

O potencial induzido também depende da flutuação de densidade, o que pode ser entendido da seguinte forma: - a flutuação de densidade entre o par de excitação (α, β) induz um potencial que por sua vez aciona a flutuação de densidade de

outro par de excitação (γ, δ) e desta forma os pares se acoplam entre si.

$$\begin{aligned}
& \langle \alpha | \delta V^{ind}(\vec{z}) | \beta \rangle = \\
& = \int d\vec{z} \psi_{\alpha}^*(\vec{z}) \psi_{\beta}(\vec{z}) \int d\vec{y} \frac{e^2}{\epsilon_{\infty} |\vec{z} - \vec{y}|} \left(\frac{1}{\hbar} \right) \sum_{\gamma, \delta} \frac{2\omega_{\delta\gamma} \langle \gamma | \delta V^{total}(\vec{y}) | \delta \rangle}{[\omega^2 - \omega_{\delta\gamma}^2 + i\gamma_{\delta\gamma}\omega]} \psi_{\gamma}^*(\vec{y}) \psi_{\delta}(\vec{y}) \\
& = \frac{1}{\hbar} \sum_{\gamma, \delta} \frac{2\omega_{\delta\gamma} \langle \gamma | \delta V^{total}(\vec{y}) | \delta \rangle}{[\omega^2 - \omega_{\delta\gamma}^2 + i\gamma_{\delta\gamma}\omega]} \int \int d\vec{z} d\vec{y} \frac{e^2 \phi_{\beta\alpha}^*(\vec{z}) \phi_{\delta\gamma}(\vec{y})}{\epsilon_{\infty} |\vec{z} - \vec{y}|} \quad (4.36)
\end{aligned}$$

onde

$$\phi_{\delta\gamma}(\vec{y}) = \psi_{\gamma}^*(\vec{y}) \psi_{\delta}(\vec{y}) \quad (4.37)$$

Definindo-se uma coordenada harmônica $x_{\beta\alpha}$, a qual está relacionada ao par de transição (α, β) , como

$$x_{\beta\alpha} = \frac{\sqrt{2\hbar\omega_{\beta\alpha} N_{\beta\alpha}}}{\hbar^2(\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2 + i\gamma_{\beta\alpha}\omega)} \delta V_{\beta\alpha}^{total} \quad (4.38)$$

Pode-se reescrever a equação (4.35) em função de coordenadas harmônicas. A equação que acopla os pares de transição é dada por:

$$\hbar^2(\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2 + i\gamma_{\beta\alpha}\omega) x_{\beta\alpha} = \sqrt{2\hbar\omega_{\beta\alpha} N_{\beta\alpha}} \delta V_{\beta\alpha}^{ext} + \sum_{\delta, \gamma} U_{(\delta\gamma), (\beta\alpha)} x_{\delta\gamma} \quad (4.39)$$

Onde os elementos da matriz $U_{(\delta\gamma), (\beta\alpha)}$ são definidos da seguinte maneira:

$$U_{(\delta\gamma), (\beta\alpha)} = \sqrt{4\hbar\omega_{\beta\alpha} \hbar\omega_{\delta\gamma} N_{\beta\alpha} N_{\delta\gamma}} \int \int d\vec{y} d\vec{z} \frac{e^2 \phi_{\beta\alpha}^*(\vec{z}) \phi_{\delta\gamma}(\vec{y})}{\epsilon_{\infty} |\vec{z} - \vec{y}|} \quad (4.40)$$

Assumindo condições de contorno periódicas para as funções de onda dos elétrons sobre as N_c celas, que a conservação do momentum de Bloch permaneça válida, o que quer dizer que somente pares de excitações $(\beta\alpha)$ e $(\delta\gamma)$ possuindo números quânticos que diferem entre si de $(q + g)$ estão acoplados, onde $g = (2\pi/d \times \text{inteiro})$ é o número de onda da rede recíproca da super-rede. Levando-se em conta estas considerações, pode-se reescrever a equação matricial correspondente

a (4.39), definindo um vetor \mathbf{x} e um vetor \mathbf{f} . Onde \mathbf{x} possui as componentes $x_{\beta\alpha}$, \mathbf{f} possui as componentes $f_{\beta\alpha} = \sqrt{2\hbar\omega_{\beta\alpha}N_{\beta\alpha}} \delta V_{\beta\alpha}^{ext}$ e supõe-se que as constantes $\gamma_{\beta\alpha}$ sejam todas iguais à $\hbar\gamma$, ou seja, todas as transições possuem a mesma constante de amortecimento. A equação resultante é dada por:

$$[\hbar^2\omega^2 + \mathbf{U} + i\hbar\gamma\omega).\mathbf{x} = \mathbf{f} \quad (4.41)$$

Onde a matriz de acoplamento \mathbf{U} é dada por:

$$U_{(\beta\alpha),(\delta\gamma)} = \frac{\sqrt{4\hbar\omega_{\beta\alpha}\omega_{\delta\gamma}N_{\beta\alpha}N_{\delta\gamma}}}{N_c A} \sum_g \frac{4\pi e^2}{\epsilon_\infty} \frac{\rho_{\beta\alpha}^*(g)\rho_{\delta\gamma}(g)}{|q+g|^2} + \delta(\beta\alpha, \delta\gamma)(\hbar\omega_{\beta\alpha})^2 \quad (4.42)$$

onde A é a área, q o momentum transferido para a excitação ao longo do eixo da super-rede. Na equação acima

$$\rho_{\beta\alpha}(g) = \int_{\text{cela}} e^{-i(q+g)z} \Phi_{\beta\alpha}(z) dz$$

Cada função de onda ψ_α e ψ_β do produto $\Phi_{\beta\alpha}(z)$ é normalizada na cela unitária. Para resolver a equação (4.41) diagonaliza-se a matriz \mathbf{U} e expande-se \mathbf{x} e \mathbf{f} nos auto-vetores da base, ou seja:

$$\mathbf{U}(\omega) \mathbf{y}_i = \hbar^2\Omega_i^2 \mathbf{y}_i \quad \mathbf{x} = \sum_i \langle \mathbf{y}_i | \mathbf{x} \rangle \mathbf{y}_i \quad \mathbf{f} = \sum_i \langle \mathbf{y}_i | \mathbf{f} \rangle \mathbf{y}_i \quad (4.44)$$

Substituindo-se essas modificações em (4.41), obtém-se os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} (\hbar^2\omega^2 - \mathbf{U}(\omega) + i\gamma\hbar\omega) \cdot \sum_i \langle \mathbf{y}_i | \mathbf{x} \rangle \mathbf{y}_i &= \sum_i \langle \mathbf{y}_i | \mathbf{f} \rangle \mathbf{y}_i \\ \sum_i (\hbar^2\omega^2 - \hbar^2\Omega_i^2 + i\gamma\hbar\omega) \cdot \langle \mathbf{y}_i | \mathbf{x} \rangle \mathbf{y}_i &= \sum_i \langle \mathbf{y}_i | \mathbf{f} \rangle \mathbf{y}_i \\ \langle \mathbf{y}_i | \mathbf{f} \rangle &= (\hbar^2\omega^2 - \hbar^2\Omega_i^2 + i\gamma\hbar\omega) \langle \mathbf{y}_i | \mathbf{x} \rangle \end{aligned} \quad (4.45)$$

No caso de um conjunto de osciladores harmônicos acoplados amortecidos e forçados, a função resposta é dada pelo produto escalar da força externa \mathbf{f} pela

coordenada x . Portanto a função resposta é dada por :

$$R(\omega) = \mathbf{f}^* \cdot \mathbf{x} = \sum_i \frac{|\langle \mathbf{y}_i | \mathbf{f} \rangle|^2}{\hbar^2 \omega^2 - \hbar^2 \Omega_i^2 + i\gamma \hbar^2 \omega} \quad (4.46)$$

4.7 O deslocamento e o alargamento de energia para o sistema de elétrons interagentes.

Como dito anteriormente sabe-se que o deslocamento e o alargamento de energia são dados pelas equações (4.2), (4.3). Quando o fônon LO interage com o contínuo eletrônico, estas grandezas estão intimamente ligadas a função resposta como pode ser visto pela equação (4.11), portanto as equações que dão o deslocamento e o alargamento de energia do fônon LO, num sistema de elétrons interagente, são dadas por:

$$\frac{\Gamma_{LO}}{2} = -|M_q|^2 \text{Im}(R(\omega)) = \frac{|M_q|^2}{\hbar^2} \sum_i \frac{\gamma \omega_{LO} |\langle \mathbf{y}_i | \mathbf{f} \rangle|^2}{(\omega_{LO}^2 - \Omega_i^2)^2 + \gamma^2 \omega_{LO}^2} \quad (4.47)$$

$$\Delta E_{LO} = |M_q|^2 \text{Re}(R(\omega)) = \frac{|M_q|^2}{\hbar^2} \sum_i \frac{(\omega_{LO}^2 - \Omega_i^2) |\langle \mathbf{y}_i | \mathbf{f} \rangle|^2}{(\omega_{LO}^2 - \Omega_i^2)^2 + \gamma^2 \omega_{LO}^2} \quad (4.48)$$

Para o caso de temperatura finita multiplica-se a equações acima por $(n_\omega + 1)$.

Capítulo 5

Resultados e Discussões.

5.1 Introdução

Neste capítulo serão apresentados os resultados que foram obtidos numericamente. É interessante comentar que este trabalho investiga o comportamento da super-rede tanto a $T = 0K$ como a temperatura ambiente e considera o sistema com os elétrons interagindo entre si como também sem interação entre estes. Os parâmetros do GaAs usados foram [23]: a constante dielétrica estática $\epsilon_0 = 12,53$ e constante dielétrica para altas frequências $\epsilon_\infty = 10,9$ e a frequência do fônon LO $\omega_{LO} = 36,7meV$ à $T=0K$ e $\omega_{LO} = 36,2meV$ à $T=300K$. O vetor de onda transferido foi escolhido de forma a ser comensurável a particular discretização das minibandas, o qual é dado por: $q = 0.685 \times 10^6 cm^{-1}$. Como dito anteriormente, foi escolhido um sistema de unidades naturais de distância e energia introduzindo-se o raio de Bohr efetivo a_0^* e o Rydberg efetivo $Ry^* = \frac{e^2}{2\epsilon_0 a_0^*} = \frac{\hbar^2}{2m^*(a_0^*)^2}$, que para o GaAs são $97,43\text{Å}$ e $5,92 meV$, respectivamente.

5.2 Resultados para o gás de elétrons livres.

A simulação em que inexistente o potencial confinante, corresponde ao GaAs uniformemente dopado. Apresenta-se nesta seção a discussão destes resultados que são importantes para a compreensão do comportamento do gás de elétrons livres e para verificar quais são as mudanças causadas pela presença da super-rede. Determinando-se os resultados para o gás de elétrons livres, através do modelo desenvolvido neste trabalho, também pode-se testar a validade das aproximações que foram feitas. Uma grandeza que facilita estas análises é a função densidade espectral, a qual representa o resíduo da função resposta $R(q, \omega)$ no seu respectivo pólo.

$$f_{\beta\alpha} = N_{\beta\alpha} | \langle \alpha | e^{-iqz} | \beta \rangle |^2$$

$$f_i = \frac{| \langle \mathbf{y}_i | \mathbf{f} \rangle |^2}{2\Omega_i} \quad (5.1)$$

Onde $f_{\beta\alpha}$ denota a função espectral para o sistema não-interagente e f_i para o interagente e as grandezas das equações acima são as mesmas que foram definidas no capítulo anterior.

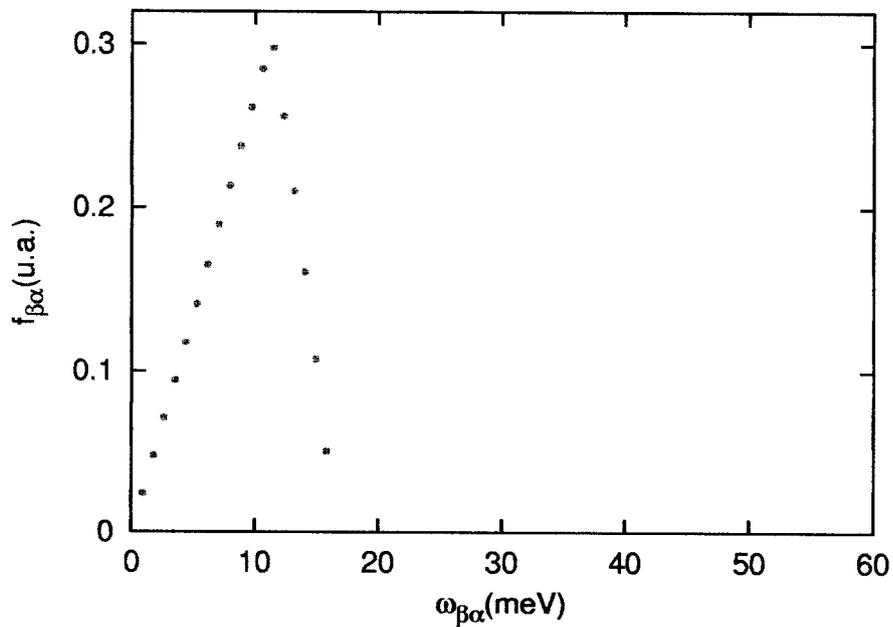


Figura 5.1: Gráfico da função densidade espectral para elétrons não interagentes a $T = 0K$ no caso onde o potencial inexistente ($V=0$).

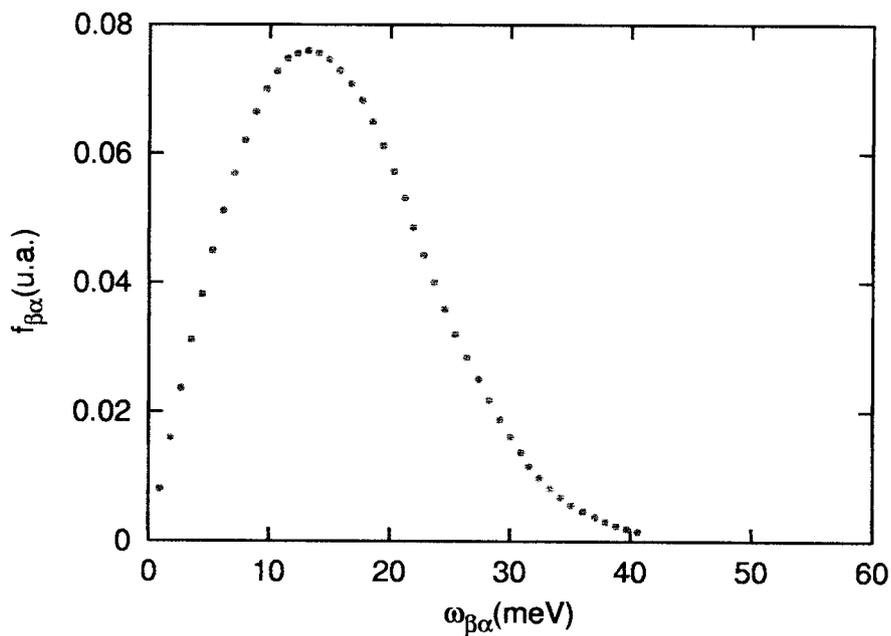


Figura 5.2: Gráfico da função densidade espectral para elétrons não interagentes a $T=300K$ no caso onde o potencial inexistente ($V=0$).

Analisando-se primeiramente o gás de elétrons não interagentes a $T = 0K$, o qual corresponde a figura (5.1), verifica-se a existência de uma frequência de corte, a qual pode ser determinada usando-se a conservação de momento e de energia.

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k}) &= \hbar\omega = \\ &= \frac{\hbar^2 \vec{k} \cdot \vec{q}}{m^*} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \end{aligned} \quad (5.2)$$

Pode-se determinar a frequência máxima, determinando-se o maior valor de \vec{k} , que para $T = 0K$ é igual ao vetor de onda de Fermi $k = k_F$. Substituindo-se $k_F = (E_F 2m^*/\hbar^2)^{1/2}$ no lugar de k na equação acima determina-se o valor que resulta em $\hbar\omega_{max} = 16,5meV$, que deve ser comparado ao valor extraído da figura (5.1) onde $\hbar\omega_{max} = 16,8meV$, esta pequena discrepância se deve a particular discretização implícita nos cálculos. O comportamento da função densidade espectral da figura (5.1) corresponde ao que foi descrito por Lindhard [13], o qual diz que de $\omega = 0$ até $\omega = qv_F$ a função densidade espectral é proporcional a ω e depois cai a zero da seguinte forma: $\omega = qv_F + \hbar q^2/2m^*$. Para valores finitos de T , existirão contribuições nas vizinhanças de $\omega = qv_F$, o que é verificado na figura (5.2). No caso do gás de elétrons livres interagentes, verifica-se o aparecimento do plasmon, o qual possui a relação de dispersão correspondente a equação (2.52). Para o caso $T=0K$ determina-se que a frequência de plasma é $\omega_q = 22,3meV$, a qual pode ser comparada ao resultado calculado através de (2.52), que é igual a $\omega_q = 21meV$. A temperatura ambiente a frequência de plasma se desloca resultando em $\omega_q = 28,9meV$. Os resultados para o gás de elétrons livres demonstram que ao interagir, os elétrons agem coletivamente e

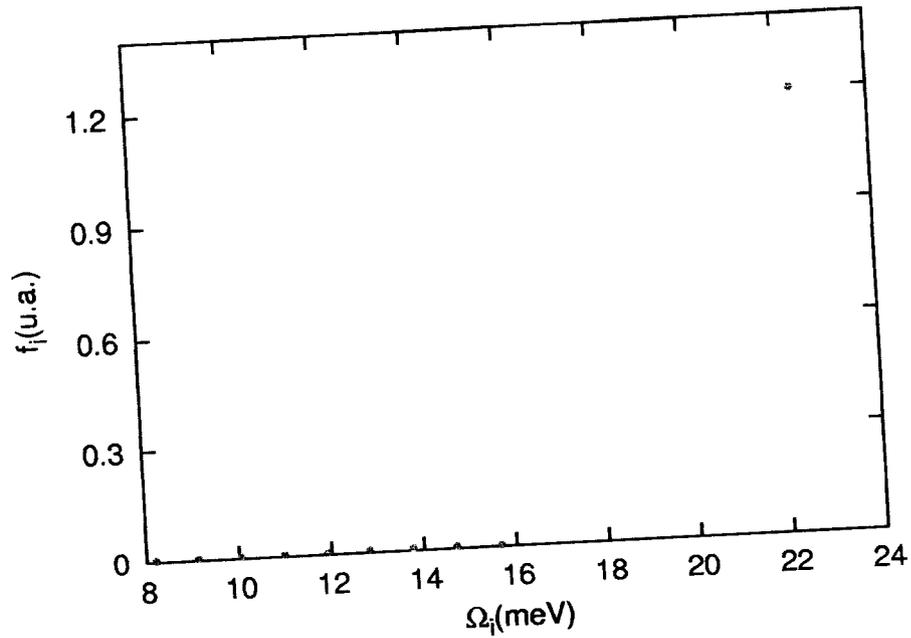


Figura 5.3: Gráfico da função densidade espectral para elétrons interagentes a $T=0K$ no caso onde o potencial inexistente ($V=0$).

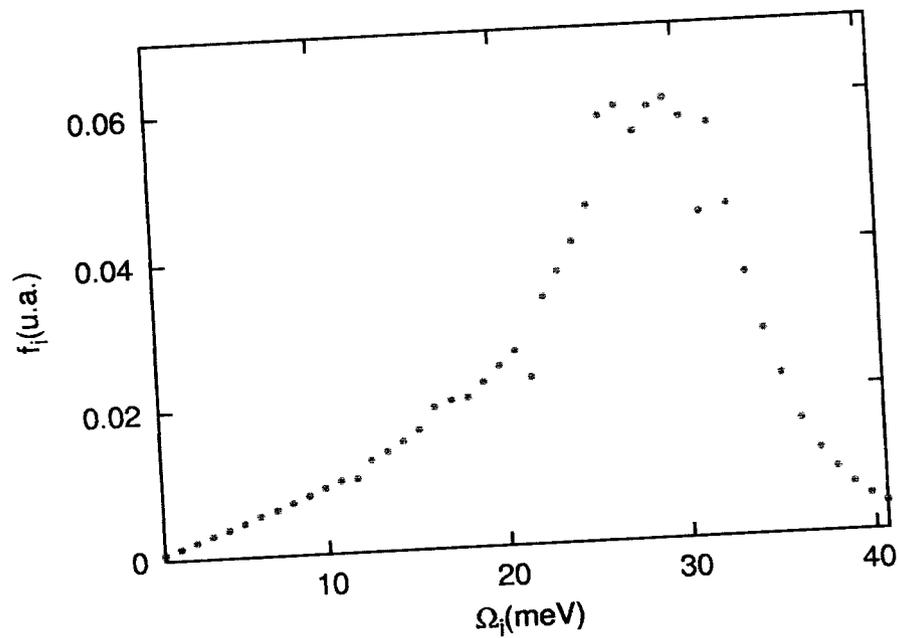


Figura 5.4: Gráfico da função densidade espectral para elétrons interagentes a $T=300K$ no caso onde o potencial inexistente ($V=0$).

formam um plasma quântico. Pode-se ainda calcular o deslocamento de energia causado pelo acoplamento entre o plasmon e o fônon LO a partir da equação (2.59) que resulta em $\Delta E = 0,8meV$ a $T=0K$. Os resultados obtidos a partir da simulação resultam em: $\Delta E = 0,8meV$ a $T=0K$ e $\Delta E = 7,8meV$ a $T=300K$. A partir dos resultados desta seção, conclui-se que o modelo usado neste trabalho reproduz os resultados exatos para o gás de elétrons livres de forma considerável, o que evidencia a validade das aproximações que foram utilizadas.

5.3 Resultados para a super-rede.

Os gráficos que serão apresentados abaixo, foram construídos usando-se a função densidade espectral eq.(5.1) e também a parte imaginária da função resposta $S(\omega) = Im[R(\omega)]$, a qual inclui o amortecimento.

$$S(\omega) = \sum_{\beta\alpha} \frac{\gamma\omega |f_{\beta\alpha}|^2}{(\omega^2 - \omega_{\beta\alpha}^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (\text{caso não-interagente})$$

$$S(\omega) = \sum_{\mathbf{i}} \frac{\gamma\omega |f_{\mathbf{i}}|^2}{(\omega^2 - \Omega_{\mathbf{i}}^2)^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (\text{caso interagente})$$

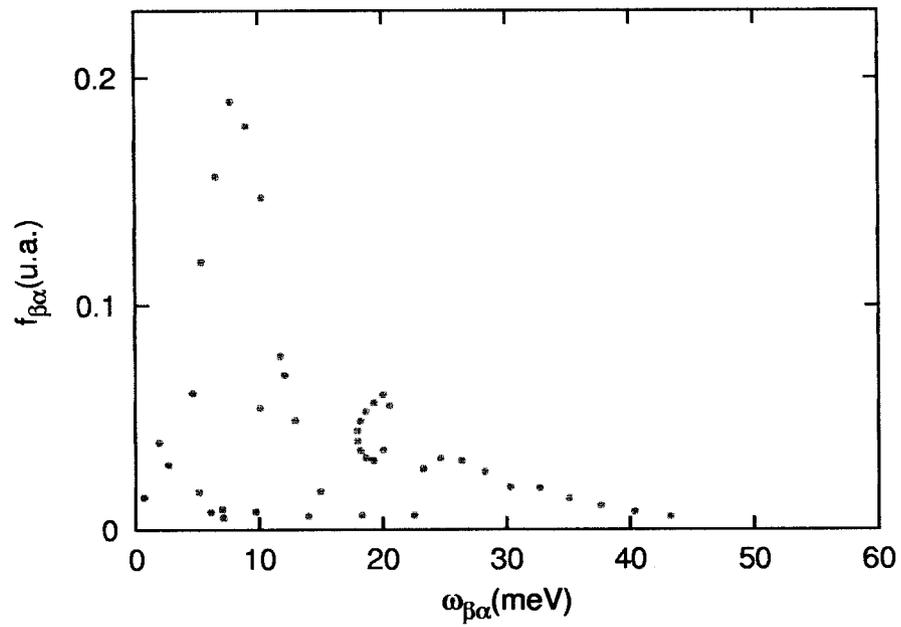


Figura 5.5: Gráfico da função densidade espectral para elétrons não interagentes a $T=0K$.

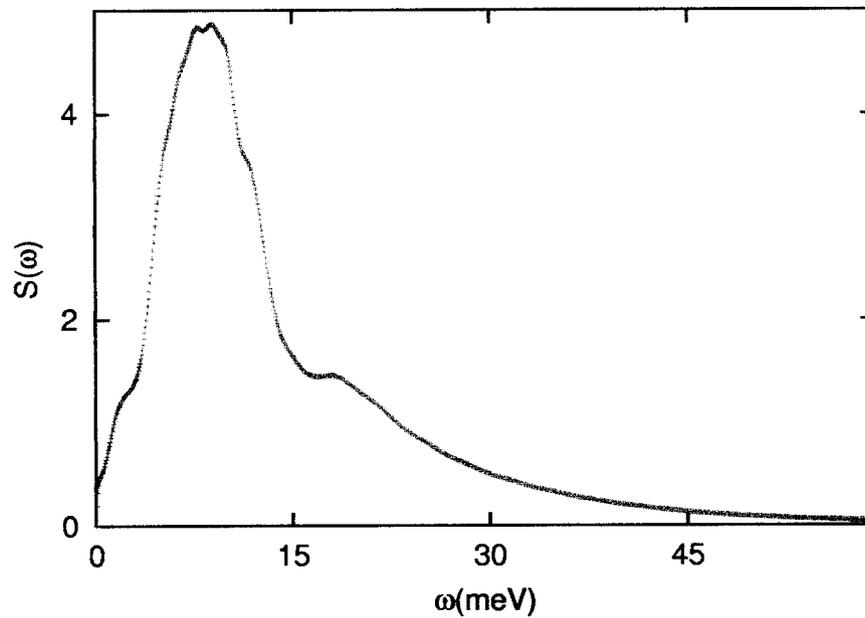


Figura 5.6: Gráfico de $S(\omega)$ relativo a função densidade espectral para elétrons não interagentes a $T=0K$.

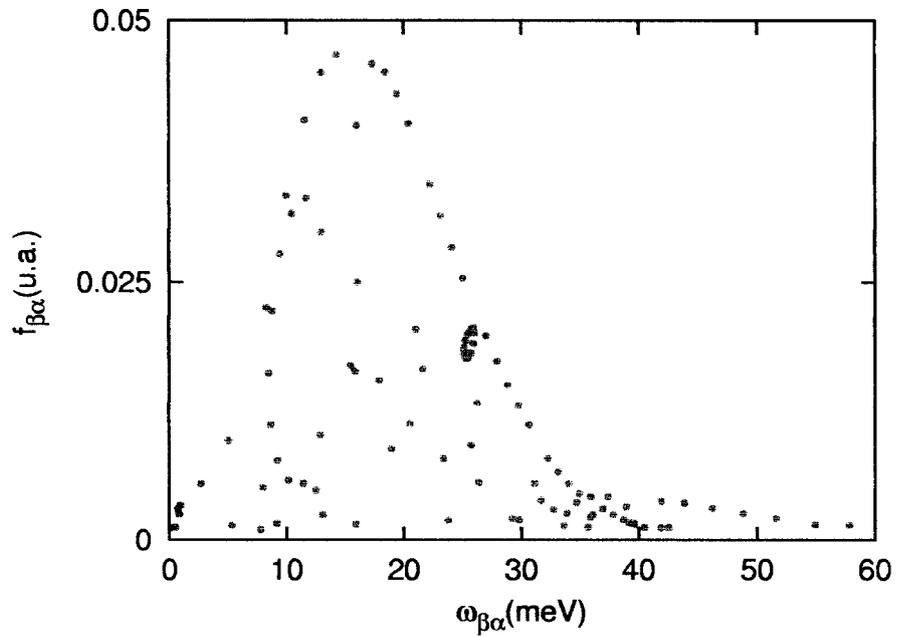


Figura 5.7: Gráfico da função densidade espectral para elétrons não interagentes a $T=300\text{K}$.

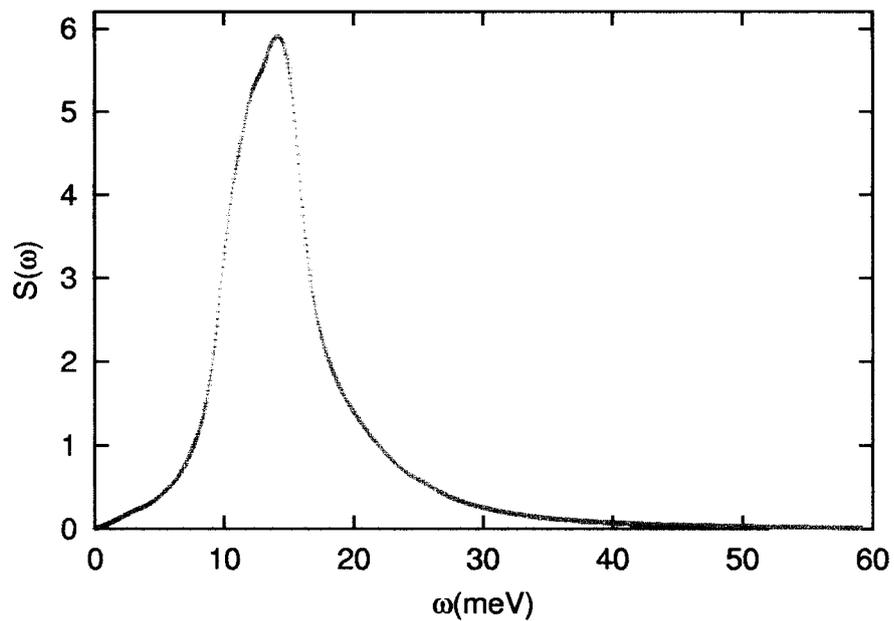


Figura 5.8: Gráfico de $S(\omega)$ relativo a função densidade espectral para elétrons não interagentes a $T=300\text{K}$.

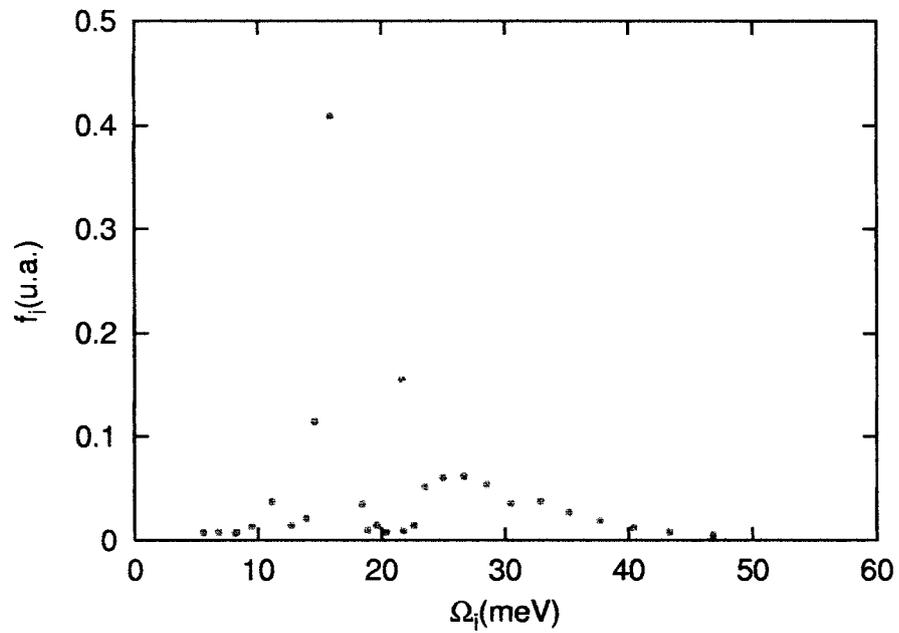


Figura 5.9: Gráfico da função densidade espectral para elétrons interagentes a $T=0K$.

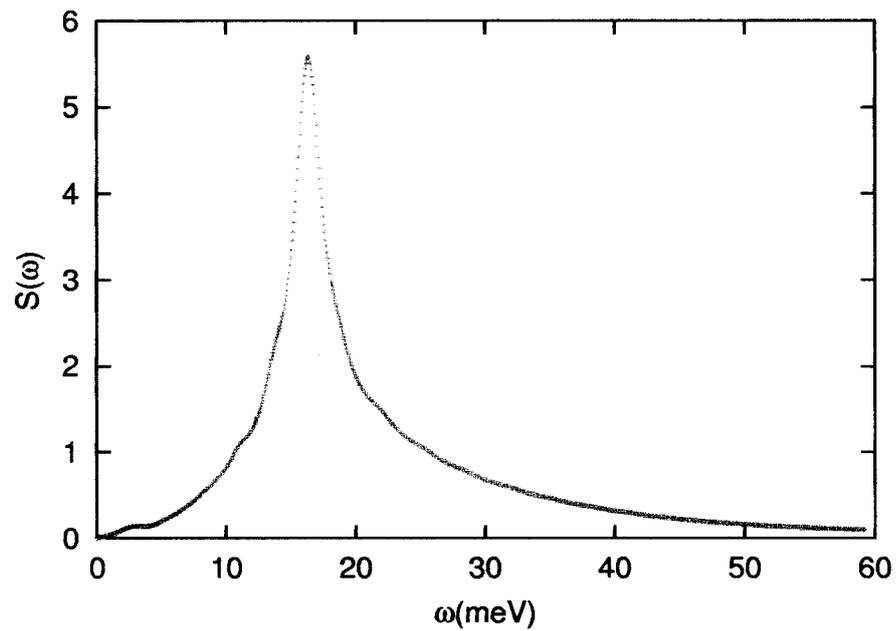


Figura 5.10: Gráfico de $S(\omega)$ relativo a função densidade espectral para elétrons interagentes a $T=0K$.

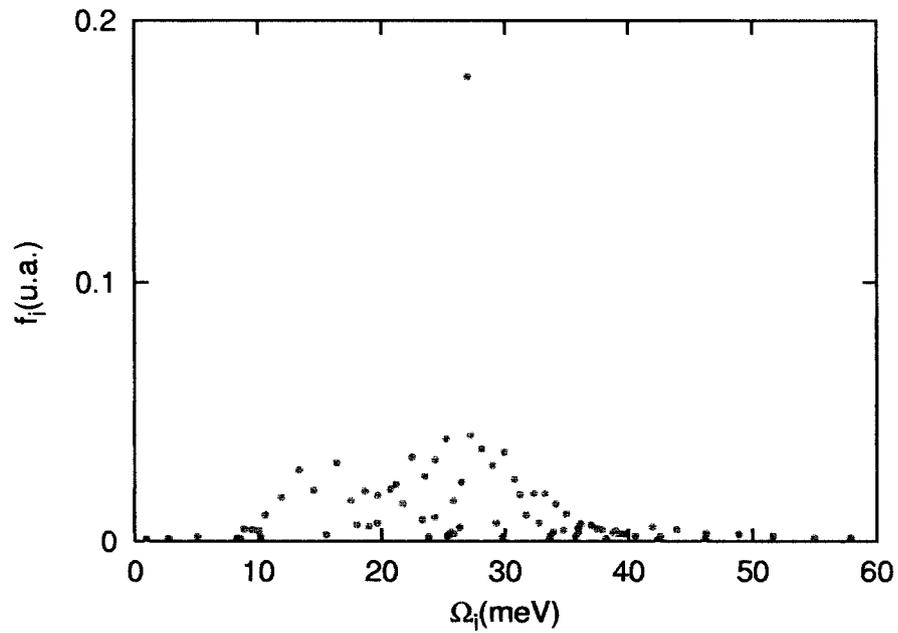


Figura 5.11: Gráfico da função densidade espectral para elétrons interagentes a $T=300\text{K}$.

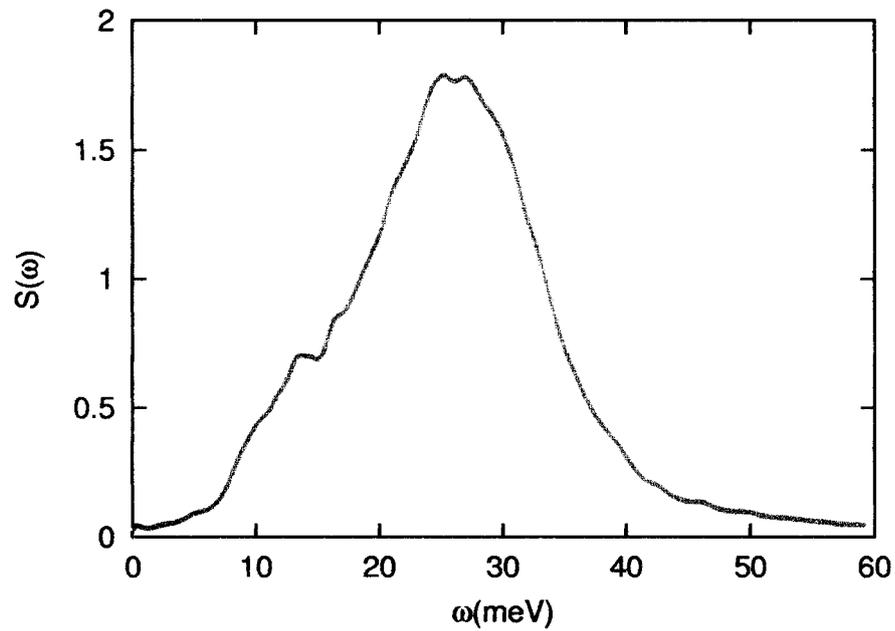


Figura 5.12: Gráfico de $S(\omega)$ relativo a função densidade espectral para elétrons interagentes a $T=300\text{K}$.

Pode-se notar nos gráficos que mostram as funções densidades espectrais, para os diferentes casos, que as forças de oscilador (função densidade espectral) se distribuem substancialmente numa região, a qual compreende energias menores que a do fônon. Esta análise ressalta o fato de que o deslocamento de energia do fônon deve ser positivo. Nos gráficos de $S(\omega)$ foram usados dois valores diferentes para γ , para as transições entre primeira banda e as demais foi usado $\gamma_{1n} = 11meV$, que é consistente com os resultados observados na referência [24], e para as outras transições entre as demais bandas foi usado $\gamma_{mn} = 2.3meV$, onde $m \geq 2$ de acordo com a ref.[25]. Como foi demonstrado no capítulo 4, a interação do fônon LO com as flutuações de densidade de carga é mapeada em uma equação de osciladores harmônicos forçados e acoplados, portanto pode-se visualizar as transições pensando num conjunto de osciladores. Desta forma, os osciladores que estão relacionados as transições entre a primeira minibanda e as outras é fortemente amortecido, enquanto que os outros osciladores relacionados as outras transições possui um amortecimento 4 vezes menor. Quando um oscilador harmônico não amortecido (fônon) está acoplado a outro fortemente amortecido, (excitações eletrônicas provenientes da transição da primeira minibanda para as outras), verifica-se que o primeiro continua oscilando praticamente com sua frequência original, ao mesmo tempo adquirindo um tempo de vida devido a transferência irreversível de sua energia para o outro. Desta maneira, pode-se concluir que o efeito do acoplamento da primeira minibanda com as outras é o de gerar amortecimento no sistema. Como as demais minibandas formam um quase-contínuo tridimensional, o acoplamento de Coulomb destes estados levam a uma oscilação de plasma razoavelmente bem definida. O resultado deste último

acoplamento é deslocar a frequência original de vibração do fônon LO, tal qual o acoplamento elétron-fônon num gás de elétrons homogêneo como discutido na seção (2.2). Isto pode ser verificado através do fato que a soma em g na equação (4.42) produz resultados indistinguíveis daqueles em que se usa $g = 0$. A partir dos gráficos anteriores foram calculados o alargamento e o deslocamento de energia, estes resultados são mostrados nas tabelas abaixo juntamente com os resultados experimentais [7],[8].

T=0K	$\Gamma_{LO}(\text{meV})$	$\Delta E_{LO}(\text{meV})$
Dados Experimentais	0.8	0.2
Não Interagentes	0.58	0.23
Interagentes	0.80	0.26

T=300K	$\Gamma_{LO}(\text{meV})$	$\Delta E_{LO}(\text{meV})$
Dados Experimentais	0.5	0.7
Não Interagentes	0.42	0.83
Interagentes	0.46	1.10

Os resultados encontrados em nossos cálculos concordam satisfatoriamente com os encontrados na literatura. Conclui-se desta forma que a construção teórica usada neste trabalho, a qual não possui nenhum parâmetro ajustável, reproduz consideravelmente os efeitos observados em uma super-rede dopada planarmente.

Capítulo 6

Conclusão.

Este trabalho teve como objetivo central a determinação do deslocamento e alargamento de energia causado pela interação entre o fônon LO e as excitações eletrônicas, numa super-rede dopada planarmente a $T = 0K$ e a temperatura ambiente. Para a realização destes cálculos foi proposto que o fônon ao interagir com as excitações eletrônicas através do potencial de Fröhlich, provoca uma flutuação de densidade de carga que por sua vez se acopla novamente ao fônon. Esta interação provoca mudanças no sistema, uma delas é o deslocamento de energia que acontece porque o estado de um fônon se veste por uma nuvem virtual de excitações eletrônicas e uma outra é dada pelo tempo de vida finito para o decaimento do estado de um fônon no contínuo de excitações eletrônicas.

A determinação da estrutura eletrônica da super-rede foi de grande importância, pois esta determina as energias e as funções de onda dos elétrons sob a ação do potencial confinante. A construção da estrutura eletrônica foi feita utilizando-se da aproximação de Thomas-Fermi.

Foi mostrado que o cálculo do deslocamento e do alargamento de energia está

ligado a função resposta densidade-densidade do gás de elétrons modulado, a qual determina como a flutuação de densidade de carga responde à um potencial externo. Para a determinação da função resposta para um sistema interagente foi usada a aproximação RPA (*Random Phase Approximation*), que considera o gás de elétrons como independentes quando sob a ação do potencial total, que é a soma do potencial externo mais um potencial induzido. Foi apresentada uma maneira para se considerar o amortecimento, a qual é baseada na modificação da função densidade espectral, impondo que esta conserve a corrente e satisfaça a regra de soma.

Finalmente mostrou-se que os resultados para o deslocamento e alargamento de energia concordam satisfatoriamente com aqueles derivados do ajuste experimental. Estes resultados são o ponto de partida para a determinação de interferências quânticas entre o fônon LO e as excitações eletrônicas observadas em super-redes δ -dopadas.

Referências Bibliográficas

- [1] L. Ioriatti. *Phys. Rev. B*, 43(18), 1991.
- [2] F. Cerdeira, T. A. Fjeldly, and M. Cardona. *Phys. Rev. B*, 8, 1973.
- [3] A. Mooradian and G. B. Wright. *Phys. Rev. Lett.*, 16, 1966.
- [4] P. A. Wolf. *Phys. Rev. Lett.*, 16, 1966.
- [5] P. M. Platzmann. *Phys. Rev. B*, 139, 1965.
- [6] A. Mooradian. *Light Scattering Spectra of Solids*. ed. by G. B. Wright (Springer, New York, Heidelberg, Berlin), 1968. p. 285.
- [7] M. J. V. Bell, L. Ioriatti, and L. A. O. Nunes. *Phys. Rev B*, 57(24), 1998.
- [8] L. A. O. Nunes, L. T. Florez L. Ioriatti, and J. P. Harbison. *Phys. Rev. B*, 47(19), 1993.
- [9] P. M. Platzman and N. Tzoar. *Phys. Rev*, 136(A11), 1964.
- [10] P. M. Platzman and P. A. Wolff. *Waves and Interactions in Solid State Plasmas*. Academy Press, New York, 1973.
- [11] P. A. Wolff. *Light Scattering Spectra of Solids*. ed. by G. B. Wright (Springer, New York, Heidelberg, Berlin, 1968). p. 273.

- [12] D. Pines. *Elementary Excitations In Solids*. W. A. Benjamin, INC.
- [13] J. Lindhard. *Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat-fys. Medd.*, 28(8), 1958.
- [14] G. Abstreiter, R. Trommer, M. Cardona, and A. Pinczuk. *Solid State Commun.*, 30, 1979.
- [15] L. H. Thomas. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 23, 1927.
- [16] E. Fermi. *Eur. Phys.*, 48, 1928.
- [17] L. Ioriatti. *Phys. Rev B*, 42(12), 1990.
- [18] José Camilo Barbosa. *Aproximação de Thomas-Fermi aplicada a estruturas semicondutoras delta-dopadas*. Tese de mestrado, Instituto de Física de São Carlos, 1992.
- [19] J. C. Egues and J. C. Barbosa et al. *J. Appl. Phys.*, 70(7), 1991.
- [20] W. J. Cody and Henry C. Thacher Jr. *Math. Comput.*, 21(30), 1967.
- [21] M. H. Degani. *J. Appl. Phys.*, 70(8), 1991.
- [22] Virgílio de Carvalho dos Anjos. *Excitações coletivas e de partícula independente em sistemas multicamadas de GaAs delta-dopadas*. Tese de doutorado, Instituto de Física de São Carlos, 1998.
- [23] O. Madelung and Landolt-Börnstein. *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, volume 17 of Group III. Springer, Berlin, 1982.
- [24] A. Ya Shik. *Sov. Phys. Semicond.*, 26, 1992.

- [25] V. Anjos, L. Ioriatti, and L. A. O. Nunes. *Phys. Rev B*, 49(114), 1994.