



Universidade de Brasília
Programa de Pós-Graduação em Física
Instituto de Física

Arthur Silva Aguiar

**Interação elétron-fônon em semicondutores polares de baixa
dimensionalidade**

Brasília - DF
Agosto de 2015

Arthur Silva Aguiar

Interação elétron-fônon em semicondutores polares de baixa
dimensionalidade

*Dissertação apresentada ao
Programa de Pós-Graduação em
Física da Universidade de Bra-
sília, como parte dos requisitos
para obtenção do grau de Mestre
em Física.*

Orientador:

Prof. Dr. Marco A. Amato

Brasília - DF
Agosto de 2015

*“O que sabemos é uma gota; o que ignoramos
é um oceano.”*

(Isaac Newton)

Dedico,
A Deus,
A meu Pai Getulio,
A minha vó Zorilda,
A meu irmão Allan,
A Priscila.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, pelas inúmeras bênçãos e por mais essa vitória.

Em especial a minha Mãe Anita (in memoriam) que mesmo não estando ao meu lado, sei que está olhando por mim onde estiver. Meu pai Getulio, que ao seu modo foi pai e mãe e sempre me apoiou em tudo. A minha Vó Zorilda que na ausência de minha mãe me deu amor, carinho e conselhos inesquecíveis e ao meu Vô Moisés (in memoriam) que era um bom companheiro.

Ao meu irmão Allan, amigo de todas as horas, muito mais que um irmão. A minha prima irmã Dani que sempre me ajudou e aos primos Léo, Hélder, Marcio e Daniel parceiros de toda a vida. A tio Dão, Dio e Tia Cel, pessoas fundamentais que me deram segurança em momentos cruciais.

A tia Ita, Graça e Gleide que estiveram presente nesta caminhada...

Enfim a toda minha família.

Gostaria de agradecer ao meu orientador Professor Dr. Marco Amato, que apesar de todas as minhas dificuldades, soube me conduzir de maneira extraordinária durante esse trabalho, me ajudou a crescer não só como pessoa, mas também como pesquisador.

A Priscila que conheci durante esse percurso, que foi e está sendo uma peça fundamental no meu crescimento, motivando a continuar sempre, obrigado amor!

E como “O valor não está na forma em que você conquista, mas sim, na habilidade de manter o que você conquistou.” (Fernando Lapolli). Nesse ciclo mágico de conquistas, uma delas, foi à amizade de pessoas maravilhosas que Deus me presenteou durante essa trajetória: Lydiane, Rodrigo, Moises, Deborah, Waldenor, José, Neymar, Anderson, Breytiner, Igor, Jucélia, Akira e Hara, e também não poderia esquecer dos meus amigos de sempre Marcão e Tamires.

A Fundação Capes pelo apoio financeiro.

Enfim a todos que contribuíram para o meu sucesso o meu muito obrigado!

Resumo

O estudo do confinamento de fônons óticos configura um problema bastante atual no que diz respeito a semicondutores de baixa dimensionalidade, possui um papel importante na redução da taxa de espalhamento de elétrons, e na limitação de sua mobilidade. No contexto teórico esta análise é feita introduzindo monocamadas no interior do poço quântico, e.g. InAs em AlAs-GaAs [2]-[8]. Os modelos mais utilizados são: (i) DC (Dielectric Continuum) [1], que despreza a natureza mecânica que conecta os fônons dos diferentes materiais que constituem o poço na interface dos mesmos e considera apenas os modos eletromagnéticos, i.e., longitudinais (LO) e interface (IP), ambos satisfazendo as equações de Maxwell, e (ii) o modelo híbrido (HM) que leva em conta a natureza mecânica dos fônons na interface e inclui também as condições de contorno eletromagnéticas (DC). Neste último caso, os três modos possíveis, Longitudinal (LO), Transversal (TO) e de Interface (IP) são hibridizados [8]. Neste trabalho desenvolvemos uma investigação de algumas propriedades das monocamadas, e de que forma elas afetam a da taxa de espalhamento eletrônica[2]-[8].

Abstract

The study of optical phonon confinement configures a very current issue in respect of low- dimensional semiconductor, has an important role in the reduction of electron scattering rate, and limiting their mobility. In the theoretical context, this analysis is done by introducing monolayers inside the quantum well, e.g, InAs in AlAs-GaAs [2]-[8]. The most frequently used models are: (i) DC (Dielectric Continuum) [1], which disregards the mechanical nature that connects the phonons of the different materials constituting the well at the interface of them and considers only the electromagnetic modes, ie, longitudinal (LO) and interface (IP), both satisfying the equations of Maxwell, and (ii) the hybrid model (HM) which takes into account the mechanical nature of the phonons in the interface and includes also the electromagnetic boundary conditions (DC). In this last case, the three possible modes, Longitudinal (LO) ,Cross (TO) and the interface (PI) are hybridized [8]. In this work we develop an investigation of some properties of the monolayers, and how they affect the electron scattering rate [2]-[8].

Lista de Figuras

1.2.1	<i>Zonas de Brillouin</i>	4
1.3.2	<i>Estrutura de bandas dos semicondutores, isolantes e condutores</i>	5
1.3.3	<i>Modos de vibrações</i>	10
1.3.4	<i>Relação de dispersão [9]</i>	10
2.1.1	<i>Diagrama da estrutura de bandas de um semicondutor. E_F é a energia de Fermi e E a energia em elétron-volt (eV);</i>	15
2.1.2	<i>Bandas de condução e valência do GaAs, e a diferença entre a banda de valência no vácuo e do GaAs</i>	16
2.2.3	<i>Heterojunção onde o azul e vermelho significam dois semicondutores diferentes</i>	17
2.2.4	<i>Potencial unidimensional $V(z)$</i>	18
2.3.5	<i>Heterojunção e estrutura similar ao poço potencial</i>	18
2.3.6	<i>Vários tipos de heteroestruturas. (a) e (b) representam poços quânticos duplos simétrico e assimétrico respectivamente e (c) uma superrede</i>	19
2.3.7	<i>Heteroestrutura com bandas de condução e de valência em materiais diferentes</i>	19
2.4.8	<i>Poço quântico formado devido à diferença de energia de band Gap entre o AlAs e o GaAs</i>	20
2.4.9	<i>Poço quântico formado devido à diferença de energia de band Gap entre o AlAs e o GaAs, com suas permissividades, respectivamente!</i>	37
3.1.1	<i>Poço quântico do tipo AlAs-GaAs com uma camada de InAs introduzida em seu interior;</i>	43
3.2.2	<i>Interfaces do poço quântico do tipo AlAs-GaAs referente as condições de contorno (A) e (B);</i>	44
3.2.3	<i>Interfaces do poço quântico do tipo AlAs-GaAs referente as condições de contorno (C);</i>	45
3.8.4	<i>Bandas de energias e as interações inter-subband e intra-subband;</i>	83
4.1.1	<i>Dispersão dos modos simétricos</i>	91
4.1.2	<i>Dispersão dos modos antisimétricos</i>	91

Lista de Tabelas

I.1	<i>Resumo das interações elétron-fônon em Si e GaAs [10]</i>	14
-----	--	----

Lista de Símbolos

LA	Modo de vibração longitudinal acústico (fônons)
TA	Modo de vibração transversal acústico (fônons)
LO	Modo de vibração longitudinal óptico (fônons)
TO	Modo de vibração transversal óptico (fônons)
IF	Modo de vibração na interface
ε_∞	Constante dielétrica de alta frequência
ε_0	Constante dielétrica de baixa frequência
\mathbf{u}	Deslocamento relativo dos íons, $\mathbf{u} = \mathbf{u}_L + \mathbf{u}_T$
\mathbf{u}_L	Deslocamento relativo longitudinal, pode ter também os subíndices: 2, 3, 4 e (x) , (z) que simbolizam os meios e suas componentes respectivamente.
\mathbf{u}_T	Deslocamento relativo transversal, pode ter também os subíndices: 2, 3, 4 e (x) , (z) que simbolizam os meios e suas componentes respectivamente.
\mathbf{u}_{IF}	Deslocamento relativo na interface, pode ter também os subíndices: 2, 3, 4 e (x) , (z) que simbolizam os meios e suas componentes respectivamente.
ω	Frequência normal de vibração, pode ser escrita também como ω_o
ω_L	Frequência normal de vibração longitudinal
ω_{TO}	Frequência normal de vibração transversal, pode ser escrita também como ω_T
ω_q	Frequência normal de vibração na interface, pode ser escrita também como ω_{IF}
ε_ω	Permissividade do GaAs
ε_1	Permissividade do AlAs
ε_3	Permissividade do InAs

v	Velocidade de dispersão
v_T	Velocidade de dispersão do modo de vibração transversal
v_L	Velocidade de dispersão do modo de vibração longitudinal
\mathbf{k}	Vetor de onda
k_L	Vetor de onda do modo de vibração longitudinal
k_T	Vetor de onda do modo de vibração transversal
k_x	Vetor de onda do modo de vibração na interface
L	Comprimento do poço quântico, que vai de $-\frac{L}{2}$ até $\frac{L}{2}$
A	Constante usada na solução do poço quântico, que pode ser A_2, A_3, A_4 , de acordo com a região do poço quântico com barreira.
B	Constante usada na solução do poço quântico, que pode ser B_2, B_3, B_4 , de acordo com a região do poço quântico com barreira.
C	Constante usada na solução do poço quântico, que pode ser C_2, C_3, C_4 , de acordo com a região do poço quântico com barreira.
D	Constante usada na solução do poço quântico, que pode ser D_2, D_3, D_4 , de acordo com a região do poço quântico com barreira.
$2d_o$	Tamanho da barreira de InAs, que vai de $-d_o$ até d_o , com $d_o = \frac{L}{6}$
\mathbf{E}	Campo elétrico macroscópico, $\mathbf{E} = \mathbf{E}_L + \mathbf{E}_T$
\mathbf{E}_L	Campo elétrico longitudinal, pode ter também os subíndices: 2, 3, 4, (x) e (z) que simbolizam os meios e suas componentes respectivamente.
\mathbf{E}_T	Campo elétrico transversal, pode ter também os subíndices: 2, 3, 4, (x) e (z) que simbolizam os meios e suas componentes respectivamente.
\mathbf{E}_{IF}	Campo elétrico na interface, pode ter também os subíndices: 2, 3, 4, (x) e (z) que simbolizam os meios e suas componentes respectivamente.
$\mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t)$	Campo elétrico da região 1, ou seja, $z \geq \frac{L}{2}$
$\mathbf{E}^<(\mathbf{r}, t)$	Campo elétrico da região 1, ou seja, $z \geq -\frac{L}{2}$
ϕ	Potencial Elétrico
W	Taxa de espalhamento

ρ	Densidade de carga
v_m^\pm	Constante utilizada para simplificar os cálculos, é igual à $e^{\pm(ik_L n)}$ com, $n = \frac{L}{2}$ ou d_o e $m = 2, 3, 4$
ω_m^\pm	Constante utilizada para simplificar os cálculos, é igual à $e^{\pm(k_x n)}$ com, $n = \frac{L}{2}$ ou d_o e $m = 2, 3, 4$
$\bar{\psi}_2$	Constante que possui o valor igual à $\delta_d - \frac{i}{\alpha s} \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]$
ψ_2	Constante que possui o valor igual à $\delta_d + \frac{i}{\alpha s} \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]$
δ_d	Constante que possui o valor igual à $r \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] + \cosh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]$
α	Uma relação entre entre vetores de onda igual à $\frac{k_L}{k_x}$
N_2	Simboliza uma relação formada por outras constantes com o valor igual à $(\psi_2 v_2^+ - v_{d_o}^+)^{-1}$
N_3	Simboliza uma relação formada por outras constantes com o valor igual à $(L_4 \omega_{d_o}^+ - L_2 \omega_{d_o}^-)^{-1}$
N_4	Simboliza uma relação formada por outras constantes com o valor igual à $(\bar{\psi}_2 v_2^- - v_{d_o}^-)^{-1}$
r	Simboliza uma relação entre duas permissividades com o valor igual à $\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_3}$
r_o	Simboliza uma relação entre duas permissividades com o valor igual à $\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_1}$
R	Simboliza uma relação formada por outras constantes com o valor igual à $r s \rho_o$
s	Simboliza uma relação entre frequências com o valor igual à $\frac{\omega^2 - \omega_T^2}{\omega_L^2 - \omega_T^2}$
L_2	Simboliza uma relação formada por outras constantes com o valor igual à $\frac{2i}{s} A_2 N_2 [\bar{d}_1 - \bar{d}_2]$
L_4	Simboliza uma relação formada por outras constantes com o valor igual à $\frac{2i}{s} A_4 N_4 [\bar{d}_1 - \bar{d}_2]$
M_2	Simboliza uma relação formada por outras constantes com o valor igual à $[L_4 - L_2 \cosh (2k_x d_o)]$
M_4	Simboliza uma relação formada por outras constantes com o valor igual à $[L_4 \cosh (2k_x d_o) - L_2]$
\bar{d}_1	Constante usada para simplificar algumas expressões. Possui o valor igual à $1 - \delta_d \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \frac{k_x}{s k_L} \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)$

-
- \bar{d}_2 Constante usada para simplificar algumas expressões. Possui o valor igual à $1 + \frac{sk_L}{k_x} \frac{\sin k_L (\frac{L}{2} - d_o)}{\sinh k_x (\frac{L}{2} - d_o)} - \cos k_L (\frac{L}{2} - d_o) \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o - \frac{sk_L}{k_x} \delta_d \frac{\sin k_L (\frac{L}{2} - d_o)}{\sinh k_x (\frac{L}{2} - d_o)} \right) \times \cosh k_x (\frac{L}{2} - d_o)$
- \bar{d}_3 Constante usada para simplificar algumas expressões. Possui o valor igual à $\frac{k_x}{sk_L} \sinh k_x (\frac{L}{2} - d_o) \cos k_L (\frac{L}{2} - d_o) + \delta_d \sin k_L (\frac{L}{2} - d_o)$
- C_q Constante usada para simplificar algumas expressões. Possui o valor igual à $\frac{e}{\pi L} \tilde{C}_q$
- \tilde{C}_q Constante usada para simplificar algumas expressões. Possui o valor igual à $\int_{-L/2}^{L/2} \cos \left(\frac{\pi z}{L} \right) \sin \left(\frac{2\pi z}{L} \right) \varphi(z) dz$

Sumário

Resumo	vi
Abstract	vii
Lista de Figuras	viii
Lista de Tabelas	ix
Lista de Símbolos	x
Introdução	1
I Semicondutores	3
1.1 Aproximação Adiabática	3
1.2 Zonas de Brillouin	4
1.3 Estudo de Semicondutores	5
1.3.1 Tipos de Semicondutores	6
1.3.2 Dinâmica de uma rede cristalina	7
1.3.3 Fônons	9
1.3.4 Interação de Elétron-Fônon	11
II Poço Quântico	15
2.1 Bandas	15
2.2 Heterojunções	17
2.3 Heteroestruturas	18
2.4 Resolução do Poço Quântico	20
2.4.1 Solução Eletrônica	21
2.4.2 Equação de movimento para pequenas oscilações da rede	25
2.4.3 Cálculo de deslocamentos	29
2.4.4 Campo Elétrico	32
2.4.5 Condições de Contorno	37

III Poço Quântico com Barreira	42
3.1 Estudo do poço potencial com barreira	43
3.2 Aplicação das condições de contorno	44
3.3 Relações	49
3.4 Cálculos de deslocamentos	60
3.4.1 Cálculo do u_x	60
3.4.2 Cálculo do u_z	65
3.5 Campo Elétrico	68
3.5.1 Cálculo do E_x	68
3.5.2 Cálculo do E_z	73
3.5.3 Campo elétrico na região (3)	77
3.6 Potencial elétrico	77
3.6.1 Cálculo do Potencial na região $d_o \leq z \leq \frac{L}{2}$	78
3.6.2 Cálculo do Potencial na região $-d_o \geq z \geq -\frac{L}{2}$	79
3.6.3 Cálculo do Potencial na região $ z \leq d_o$	80
3.7 Relação de Dispersão	81
3.8 Taxa de Espalhamento	83
IV Análise e Discussão	89
4.1 Conclusões	89
Apêndice A Constante de Normalização	92
Referências Bibliográficas	97

Introdução

“No universo infinito da literatura sempre se abrem outros caminhos a explorar, novíssimos ou bem antigos, estilos e formas que podem mudar nossa imagem de mundo... Mas se a literatura não basta para me assegurar que não estou apenas perseguindo sonhos, então busco na ciência alimento para as minhas visões das quais todo pesadume tenha sido excluído...”

(Italo Calvino)

O estudo do confinamento de fônons ópticos é uma questão bastante atual no que diz respeito a semicondutores de baixa dimensionalidade, possui um papel importante na redução da taxa de espalhamento de elétrons, e na limitação de sua mobilidade.

Para entender esse problema, monocamadas serão introduzidas no interior do poço quântico, e.g. InAs em AlAs-GaAs. Neste trabalho será desenvolvida a investigação de algumas propriedades das monocamadas, e de que forma elas afetam a da taxa de espalhamento eletrônica[2]-[8].

Os modelos mais utilizados são: (i) DC (Dielectric Continuum) [1], que despreza a natureza mecânica que conecta os fônons dos diferentes materiais que constituem o poço na interface dos mesmos e considera apenas os modos eletromagnéticos, i.e., longitudinais (LO) e interface (IP), ambos satisfazendo as equações de Maxwell, e (ii) o modelo híbrido (HM) que leva em conta a natureza mecânica dos fônons na interface e inclui também as condições de contorno eletromagnéticas (DC). Neste último caso, os três modos possíveis, Longitudinal (LO), Transversal (TO) e de Interface (IP) são hibridizados [8].

O primeiro capítulo tem como objetivo o estudo de alguns conceitos e métodos fundamentais para a compreensão do problema. A aproximação adiabática é necessária para encontrar a taxa de espalhamento. As regiões no espaço \mathbf{k} separadas pelas zonas de Brillouin definem os gaps, vide a figura 2.1.1.

Existe três grandes classes de materiais: condutores, isolantes e semicondutores, vamos aprender a classifica-los de acordo com as estrutura de banda, observe a figura 1.3.2. Os cristais são sistemas constituídos de um grande número de átomos regularmente posicio-

nados, a dinâmica destes sistemas também será abordada. Os quatro modos de vibração conhecidos como fônon são denominados como longitudinais e transversais ópticos (LO e TO) e acústicos (LA e TA). As suas interações com os elétrons são abordadas de maneira separada. Todas estas interações serão discutidas.

No segundo capítulo, o conhecimento sobre a estrutura formada pelas bandas de valência, condução e gaps será aprofundado, e então heterojunções e heteroestruturas serão entendidas. Neste capítulo a equação de Schorödinger para o poço quântico do tipo AlAs-GaAs será solucionada [2]-[8].

O estudo de confinamento de fônons óticos será feito no capítulo 3. Para desenvolver este estudo um poço quântico do tipo AlAs-GaAs com uma camada de espessura $2d_o$ introduzida em seu interior. Será realizado o cálculo dos deslocamentos, campo elétrico, potencial elétrico, relação de dispersão. Para encontrar e taxa de espalhamento é necessário conhecer interação de Föhrlich, ou seja, a interação entre um elétron e um potencial.

Os resultados deste estudo serão mostrados também em forma de gráficos, plotados a partir das expressões encontradas para o potencial, relação de dispersão e taxa de espalhamento. Por fim estes gráficos serão explicados. Os resultados e discussões serão abordados no quarto capítulo.

Os semicondutores usados neste problema são de baixa dimensionalidade, ou seja, à análise será feita em um sistema quase bidimensional, (x,z) , ou seja, x representa o plano xy que é muito pequeno com relação a z . Todas as grandezas vetoriais foram denominadas com uma letra em negrito.

Capítulo I

Semicondutores

“A mente que se abre a uma nova ideia jamais voltará ao seu tamanho original”.

(Albert Einstein)

Neste capítulo o estudo “Interação elétron-fônon em semicondutores polares de baixa dimensionalidade” tem seu início. Aqui serão explicitados conceitos e os métodos necessários para a compreensão do que será abordado posteriormente a cerca do referido tema.

1.1 Aproximação Adiabática

Para entender a aproximação adiabática ou de Born-Oppenheimer de um sistema, utilizaremos como exemplo, uma molécula. Neste caso, o núcleo é mais pesado do que os elétrons, e se movem muito mais lentamente, ou seja, como se o núcleo não deslocasse de sua posição inicial.

Considera-se que o sistema tenha elétrons de massa μ e núcleos de massa M , onde r e R são as coordenadas a partir do centro de massa do sistema e do núcleo respectivamente. O Hamiltoniano que descreverá o seu estado interno será representado pela equação:

$$H = T_R + T_r + V(r, R), \quad (1.1.1)$$

onde, T_r , T_R e $V(r, R)$ são os operadores energia cinética dos elétrons, do núcleo e energia potencial da interação entre todas as partículas. Esta aproximação parte do princípio de que T_r pode ser considerado como uma pequena perturbação. Assim de acordo com a teoria da perturbação, a condição da aplicabilidade da aproximação adiabática se resume

na relação de desigualdade:

$$\left| \langle \phi_{m\nu}^o | \hat{\Lambda}_{mn} | \phi_{m\nu'}^o \rangle \right| \ll |E_{m\nu}^o - E_{m\nu'}^o|, \quad (1.1.2)$$

para m e ν e ν' arbitrário. $\phi_{m\nu}$ é uma autofunção do oscilador, n determina todos os números quânticos que caracterizam os estados estacionários, m determina cada estado de movimento das partículas mais leves, ν número quântico que diferencia o estado de movimento, ou seja, quando presente a expressão refere-se ao movimento das cargas mais pesadas sem ele os das cargas mais leves, E é a energia do sistema e $\hat{\Lambda}$ é um operador dado pela expressão (1.1.3) [15].

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}_{mn} = & \frac{\hbar^2}{M} \sum_j \int \varphi_m^*(R, r) \frac{\partial}{\partial R_j} \varphi_n(R, r) dr \frac{\partial}{\partial R_j} \\ & - \int \varphi_m^*(R, r) T_R \varphi_n(R, r) dr \end{aligned} \quad (1.1.3)$$

1.2 Zonas de Brillouin

Considere que a energia dos elétrons livres em um estado k seja descrita pela relação $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, observe a figura 1.2.1. Iniciando uma análise a partir da parte inferior, com $k = 0$. Alguns valores para k são obtidos, como: $\pm \frac{\pi}{a}$, $k = \pm \frac{2\pi}{a}$, etc. Estes pontos representam os estados afetados, e os Limites das Zonas de Brillouin.

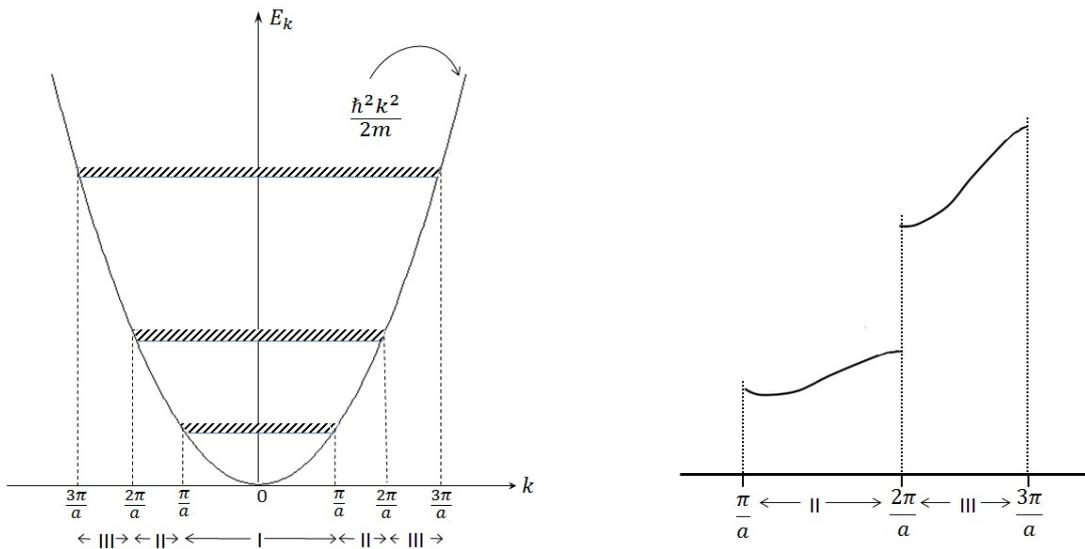


Figura 1.2.1: *Zonas de Brillouin*

A distância entre $-\frac{\pi}{a}$ e $\frac{\pi}{a}$ é chamada de primeira zona de Brillouin, a distância entre

$-\frac{2\pi}{a}$ e $-\frac{\pi}{a}$ e entre $\frac{\pi}{a}$ e $\frac{2\pi}{a}$ é chamada de segunda zona de Brillouin, a distância entre $-\frac{3\pi}{a}$ e $-\frac{2\pi}{a}$ e entre $\frac{2\pi}{a}$ e $\frac{3\pi}{a}$ é chamada de terceira zona de Brillouin, etc. Tais pontos podem ser observados na figura 1.2.1.

A figura 1.2.1 representa de forma ampliada a zona da relação de dispersão de E em função de k, onde I, II e III são chamados de primeira, segunda e terceira zonas de Brillouin respectivamente. Importante dizer que na proximidade dos pontos que representam tais zonas a curvatura é alterada e juntam-se suavemente para os valores de energia calculados quando $\pm\frac{\pi}{a}$, $\pm\frac{2\pi}{a}$, e etc[13].

1.3 Estudo de Semicondutores

Na natureza existem os mais variados tipos de materiais, com muitas propriedades a serem estudadas. Tendo em vista principalmente a mobilidade dos elétrons, ou seja, a condutividade e número de ocupação, estes materiais podem ser classificados em três grandes classes: condutores, isolantes e semicondutores.

Condutores são os materiais cuja principal característica é a alta condutividade e o número de ocupação, em outras palavras, os elétrons conseguem transitar com facilidade entre os átomos. Já os Isolantes possuem uma estrutura em que os elétrons são fortemente ligados aos átomos por ligações iônicas e covalentes, ou seja, pode-se dizer nenhuma corrente flui pelo material.

Os Semicondutores são materiais que apresentam como principal característica o fato de possuírem geralmente energia de *band gaps* compreendida entre 0 e 4 eV [10], e bastante versáteis. São caracterizados também por possuírem uma resistividade elétrica compreendida no intervalo 10^{-2} à $10^9 \Omega cm$, e gaps de energia (E_g) entre as bandas de condução e de valência, figura 1.3.2 para excitações eletrônicas[10].

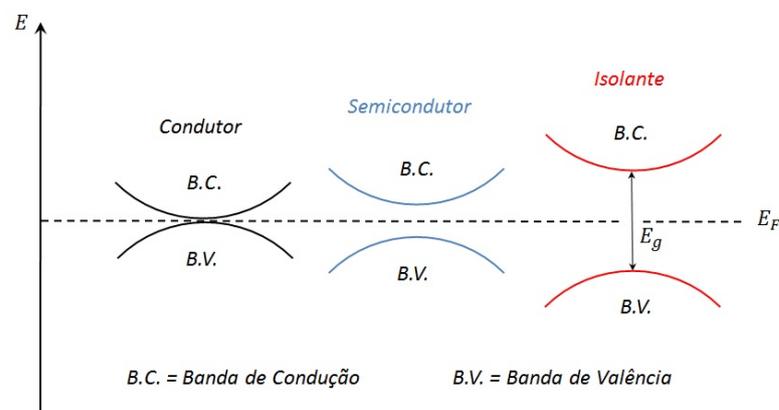


Figura 1.3.2: *Estrutura de bandas dos semicondutores, isolantes e condutores*

1.3.1 Tipos de Semicondutores

Os semicondutores podem ser classificados de acordo com sua composição. A estrutura de banda no ponto $k = 0$ é apresentada na figura 1.3.2. Observe abaixo alguns tipos e suas aplicações[10].

Os *Semicondutores Elementares* formam um grande grupo. Os mais conhecidos são o silício (*Si*) e o Germânio (*Ge*), pois formam a base para indústria eletrônica, tornando-se fundamentais para a tecnologia moderna. Devido às estruturas cristalinas, onde cada átomo tem 4 vizinhos mais próximos ($N = 4$) formando assim uma estrutura tetraédrica. Possibilitam o crescimento de estruturas não cristalinas e outras estruturas mais complexas quando ligados a elementos do grupo V e VI com $N = 3$ e $N = 2$ respectivamente.

Compostos binários são formados por elementos dos grupos III e V. Possuem propriedades semelhantes aos do grupo IV, por exemplo o arseneto de gálio e alumínio (*GaAs*) e (*AlAs*) respectivamente, que serão usados nesta pesquisa. Estes compostos são utilizados em diodos e na emissão de luz azul e lasers. As ligações nestes materiais tornam-se praticamente iônicas aumentando a interação de Coulomb entre os íons. A ionicidade fica ainda maior para os compostos entre os grupos II e VI, permitindo assim aplicações em monitores e lasers. Já os formados com os grupos I e VII E_g é grande e são considerados como isolantes. Existe também uma estrutura com $N = 6$, formada devido ao aumento da energia de coesão do cristal e à interação de Coulomb e a partir do grupo VI que são denominadas de rock-salt. Tais estruturas são semicondutores com alta ionicidade e band gap pequena, e importantes como detectores de infra vermelho.

Os *Óxidos* geralmente são isolantes. Porém alguns são semicondutores com um potencial limitado para aplicações. A exceção é o óxido de zinco (*ZnO*) que está presente na estrutura das fitas adesivas, na colagem do gesso e muito usado como transdutor.

Em camadas são caracterizados por possuírem uma estrutura na forma de camadas. As ligações entre as camadas são covalentes bem mais fortes do que as de Van der Waals. Os elétrons possuem um comportamento quase bidimensional. Um exemplo é o iodeto de chumbo (*PbI₂*).

Orgânicos compostos em que a base da estrutura é o carbono (*C*). Com relação aos inorgânicos possuem vantagens pelo fato serem facilmente adaptados. Um exemplo é o poliacetileno ($[CH_2]_n$).

Magnéticos formados por elementos que possuem íons magnéticos, que é o caso do európio (*Eu*) e o manganês (*Mn*) por exemplo. Têm propriedades semicondutoras e magnéticas diferente como o ferromagnetismo e o antiferromagnetismo dependendo da quantidade de íons. Podem ser usados como moduladores ópticos e estão ligados ao

fenômeno magneto-resistência colossal (CMR).

Há ainda vários semicondutores que não se enquadram nas categorias acima citadas, que são o caso dos compostos que possuem as formulas I-III-VI₂ e II-IV-V₂, tais como os *AgGaS₂*, interessante por suas propriedades ópticas não lineares, *CuInSe₂*, útil para células solares, e *ZnSiP₂*[10].

1.3.2 Dinâmica de uma rede cristalina

Cristais são sistemas constituídos de um grande número de átomos regularmente posicionados. No caso de uma rede cristalina o Hamiltoniano que descreve um cristal perfeito é dado pela equação:

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_j \frac{p_j^2}{2M_j} + \frac{1}{2} \sum'_{j,j'} \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{4\pi\epsilon_0 |R_j - R_{j'}|} - \sum_{j,i} \frac{Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - R_j|} + \frac{1}{2} \sum'_{i,i'} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_{i'}|} \quad (1.3.4)$$

R_j , p_j , M_j e r_i , p_i e m_i são as posições, momento, massas do núcleo e elétron respectivamente. O Z_j é o numero atômico ou carga do núcleo. O \sum' significa o somatório sobre os pares de índices i, j e $i'j'$, onde $i \neq i'$ e $j \neq j'$.

Os elétrons podem ser separados em dois grupos: os que se movem rigidamente com o núcleo de modo a formar o que será referido como íon, e os que interagem com esses íons através dos pseudopotenciais. Estes são os elétrons de valência. Os movimentos nucleares é dado pelo Hamiltoniano H_{ion} , que consiste em uma soma de três termos: o primeiro a energia cinética do íon, o segundo a interação entre íons e o terceiro é o hamiltoniano da interação entre o elétron de valência e o núcleo, H_{e-n} .

$$H_{ion}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_n) = \sum_j \frac{p_j^2}{2M_j} + \sum'_{j,j'} \frac{1}{2} \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}|} - \sum_{j,i} \frac{Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|}. \quad (1.3.5)$$

Afim de desacoplar o movimento iônico do eletrônico, é necessário usar a aproximação de Born-Oppenheimer ou aproximação adiabática. A equação (1.3.4) é formada pela soma de dois hamiltonianos. Um deles descreve o movimento eletrônico, com o qual se obtém a energia dos elétrons em função das posições dos íons. E outro que descreve movimento iônico, além de garantir que os íons não podem seguir o movimento eletrônico e, portanto, eles veem em média uma vez o potencial eletrônico adiabático. Dessa forma tal hamiltoniano pode ser escrito como na equação:

$$H_{ion} = H_0(R_{10}, \dots, R_{n0}) + H'(\delta R_{10}, \dots, \delta R_{n0}). \quad (1.3.6)$$

$H_0(R_{10}, \dots, R_{n0})$ é o Hamiltoniano do cristal com todos os núcleos nas suas posições de equilíbrio e $H'(\delta R_{10}, \dots, \delta R_{n0})$ é a variação em H_{ion} devido aos deslocamentos dos núcleos de pequenas quantidades $\delta R_{10}, \dots, \delta R_{n0}$ da posição de equilíbrio, [10].

Para Diagonalizar H' , é preciso fazer uma expansão de H_{ion} em torno $\delta R_{10}, \dots, \delta R_{n0}$. Os termos mais importantes da expansão para a vibração do cristal são os de segunda ordem em $\delta(R_j - R_k)$. Os movimentos dos núcleos são descritos como uma coleção de osciladores harmônicos simples, por isso leva o nome de aproximação harmônica, e tem como importante limitação o fato de que alguns fenômenos não podem ser explicados, a expansão térmica por exemplo.

Chamando o deslocamento do equilíbrio do íon k na célula unitária l de u_{kl} obtém-se então uma notação mais simplificada, como na equação:

$$H'(\mathbf{u}_{kl}) = \frac{1}{2} M_k \left(\frac{d\mathbf{u}_{kl}}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{k'l'} \mathbf{u}_{kl} \cdot \Phi(\mathbf{u}_{kl}, k'l') \cdot \mathbf{u}_{k'l'}. \quad (1.3.7)$$

$H'(\mathbf{u}_{kl})$ representa a variação do íon no Hamiltoniano induzido pelo deslocamento do íon (kl) , enquanto todos os outros átomos são mantidos em sua posição de equilíbrio. As constantes de força, por exemplo, a força sobre íons (kl) , devido ao deslocamento $\mathbf{u}_{k'l'}$ do íon $k'l'$ é dado por $-\Phi(kl, k'l')$, que descrevem a interação entre os íons (kl) e $(k'l')$ constituem a matriz $\Phi(kl, k'l')$ [10].

Para determinar a dinâmica de rede descrita em (1.3.7) deve-se tratar o Hamiltoniano classicamente, isto é resolver a equação do movimento, ou seja, este Hamiltoniano deverá descrever a energia de uma coleção de partículas com oscilações de pequena amplitude. Em seguida quantizar as energias dos modos normais (fônons). Devido à simetria translacional de $\Phi(kl, k'l')$ os deslocamentos atômicos que diagonalizam (1.3.7) serão expressos em termos de ondas planas, análogas às funções de Bloch para elétrons em um cristal, representada pela equação:

$$\mathbf{u}_{kl}(\mathbf{q}, \omega) = \mathbf{u}_{k0} \exp i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_l - \omega t). \quad (1.3.8)$$

\mathbf{u}_{kl} é o deslocamento de ordem k th do íon l th da célula unitária especificada pela estrutura do vetor \mathbf{R}_l , \mathbf{u}_{k0} é o deslocamento de um íon correspondente na célula unitária localizada na origem de uma onda de Bloch, q e ω representam o vetor e a frequência de ondas, respectivamente.

Uma importante diferença entre fônons e elétrons das ondas de Bloch, é que enquanto um elétron pode estar em qualquer lugar no cristal, as posições dos íons, na aproximação clássica, são discretas.

Em (1.3.8) \mathbf{R}_l são redes de vetores, e significa que duas ondas serão equivalentes quando os vetores de onda diferem por um vetor de rede recíproca. As frequências dos fônons serão idênticas em qualquer zona de Brillouin, de modo que o gráfico, ou curvas

de dispersão de fônons, da frequência de onda versus as vibrações da rede em cristais são sempre apresentados no esquema de zona reduzida. O número de ondas independentes, ou graus de liberdade, é igual a três vezes o número de átomos no cristal. Substituindo (1.3.8) em (1.3.7) encontra-se u_{k0} [10].

$$\sum_{k'} [D_{kk'}(\mathbf{q}) - \omega^2 \delta_{kk'}] \mathbf{u}_{k'0} = 0. \quad (1.3.9)$$

$D_{kk'}(\mathbf{q})$ é a matriz dinâmica. Resolvendo a equação secular, (1.3.10), encontra-se as frequências vibracionais ω .

$$|D_{kk'}(\mathbf{q}) - \omega^2 \delta_{kk'}| = 0. \quad (1.3.10)$$

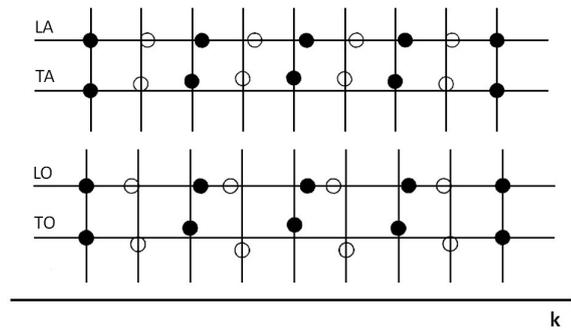
Por fim, ao encontrar as soluções da equação (1.3.10) e substituir em (1.3.9) os valores das amplitudes vibracionais \mathbf{u}_{k0} serão obtidos. É importante salientar que as principais diferenças entre o tratamento clássico realizado acima e um quântico é que no caso quântico os níveis de energia dos modos vibracionais da frequência são quantificados como $[n + (1/2)]\hbar\omega$ e os operadores de criação e aniquilação de um quantum de vibração (ou fônon) são expressos em termos de \mathbf{u}_{k0} [10].

1.3.3 Fônons

Considerado também como sendo um bóson que possuem spin 0, o fônon é cada quantum de vibração de uma rede. Os átomos vibram em torno dos sítios da rede estática, até em baixas temperaturas. São tão lentos que podem ser acompanhados pelos elétrons facilmente. Ao comparar as distâncias entre os átomos e os vizinhos mais próximos, percebe-se que as amplitudes dos deslocamentos vibracionais são insignificantes. Pois os átomos permanecem praticamente na mesma posição devido a grande força elástica, ou seja, as ligações podem ser consideradas como molas. Assim ao especificar a constante dessas “molas” o estudo da energia x frequência do movimento variacional poderá ser feito através da lei de Hooke e das equações de movimento da mecânica clássica. As ondas variacionais caracterizadas pelos vetores de onda \mathbf{k} , com energia ($E_{\mathbf{k}} = \hbar\omega_{\mathbf{k}}$) satisfazem necessariamente às mesmas condições de contorno periódicas como onda e elétron, ou seja pode ser tratada como uma partícula chamada fônon [13].

Os fônons podem ser classificados como transversal ou longitudinal ao longo de direção de alta simetria, de acordo com os deslocamentos perpendiculares ou paralelos à direção do vetor de onda \mathbf{k} observe a figura 1.3.3.

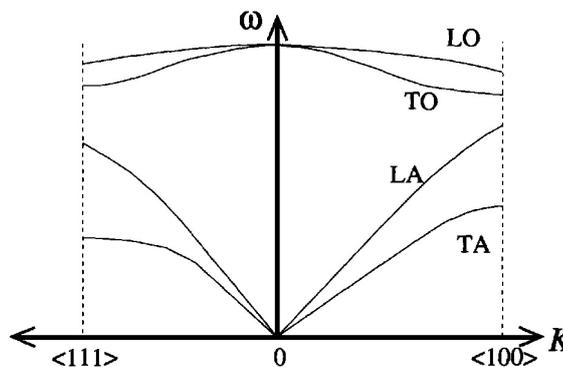
Os quatro modos de vibrações conhecidos como fônons são denominados como longitudinais e transversais ópticos (LO e TO) e acústicos (LA e TA), observe a figura 1.3.3.

Figura 1.3.3: *Modos de vibrações*

A figura 1.3.3 ilustra os modos de vibrações de uma rede, fônons. Nos modos acústicos a vibração dos átomos vizinhos, bolinhas brancas e pretas, estão em fase, no caso dos ópticos em fase oposta.

Os fônons (LO) e (TO), são degenerados no centro da zona, no caso do Si, e nos cristais de zinc-blend devido a estrutura de simetria cúbica, exatamente no centro da zona. Perto do centro da zona no GaAs e no zinc-blend-type a energia dos fônons LO é maior do que no TO, no caso dos vetores de onda a frequência do fônon LO é maior do que a dos fônons TO em GaAs e outros cristais de zinc-blend isso deve-se a natureza parcialmente iônica da ligação em cristais zinc-blend. Por exemplo, no GaAs os átomos de As contribuem com mais elétrons para a ligação do que os átomos de Ga.

Os fônons (TA) são ondas sonoras de cisalhamento e o (LA) ondas sonoras de compressão. Em ambas as ondas as partículas se deslocam paralelamente a direção do som. No (TA) o deslocamento é mais rápido do que em (LA). Existem ainda algumas características relacionadas com a natureza das ligações covalentes dos cristais, são elas; o fato do (TA) possuir uma curva de dispersão relativamente plana perto da borda da zona e o fato das energias do (TA) serem muito menores do que as do (LA)[10].

Figura 1.3.4: *Relação de dispersão [9]*

A figura 1.3.4 mostra as curvas de dispersão para os fônons, ou seja, os quatro modos de vibrações LO, TO, LA TA.

Para se calcular a curva de dispersão dos fônons é necessário conhecer as constantes de força, resolver a equação (1.3.9). Para obter tais constantes é necessário modelar as interações entre íons de acordo com o número de parâmetros, que serão ajustados utilizando alguns valores experimentais conhecidos como, a velocidade do som, frequências de fônons no centro-zona, módulo de volume, etc.

Existem algumas formas de modelar as interações entre íons tais como: *Modelo das constantes de força ou Born-von-Kármán*, onde os átomos são considerados esferas rígidas ligadas por molas. O *shell Model* que se baseia no argumento de que os átomos são considerados como pontos de massa conectados por molas, os elétrons de valência em semicondutores covalentes tais como Ge e Si não são rigidamente ligados aos íons, e que cada átomo será um núcleo de íons rígidos rodeado por um invólucro de elétrons de valência que pode mover-se em relação aos núcleos. O *Modelo Bond* no qual os elétrons de valência nos semicondutores diamond-type e zinc-blend-type formam ligações altamente direcionadas, e são importantes para explicar a coesão nos semicondutores, e na determinação das frequências vibratórias, dentre outras[13].

1.3.4 Interação de Elétron-Fônon

O hamiltoniano de um cristal pode ser fragmentado em três termos $H_{ion}(R_j)$, $H_e(r_i, R_{j0})$, $H_{e-ion}(\mathbf{r}_j, \delta\mathbf{R}_j)$ dentro da aproximação de Born-Oppenheimer. Os dois primeiros termos abordam separadamente os movimentos dos íons e elétrons. O terceiro termo descreve a interação de elétron-fônon, ou seja, a interação entre elétrons e íons.

Considerando à aproximação de Born-Oppenheimer, e supondo que os elétrons podem responder instantaneamente ao movimento iônico, de modo que uma expansão em série de Taylor do Hamiltoniano eletrônico $H_{e-ion}(\mathbf{r}_j, \delta\mathbf{R}_j)$ pode ser realizada:

$$H_{e-ion}(\mathbf{r}_j, \delta\mathbf{R}_j) = \sum_j \left(\frac{\partial H_e}{\partial \mathbf{R}_j} \right) \Big|_{\mathbf{R}_{j0}} \cdot \delta\mathbf{R}_j + \dots \quad (1.3.11)$$

Para calcular a interação de elétron-fônon é preciso fazer aproximações, pois geralmente não se conhece o Hamiltoniano eletrônico $H_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j)$. Com a intenção de simplificar considera-se preferencialmente os fônons de comprimentos de onda em cristais do diamond-type e zinc-blend-type, ou seja com dois átomos por célula unitária. Os fônons TA, LA, TO e LO são os que possuem os quatro tipos comprimentos de onda e suas interações com os elétrons são abordadas de maneira separada[10].

Tensor de tensão e Potencial de deformação

A idéia aqui é expressar as interações de elétron-fônon em um semiconductor explicitamente em termos do potencial de deformação. O teorema do potencial de deformação corresponde aos deslocamentos atômicos que podem equivaler a uma alteração do cristal, isso para o caso de comprimentos de onda dos fônons acústicos. As energias eletrônicas sofrerão alterações devido às distorções estáticas da rede, e que serão descritas pelos potenciais de deformação, em diferentes pontos da zona de Brillouin. O coeficiente associado ao potencial de deformação do cristal é $\frac{\partial E_{nk}}{\partial \mathbf{R}_j}$.

O tensor antissimétrico f_{ij} descreve uma rotação do cristal e não altera as energias dos elétrons. Já o simétrico ou tensor de tensão e_{ij} , descreve uma tensão induzida no cristal pelos deslocamentos atômicos que pode modificar as energias eletrônicas. A equação (1.3.12) representa tais tensores[10].

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \delta \mathbf{R}_i}{\partial \mathbf{R}_j} + \frac{\partial \delta \mathbf{R}_j}{\partial \mathbf{R}_i} \right) \quad \text{e} \quad f_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \delta \mathbf{R}_i}{\partial \mathbf{R}_j} - \frac{\partial \delta \mathbf{R}_j}{\partial \mathbf{R}_i} \right) \quad (1.3.12)$$

A soma destes tensores gera o tensor de segunda ordem d_{ij} , representado por:

$$d_{ij} = \frac{\partial(\delta \mathbf{R}_i)}{\partial \mathbf{R}_j}. \quad (1.3.13)$$

Interação de Elétron-Fônons acústicos

Neste caso os fônons LA produzem uma alteração no volume do cristal, que por sua vez provoca alterações na banda de energia e na simetria do cristal.

Os fônons TA são ondas de cisalhamento diferentemente dos fônons LA que possuem componentes de dilatação que geralmente são até mais importantes. O efeito mais relevante do shear strain, ou da deformação de corte, é o fato de levantar uma degenerescência de bandas de energia em pontos de alta simetria da zona de Brillouin[10].

Interação Piezoelétrica de elétron-fônons acústicos

O efeito piezoelétrico é causado por uma polarização elétrica macroscópica de campo E induzido por um stress em cristais sem centro de simetria. Pode ser também descrito ainda como um campo elétrico induzido por uma tensão[10].

O campo elétrico induzido é um vetor, ou um tensor de rank 1, quando o tensor de tensão e for de rank 2, e assim a constante de proporcionalidade pode ser denotada por

um tensor eletromecânico e_m de rank 3 [10]. Um meio que possui uma constante dielétrica ε_∞ possui um campo dado por:

$$E = (-4\pi) \frac{(e_m \cdot e)}{\varepsilon_\infty} \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_o} \right). \quad (1.3.14)$$

O Hamiltoniano do efeito piezoelétrico da interação elétron-fônon é representado pela equação:

$$H_{pe} = (4\pi) \frac{|e|}{4\pi\varepsilon_o q^2 \varepsilon_\infty} \mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_m \cdot (q\delta\mathbf{R}). \quad (1.3.15)$$

Interações de elétron-fônon óptico do potencial de deformação

No interior da célula unitária primitiva os fônons ópticos podem ser considerados como “distorções microscópicas”

A interação de elétron-fônon óptico do potencial de deformação é semelhante a deformação de potencial da interação de fônons acústicos. Pode haver também uma interação do campo elétrico com elétrons do campo elétrico piezoelétrico. Quando acontece com os fônons acústicos a interação será denominada de interação de elétron longitudinal e com os fônons ópticos é conhecido como interação de Fröhlich.

O longo comprimento de onda do fônon óptico em cristais com dois ou mais átomos no interior da célula unitária proporciona deslocamentos relativos destes átomos. No interior da célula unitária os fônons ópticos podem ser considerados como “distorções microscópicas”. O hamiltoniano da equação (1.3.17) representa a interação em questão.

$$H_{e-OP} = D_{n,k} \left(\frac{u}{a_o} \right) \quad (1.3.16)$$

$D_{n,k}$ é o potencial de deformação do fônon óptico para a banda energia, u o deslocamento relativo entre dois átomos dentro da célula unitária primitiva de um semiconductor do tipo diamond-type ou zinc-blend associados com o centro da zona e fônons ópticos e a_o a distância entre eles[10].

Interação de Fröhlich

Uma polarização macroscópica oscilante, induz um campo elétrico E_{LO} , que pode ser expresso em termos de um potencial escalar ϕ_{LO} , em um cristal polar ou parcialmente iônico com dois átomos por célula unitária.

A interação de Fröhlich é definida como sendo uma interação entre um elétron de

carga $-|e|$ e o potencial macroscópico de Coulomb, a equação (1.3.17) representa o seu Hamiltoniano [10].

$$H_{Fr} = \sum_q \left(\frac{iC_F}{q} \right) \left\{ c_q^+ e^{i(q \cdot r - \omega_{LO} t)} \right\} + c.c. \quad (1.3.17)$$

com,

$$C_F = e \left[\frac{2\pi \hbar \omega_{LO}}{NV} (\varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1}) \right]^{1/2} (4\pi \varepsilon_0)^{-1/2} \quad (1.3.18)$$

\mathbf{u}_{LO} é a amplitude dos fônons, N e μ são número de células unitárias por unidade volume do cristal e a massa reduzida da célula primitiva respectivamente, ω_{LO} a frequência dos fônons LO e ε_∞ e ε_0 são constantes dielétricas de alta e de baixa frequência, nessa ordem.

A interação de Fröhlich depende do vetor de onda dos fônons, q^{-1} , ou seja, diverge quando $q \rightarrow 0$, o que não acontece em uma dispersão intrabanda de elétrons-fônons LO mesmo quando $q = 0$ pois $\omega_{LO} \neq 0$.

Pode-se também calcular em termos de parâmetros macroscópicos, como o ε_∞ e ε_0 , diferentemente dos potenciais de deformação para os fônons ópticos e acústicos que possui um cálculo mais trabalhoso. Vale dizer ainda que devido a conservação da energia e do momento os elétrons não sofrerão uma dispersão intrabanda.

Para facilitar a tabela I.1, resume os diferentes tipos interações elétron-fônon para dois semicondutores um polar (GaAs) e o outro não polar (Si). DP e PZ são o potencial de deformação e interações piezoelétricos, respectivamente. Os símbolos em parênteses são apenas notações para as interações[10].

Fônon	Si		GaAs	
	Condução	Valência	Condução	Valência
TA	DP(Ξ_u)	DP(b,d)	PZ	DP(b,d),PZ
LA	DP(Ξ_d, Ξ_u)	DP(a_v, b, d)	DP(a_c),PZ	DP(a_v, b, d),PZ
TO		DP(d_o)		DP(d_o)
LO		DP(d_o)	Fröhlich	DP(d_o), Fröhlich

Tabela I.1: *Resumo das interações elétron-fônon em Si e GaAs [10]*

Capítulo II

Poço Quântico

“Na vida, não existe nada a temer, mas a entender”
(Marie Curie)

Este capítulo tem como objetivo resolver a equação de Schorödinger para o poço quântico formado a partir das heteroestruturas construídas intercalando os semicondutores. Neste caso o arseneto de alumínio (AlAs) e o Arseneto de gálio (GaAs). Mostrará a estrutura dos semicondutores, as bandas de energia, tornando possível o entendimento das heterojunções e das heteroestruturas.

2.1 Bandas

Os semicondutores são compostos por elementos e/ou combinações que possuem uma estrutura covalente onde todos os átomos têm os seus orbitais eletrônicos sempre completos, ou seja não há elétrons livres, quando eles estão puros. Dentro de sua estrutura existem três tipos de bandas de energia diferentes, de acordo com a figura 2.1.1.

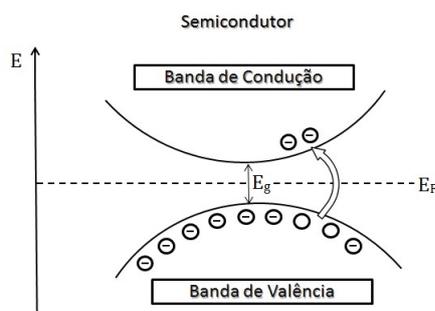


Figura 2.1.1: Diagrama da estrutura de bandas de um semicondutor. E_F é a energia de Fermi e E a energia em elétron-volt (eV);

A banda superior é denominada **Banda de Condução**, pois representa os estados eletrônicos excitados e os elétrons que as ocupa são os promovidos pela banda inferior, devido à dopagem e/ou aumento de temperatura, e favorecem o fluxo de corrente.

A banda inferior é conhecida como **banda de Valência**, se origina nos estados dos elétrons de valência que constituem as ligações covalentes que unem os átomos do cristal. Estão quase sempre cheias de elétrons. A carga elétrica de um sólido tem características que lembra um fluido, por exemplo, os estados vazios, denominados de buracos, comportam-se como bolhas dentro de um líquido. Estes estados formam-se quando os elétrons de valência ao serem excitados pulam para a banda de condução.

A região entre bandas é chamada de **band Gap** (banda Proibida), que possui uma energia E_g , a energia da band Gap, cujo o valor equivale a diferença de energia entre o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução. O elétron quando excitado possui uma energia que quando superior ao valor da E_g ele pula de uma banda para outra. Cada tipo de material possui uma banda com um valor específico.

A figura 2.1.1 traz a representação da estrutura de um semiconductor. As curvaturas usadas em ambas as bandas serão indicativos das medidas experimentais das massas efetivas, pois um cristal não é um vácuo logo é necessário introduzir um parâmetro empírico chamado massa efetiva para ajustar. No caso do *GaAs* por exemplo, as massas efetivas possuem o valor aproximado de $0.067m_0$ para um elétron na banda de condução, e $0.6m_0$ para um buraco pesado na banda de valência, o que indicará a inclinação da energia, ou seja a abertura da curvatura. Além disso, por convenção o zero da energia é colocado no topo da banda de valência. Essas características estão demonstradas na figura 2.1.2.

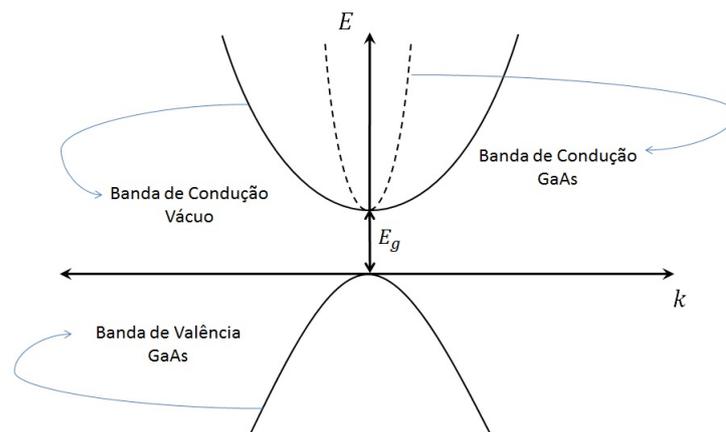


Figura 2.1.2: *Bandas de condução e valência do GaAs, e a diferença entre a banda de valência no vácuo e do GaAs*

A aproximação efetiva é usada para estudar as propriedades de um elétron em um semiconductor. Ela é feita através da introdução de um parâmetro de ajuste empírico chamado massa efetiva (m^*). A massa efetiva é a massa de um elétron no vácuo vezes um valor calculado experimentalmente, com foi dito acima, por exemplo, a do GaAs que

é $0.067m_0$, no caso da banda de condução [9].

2.2 Heterojunções

Uma heterojunção é a interface que ocorre entre duas camadas e/ou regiões de semicondutores cristalinos que possuem band gap desiguais o que permite a formação de uma estrutura com propriedades similares a dos poços quânticos, observe a figura 2.2.3, o que será discutido nos próximos tópicos deste capítulo.

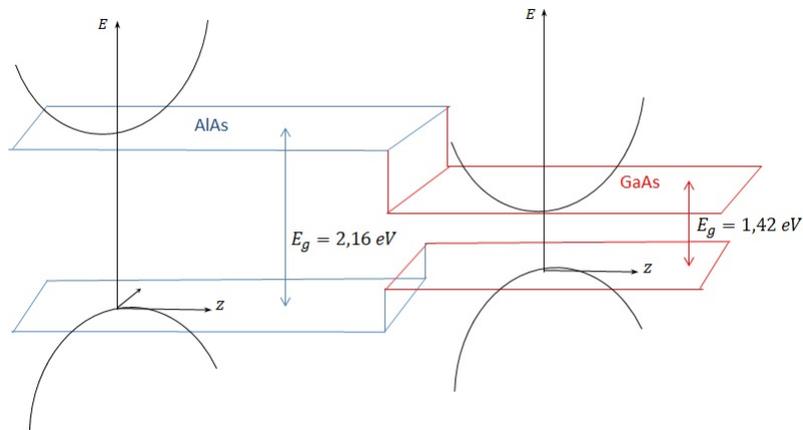


Figura 2.2.3: *Heterojunção onde o azul e vermelho significam dois semicondutores diferentes*

No caso de um elétron no cristal, a solução será a mesma de um elétron livre no vácuo, porém como o cristal possui um potencial complexo, será necessário introduzir a massa efetiva (m^*) na equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) = E\psi(z). \quad (2.2.1)$$

As descontinuidades que podem existir tanto na banda de condução quanto na banda de valência serão representadas na equação de Schrödinger por um termo de potencial constante (V), figura 2.2.4, que terá a forma da equação (2.2.2) quando a massa efetiva for a mesma dos materiais.

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (2.2.2)$$

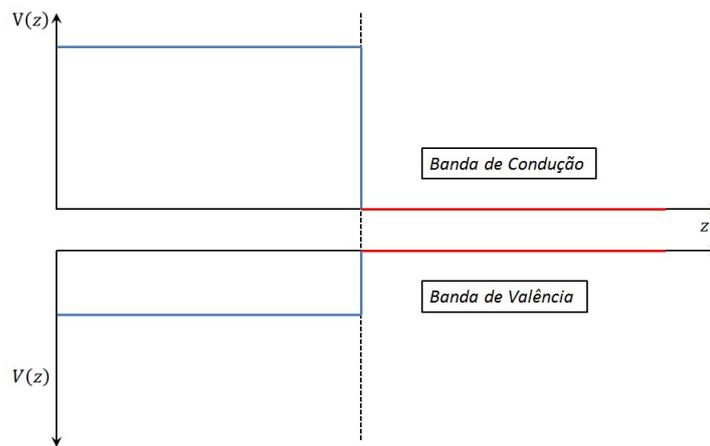


Figura 2.2.4: *Potencial unidimensional $V(z)$*

A figura 2.2.4 traz um exemplo de descontinuidade em uma heterojunção que representa um potencial unidimensional $V(z)$. O aumento da energia do buraco na banda de valência é medido para baixo [9].

2.3 Heteroestruturas

Heteroestruturas são estruturas formadas por um conjunto de heterojunções, como o ilustrado na figura:

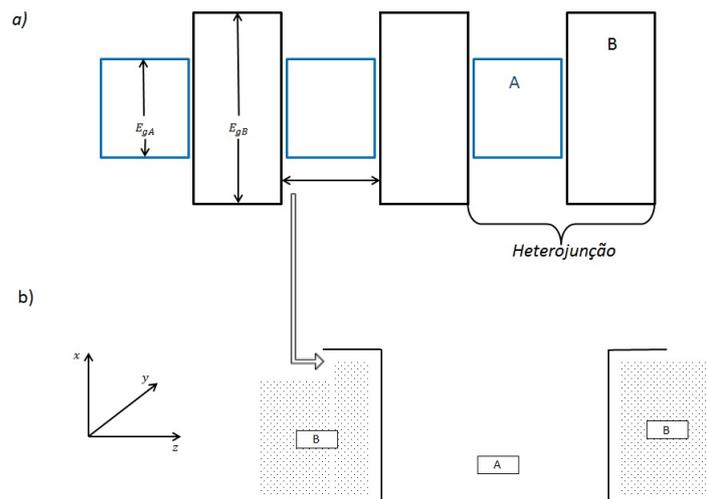


Figura 2.3.5: *Heterojunção e estrutura similar ao poço potencial*

A figura 2.3.5 a) mostra dois materiais semicondutores, A e B onde $E_{gA} < E_{gB}$. São intercalados formando heterojunções e uma heteroestrutura. Se A for fino o suficiente de modo que as propriedades quânticas sejam exibidas, a estrutura formada, B - A - B

pela de diferença das bands gaps terão propriedades de um poço quântico. Dentro dessa estrutura pode ser acrescentado uma liga dos materiais A e B, por exemplo, figura b).

Quando o sistema é alterado termicamente ou por meio da introdução de impurezas (outros átomos), os elétrons ganham energia. Quando esta energia atinge um valor superior a E_g , veja a figura 2.1.1, os elétrons (bolinha preta) pulam para a banda de condução e buracos (bolinha branca) são formados na banda de valência.

Com um numero maior de heterojunções é possível formar estruturas mais complexas como na figura 2.3.6.

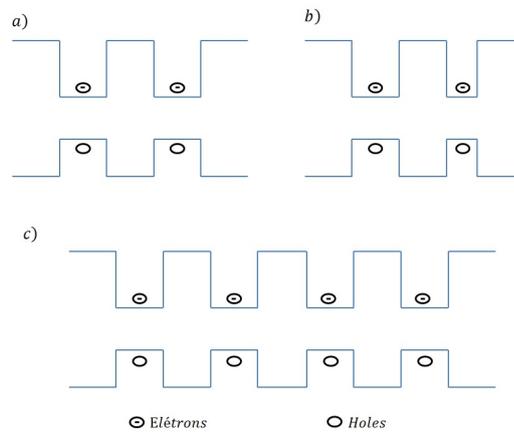


Figura 2.3.6: *Vários tipos de heteroestruturas. (a) e (b) representam poços quânticos duplos simétrico e assimétrico respectivamente e (c) uma superrede*

A figura 2.3.6 ilustra três tipos de heteroestruturas, no caso dos poços múltiplos (a) e (b) é um conjunto de poços isolados onde cada um possui suas próprias propriedades. Já nas superredes (c) há uma interação entre os poços.

Além dos tipos de estrutura mostrados até aqui existe uma estrutura em que os elétrons e buracos ficam confinados em camadas de semicondutores diferentes, Observe a figura 2.3.7. Isso acontece, pois as bandas de condução e de valência estão em materiais diferentes. Neste caso o tempo de recombinação dos portadores de carga será mais longo. Nos casos das heteroestruturas mostradas acima os portadores de carga estão na mesma região o que proporciona uma recombinação rápida.

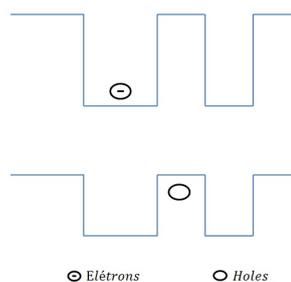


Figura 2.3.7: *Heteroestrutura com bandas de condução e de valência em materiais diferentes*

A motivação do estudo destas estruturas, e até estruturas mais complicadas, é entender as propriedades eletrônicas e ópticas desses materiais para serem utilizadas em dispositivos [9].

2.4 Resolução do Poço Quântico

Os semicondutores de microestruturas, $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ e o GaAs, formam heterojunções do tipo mais simples [13].

È possível produzir sistemas mais complexos compostos por várias camadas com espessuras bem controladas, intercalando uma fina camada de GaAs entre duas camadas grossas do AlAs uma vez que a condição relativa à natureza abrupta da interface satisfaz bem as estruturas destes materiais. Uma dupla heterojunção deste sistema será frequentemente denominado como poço quântico por terem propriedades semelhantes, veja a figura 2.4.8.

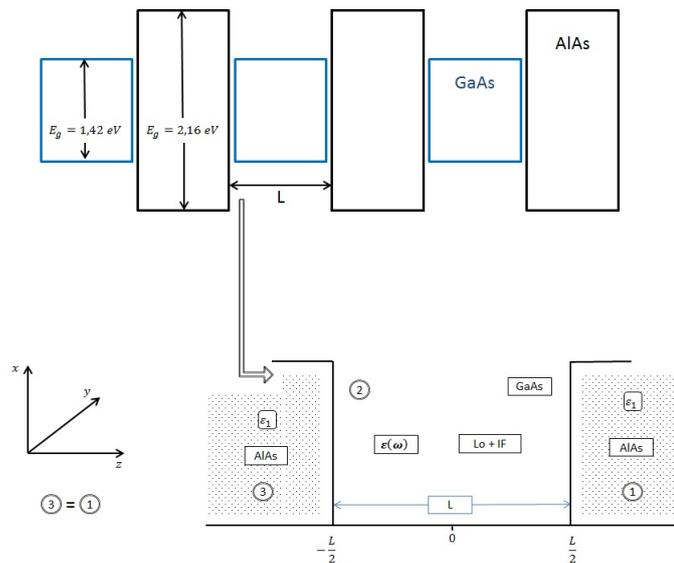


Figura 2.4.8: Poço quântico formado devido à diferença de energia de band Gap entre o AlAs e o GaAs

Uma vez que a alteração da estrutura eletrônica é abrupta e os dois materiais correspondem a uma rede na ausência de dopagem. As duas heterojunções são independentes e o diagrama de banda continua a ser o mesmo independente da largura do poço ou da espessura da liga.

2.4.1 Solução Eletrônica

Na mecânica quântica resolve-se a equação de Schrödinger para se obter o nível de energia de um elétron, aqui o elétron de valência, e a função de onda [13]-[14]. A equação que descreve o movimento de uma partícula livre é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, z) = E\psi(x, z) \quad (2.4.3)$$

Observe que a equação é bidimensional, pois a solução que será demonstrada é para um semiconductor de baixa dimensionalidade, logo, a coordenada y será considerada muito pequena com relação à x e z . Para resolver a equação (2.4.3) usa-se o método da separação de variáveis. Isto é, a função de onda será redefinida como:

$$\psi(x, z) = X(x) Z(z). \quad (2.4.4)$$

Aplicando (2.4.4) em (2.4.3), após algumas manipulações encontra-se:

$$\left(\frac{1}{X(x)} \frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{Z(z)} \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} \right) = -\frac{2m}{\hbar^2} E. \quad (2.4.5)$$

Para resolver a equação (2.4.5) basta igualar cada termo independente a $-\mathbf{k}^2$, e assim encontrar as seguintes equações:

$$\begin{cases} \left(\frac{1}{X(x)} \frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{Z(z)} \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} \right) = -\mathbf{k}^2 \\ -\frac{2m}{\hbar^2} E = -\mathbf{k}^2. \end{cases} \quad (2.4.6)$$

O vetor de onda é justamente $-\mathbf{k}^2$, ou seja,

$$\mathbf{k} = (k_x, k_z) \quad \longrightarrow \quad \mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_z^2 \quad (2.4.7)$$

Isolando E na segunda equação de (2.4.6) obtém-se a energia e com a equação (2.4.7) suas componentes, ou seja,

$$\mathbf{E} = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 \quad (2.4.8)$$

$$\begin{cases} E_x = \frac{\hbar^2}{2m} k_x^2 \\ E_z = \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 \end{cases} \quad (2.4.9)$$

O próximo passo será resolver a equação (2.4.10).

$$\frac{1}{X(x)} \frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{Z(z)} \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} = -k_x^2 - k_z^2 \quad (2.4.10)$$

A equação (2.4.10) gera as duas equações diferenciais,

$$\begin{cases} \frac{1}{X(x)} \frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} = -k_x^2 \\ \frac{1}{Z(z)} \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} = -k_z^2 \end{cases} \quad (2.4.11)$$

Na equação (2.4.11) ambas são equações diferenciais ordinárias de segunda ordem. Como são iguais só é necessário resolver uma delas, neste caso a equação em z , pois, é nossa direção de crescimento, como se trata de uma EDO a solução será a equação (2.4.12), onde A e B são denominadas como constante de normalização. Para calculá-las usa-se a expressão $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 1$. Assim o problema passa a ser de uma partícula dentro de um poço quântico, como na figura 2.4.8.

$$Z(x) = A \sin(kz) + B \cos(kz) \quad (2.4.12)$$

O próximo passo será aplicar a condição de contorno (2.4.13), o que vai gerar o sistema (2.4.14).

$$\begin{cases} Z_1(x) = Z_2(x) \\ \frac{dZ_1(z)}{dz} = \frac{dZ_2(z)}{dz} \end{cases} \quad (2.4.13)$$

$$\begin{cases} A \sin\left(k\frac{L}{2}\right) + B \cos\left(k\frac{L}{2}\right) = 0 \\ A \sin\left(k\frac{L}{2}\right) + B \cos\left(k\frac{L}{2}\right) = 0 \end{cases} \quad (2.4.14)$$

O passo seguinte será resolver o sistema de equações (2.4.14). Observe que $Z_2(z) = 0$ isso porque existe somente solução dentro do poço potencial uma vez que as barreiras são rígidas.

$$\begin{aligned} A = 0 \quad \text{ou} \quad \sin\left(k\frac{L}{2}\right) = 0 \\ B = 0 \quad \text{ou} \quad \cos\left(k\frac{L}{2}\right) = 0 \end{aligned} \quad (2.4.15)$$

A equação (2.4.15) é a solução para o sistema. Não existe um valor para k que anule o \sin e o \cos simultaneamente. Como A e B não podem ser nulos, pois a função de onda seria nula, então será necessário assumir duas soluções uma quando $\sin\left(k\frac{L}{2}\right) = 0$ e a outra quando $\cos\left(k\frac{L}{2}\right) = 0$, ou seja, a equação (2.4.16). Com os valores de k encontra-se a solução generalizada para o sistema (2.4.17).

$$\begin{cases} \sin\left(k\frac{L}{2}\right) = 0 & \longrightarrow & k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad \text{com} \quad n = 2, 4, \dots \\ \cos\left(k\frac{L}{2}\right) = 0 & \longrightarrow & k_n = \frac{n\pi}{L}, \quad \text{com} \quad n = 1, 3, \dots \end{cases} \quad (2.4.16)$$

Pode-se observar que no caso do $\sin\left(k\frac{L}{2}\right) = 0$ não existe $n = 0$ isso porque $k \neq 0$ e $L \neq 0$, logo $\frac{KL}{2} = 0$ não é solução.

$$\begin{cases} Z_n(z) = A_n \sin(k_n z) \\ Z_n(z) = B_n \cos(k_n z) \end{cases} \quad (2.4.17)$$

Uma vez que a equação (2.4.17) foi encontrada o próximo passo será encontrar os valores das constantes de normalização A_n e B_n , o que é feito através da formula (2.4.18).

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} |Z_n(z)|^2 dz = 1 \quad (2.4.18)$$

Aplicando a formula em (2.4.17) as equações (2.4.19) serão encontradas, resolvendo as integrais e isolando A_n e B_n seus valores serão encontrados, a equação (2.4.20).

$$\begin{cases} |A_n|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \sin^2(k_n z) dz = 1 \\ |B_n|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \cos^2(k_n z) dz = 1 \end{cases} \quad (2.4.19)$$

$$A_n = B_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (2.4.20)$$

Com os valores de A_n e B_n encontrados obtêm-se então as soluções para $Z_n(z)$ que são:

$$\begin{cases} Z_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}z\right), & \text{com } n = 2, 4, \dots \\ Z_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L}z\right), & \text{com } n = 1, 3, \dots \end{cases} \quad (2.4.21)$$

Como dito antes a solução para $Z_n(z)$ será resolvida de maneira análoga a de $X_n(x)$ e suas soluções serão:

$$\begin{cases} X(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_x x), \\ X(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(k_x x), \end{cases} \quad (2.4.22)$$

Lembrando das equações (2.4.4), (2.4.7) e (2.4.8) a função de onda, o vetor de onda e seus componentes, a energia serão encontrados, equações (2.4.23) e (2.4.24) respectivamente.

$$\begin{cases} \psi_n(x, z) = \left(\frac{2}{L}\right) \sin(k_x x) \sin\left(\frac{n\pi}{L}z\right), & \text{com } n = 2, 4, \dots \\ \psi_n(x, z) = \left(\frac{2}{L}\right) \cos(k_x x) \cos\left(\frac{n\pi}{L}z\right), & \text{com } n = 1, 3, \dots \end{cases} \quad (2.4.23)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left[k_x^2 + \left(\frac{n_z \pi}{L_z}\right)^2 \right] \text{ com, } n_z = 1, 2, \dots \quad (2.4.24)$$

A energia pode ser calculada também através da relação de De Broglie, dada pela equação (2.4.27), partindo da definição de energia cinética, ou seja,

$$E = \frac{\rho^2}{2m}. \quad (2.4.25)$$

Em (2.4.25) o momento linear será trocado pelo operador momento descrito através das formulas:

$$\mathbf{p} = p_x^2 + p_z^2 \quad (2.4.26)$$

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}, \quad \text{com} \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.4.27)$$

Logo a energia ficará na forma da equação (2.4.28), onde o comprimento λ foi chamado de L .

$$E = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \quad \text{com} \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \quad (2.4.28)$$

Por fim com generalização a energia e o vetor de onda e seus componentes são encontrados, ou seja,

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left[k_x^2 + \left(\frac{n_z \pi}{L_z} \right)^2 \right] \quad \text{com,} \quad n_z = 1, 2, \dots \quad (2.4.29)$$

Observe que as equações encontradas aqui são as mesmas que foram encontradas através da equação de Schrödinger e que a solução em ambas foi quantizada em z .

O modelo estudado aqui que é baseado no esquema do elétron aproximadamente livre e permite prever o deslocamento da banda a partir dos valores experimentais das constantes dielétricas e gaps. No caso dos semicondutores cujo gap fundamental é direto, ou seja, o ponto mais baixo da banda de condução ocorre no mesmo ponto \mathbf{k} como a banda de valência superior.

A estrutura de banda dos dois semicondutores que formam o poço quântico é muito semelhante perto das bordas da banda, então a diferença entre as massas efetivas pode ser ignorada, por isso o problema é literalmente uma simples partícula em uma caixa.

A massa efetiva é diretamente proporcional ao nível do confinamento, quanto menor a massa mais na borda estará a partícula. Sempre existirá um estado confinado independente da largura do poço, e mesmo que a altura da barreira e a massa efetiva sejam muito pequenas. Isto é uma característica deste problema e sempre ocorrerá no caso de poços uni e bidimensionais.

A energia E_n das sub-bandas como uma função do vetor de onda forma parábolas onde o ponto mais baixo é quando $n = 1$ e $n = 2, 3, \dots$ são os outros níveis. 0 marca o ponto onde a banda de condução do GaAs se origina. Vale dizer que não existe dispersão perpendicular a interface na direção z , ou seja, nessa direção de confinamento os estados comportam-se como estados ligados e a densidade de estados na parte inferior da banda de condução será finita, enquanto que para o bulk GaAs é zero.

Um par elétron-buraco ligados pela força atrativa de Coulomb foi denominado éxciton, uma ‘partícula’ muito especial e peculiar para os semicondutores, pois sua presença geralmente proporciona um meio de caracterizar as propriedades ópticas dos cristais. O nível de energia introduzido na gap proibida tem com resultado a formação de um éxciton semelhante a uma série de hidrogênio análogo ao usado para as impurezas químicas.

O éxciton possui um tempo de vida muito pequeno ($\approx 10^{-9}$ s). Quando livre pode se movimentar no cristal e ser capturado através das impurezas. Pode ser alterado devido à energia de ligação e seu tempo de vida. Quando um elétron é recombinado com um buraco emite um fóton de energia $E_g - |E_1^{ex}|$ [13].

2.4.2 Equação de movimento para pequenas oscilações da rede

A equação de movimento para pequenas oscilações, (2.4.30) [6]-[4], descreve o comportamento dos modos de longo comprimento de onda para um meio isotrópico e elástico contínuo. Quando algumas condições de contorno são consideradas, suas soluções poderão ser usadas para resolver a parte mecânica do problema do poço quântico, como o da figura 2.4.8.

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \rho \omega_0^2 \mathbf{u} + e_i E - c_{11} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + c_{44} \nabla \times \nabla \times \mathbf{u} \quad (2.4.30)$$

Na equação (2.4.30) as constantes c_{11} e c_{44} são os modos ópticos e elásticos que quantificam o stress no meio, e são associados com a relação de dispersão. \mathbf{u} é o deslocamento relativo dos íons. ω_o é a frequência normal de vibração. ρ é a densidade de carga reduzida. e_i é a densidade de carga iônica efetiva e E o campo elétrico macroscópico.

No caso da inexistência de carga livre o campo elétrico deverá satisfazer a expressão:

$$\nabla \cdot \varepsilon(\omega) \mathbf{E} = 0, \quad (2.4.31)$$

e qualquer parte transversal do campo obedecerá a equação:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}_T}{\partial t^2} = \frac{1}{\varepsilon(\omega) \mu_0} \nabla^2 \mathbf{E}_T. \quad (2.4.32)$$

$\varepsilon(\omega)$ e μ_0 são a permissividade e a permeabilidade, respectivamente para um espaço livre, como considerado neste problema em que os materiais utilizados não são magnéticos. O deslocamento iônico e o campo elétrico são fatorados em longitudinal e transversal [4], ou seja,

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_L + \mathbf{u}_T, \quad (2.4.33)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_L + \mathbf{E}_T, \quad (2.4.34)$$

com,

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_T = 0, \quad (2.4.35)$$

$$\nabla \times \mathbf{u}_L = 0. \quad (2.4.36)$$

A propagação dos modos de vibração LO e TO seguem das seguintes propriedades [4]:

$$\mathbf{E}_T = 0, \quad (2.4.37)$$

com,

$$\varepsilon(\omega) = \infty, \quad (2.4.38)$$

$$\mathbf{E}_L = \frac{-e^*}{\epsilon_\infty} \mathbf{u}_L \quad (2.4.39)$$

com,

$$(e^*)^2 = \varepsilon_\infty \rho (\omega_L^2 - \omega_T^2) \mathbf{u}_L \quad \text{e} \quad \varepsilon(\omega) = 0 \quad (2.4.40)$$

O próximo passo será fatorar e resolver a equação (2.4.30), o primeiro procedimento será isolar o termo $\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2}$. Depois substituir as equações (2.4.33), (2.4.34), (2.4.35), (2.4.36), (2.4.37) e (2.4.39) para encontrar a seguinte equação:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{d^2 \mathbf{u}_L}{dt^2} + \omega_{T_o}^2 \mathbf{u}_L - \frac{e^*}{\rho} \mathbf{E}_L \rho + v_L^2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}_L) \right] \\ & + \left[\frac{d^2 \mathbf{u}_T}{dt^2} + \omega_{T_o}^2 \mathbf{u}_T - v_T^2 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}_T) \right] = 0, \end{aligned} \quad (2.4.41)$$

com, $v_T = c_{44}/\rho$ e $v_L = c_{11}/\rho$.

A equação (2.4.41) pode ser reescrita e cada termo, em colchete, irá corresponder a uma equação, uma com termos longitudinais e a outra os transversais

$$\frac{d^2 \mathbf{u}_L}{dt^2} + \omega_{T_o}^2 \mathbf{u}_L - \frac{e^*}{\rho} \mathbf{E}_L \rho + v_L^2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}_L) = 0 \quad (2.4.42)$$

e

$$\frac{d^2 \mathbf{u}_T}{dt^2} + \omega_{T_o}^2 \mathbf{u}_T - v_T^2 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}_T) = 0 \quad (2.4.43)$$

A equação (2.4.42) possui duas variáveis o \mathbf{E}_L e o \mathbf{u}_L , e para solucioná-la é necessário substituir as equações (2.4.39) e (2.4.40) deixando-a com uma única variável, ou seja,

$$\frac{d^2 \mathbf{u}_L}{dt^2} = -\omega_L^2 \mathbf{u}_L - v_L^2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}_L). \quad (2.4.44)$$

Uma das soluções que satisfaz a equação (2.4.44) tem a forma exponencial como a seguir:

$$\mathbf{u}_L = e^{i(k_L \cdot \mathbf{r} + k_x x + \omega t)}, \quad (2.4.45)$$

logo,

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial t^2} = -\omega^2 \mathbf{u}_L. \quad (2.4.46)$$

Substituindo o resultado da derivada na equação (2.4.44), obtém-se:

$$-\omega^2 \mathbf{u}_L = -\omega_L^2 \mathbf{u}_L^2 - v_L^2 \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}_L), \quad (2.4.47)$$

usando a relação abaixo:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{g} = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{g}) - \nabla^2 \mathbf{g}, \quad (2.4.48)$$

ou seja, $\nabla \times \nabla \times \mathbf{u}_L = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}_L) - \nabla^2 \mathbf{u}_L$, e aplicando a definição (2.4.36) a equação (2.4.47) fica:

$$\nabla^2 \mathbf{u}_L = \left[\frac{(\omega^2 - \omega_L^2)}{v_L^2} \right] \mathbf{u}_L. \quad (2.4.49)$$

Uma vez que este problema é de baixa dimensionalidade um espaço com coordenadas (x, y, z) terá uma das dimensões bem pequena que aqui será considerada como zero, ou seja $y = 0$ assim por definição tem-se que:

$$\mathbf{u}_L = (u_{Lx}, 0, u_{Lz}), \quad \text{ou seja, } u_{Ly} = 0 \quad (2.4.50)$$

e

$$\nabla^2 \mathbf{u}_L = \frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial z^2} \quad \text{como } \frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial y^2} = 0 \quad (2.4.51)$$

logo,

$$\nabla^2 \mathbf{u}_L = \frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial z^2}. \quad (2.4.52)$$

Assim a equação (2.4.49) toma a seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial z^2} = \left[\frac{(\omega^2 - \omega_L^2)}{v_L^2} \right] \mathbf{u}_L. \quad (2.4.53)$$

A solução para esta equação diferencial será dada por:

$$\mathbf{u}_L = F(z) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (2.4.54)$$

como, feito anteriormente uma vez conhecido \mathbf{u}_L calcula-se as derivadas de segunda ordem

com relação a x e z ,

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial x^2} = -k_x^2 \mathbf{u}_L \quad (2.4.55)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 F(z)}{\partial z^2} \mathbf{u}_L. \quad (2.4.56)$$

Substituindo os resultados encontrados para as derivadas de segunda ordem, e a equação (2.4.54) em (2.4.53) encontra-se uma nova equação diferencial, da forma:

$$\frac{\partial^2 F(z)}{\partial z^2} = \left[\frac{(\omega^2 - \omega_L^2)}{v_L^2} + k_x^2 \right] F(z). \quad (2.4.57)$$

Fazendo os termos entre colchetes igual a $-k_L^2$ encontra-se uma equação diferencial, que possui uma solução bastante conhecida.

$$\frac{\partial^2 F(z)}{\partial z^2} = -k_L^2 F(z), \quad (2.4.58)$$

com,

$$k_L^2 = - \left[\frac{(\omega^2 - \omega_L^2)}{v_L^2} + k_x^2 \right], \quad (2.4.59)$$

e sua solução é

$$F(z) = Ae^{ik_L z} + Be^{-ik_L z}. \quad (2.4.60)$$

Substituindo a equação (2.4.60) em (2.4.54), a solução para equação (2.4.49), que é um caso da (2.4.42) sob algumas condições será:

$$\mathbf{u}_L = (Ae^{ik_L z} + Be^{-ik_L z}) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (2.4.61)$$

A equação (2.4.43) sob as mesmas condições a resolução deverá ser feita pelo mesmo modo utilizado para a equação (2.4.42). Assim a equação diferencial encontrada para \mathbf{u}_T e sua respectiva solução será:

$$\nabla^2 \mathbf{u}_T = \left[\frac{(\omega^2 - \omega_{T0}^2)}{v_T^2} \right] \mathbf{u}_T \quad (2.4.62)$$

e

$$\mathbf{u}_T = (Ee^{ik_T z} + Fe^{-ik_T z}) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (2.4.63)$$

A relação de dispersão para os modos de vibração longitudinal será encontrada ao isolar ω^2 na equação (2.4.59) [3]-[5], ou seja,

$$\omega^2 = \omega_L^2 - (k_L^2 + k_x^2) v_L^2. \quad (2.4.64)$$

Para calcular a relação de dispersão dos modos de vibração transversal um processo análogo, com equações equivalentes, ao utilizado para encontrar os modos de vibração longitudinal será efetuado [3]-[5]. Assim obtém-se a seguinte relação:

$$\omega^2 = \omega_{T_o}^2 - (k_T^2 + k_x^2) v_T^2. \quad (2.4.65)$$

2.4.3 Cálculo de deslocamentos

O poço potencial que será estudado aqui é o mesmo da figura 2.4.8. Como dito antes ele é formado, pois há uma diferença entre as energias das band gaps, cujos valores são $E_{AlAs} = 2,16ev$ e $E_{GaAs} = 1,42ev$. Tanto o Arseneto de Gálio (AsAl) quanto o Arseneto de Alumínio (AlAs) são materiais polares, ou seja, quando a rede vibra um campo elétrico, $E(\mathbf{r}, t)$ é gerado. Este deve obedecer às equações de Maxwell. Observa-se o deslocamento $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$.

No espaço, ou seja, em três dimensões, a coordenada z é a direção de crescimento e (x, y) são a simetria translacional, lembrando que aqui é um sistema de baixa dimensionalidade então y será considerado como sendo 0. A largura do poço tem um comprimento L .

Como antes afirmado as equações que solucionam esse poço foram encontradas na seção 2.4.2, são elas:

$$\nabla^2 \mathbf{u}_L = \left[\frac{(\omega^2 - \omega_L^2)}{v_T^2} \right] \mathbf{u}_L$$

e

$$\mathbf{u}_L = (Ae^{ik_L z} + Be^{-ik_L z}) e^{i(k_x x - \omega t)}$$

Modo de vibração longitudinal (L)

Os modos de vibrações LO propagam-se no poço potencial na região $-L/2 < z < L/2$. É preciso lembrar que (\mathbf{u}_L) tem que satisfazer não só a equação (2.4.62) mas também a (2.4.36). Sabendo que:

$$\mathbf{u}_L = (Ae^{ik_L z} + Be^{-ik_L z}) e^{i(k_x x - \omega t)},$$

ou seja, a onda é longitudinal. Escolhendo o eixo y com sendo perpendicular ao plano (x, z) o deslocamento pode ser escrito somente em função de x e z , como na equação (2.4.50). Resolver o rotacional da equação (2.4.36) prova-se que essa relação é satisfeita e assim é possível calcular as componentes $(u_L^x$ e $u_L^z)$. Para resolver o rotacional usa-se a seguinte definição:

$$\nabla \times \mathbf{A} = \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}, \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}, \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right), \quad (2.4.66)$$

aplicando a definição escrita acima encontra-se:

$$\left(\frac{\partial u_L^z}{\partial y}, \frac{\partial u_L^x}{\partial z} - \frac{\partial u_L^z}{\partial x}, -\frac{\partial u_L^x}{\partial y} \right) = 0 \quad (2.4.67)$$

para obedecer a igualdade cada termo entre parênteses deverá ser igual a zero, assim outra condição que \mathbf{u}_L tem que satisfazer é encontrada:

$$\frac{\partial u_L^x}{\partial z} = \frac{\partial u_L^z}{\partial x}. \quad (2.4.68)$$

O passo seguinte será resolver as derivadas e substituir o resultados encontrados na igualdade (2.4.68), logo,

$$k_L (Ae^{ik_L z} + Be^{-ik_L z}) e^{i(k_x x - \omega t)} = k_x (Ae^{ik_L z} + Be^{-ik_L z}) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (2.4.69)$$

Partindo do pressuposto que $|u_L^z| = |u_L^x|$ pode-se afirmar que u_L^z é um dos lados da equação (2.4.69) e que u_L^x corresponde ao outro. Esta escolha tem que ser feita de modo que as equações (2.4.36) e (2.4.49) sejam satisfeitas. Assim,

$$\begin{aligned} u_L^x &= k_x (Ae^{ik_L z} + Be^{-ik_L z}) e^{i(k_x x - \omega t)} \\ u_L^z &= k_L (Ae^{ik_L z} - Be^{-ik_L z}) e^{i(k_x x - \omega t)} \end{aligned} \quad (2.4.70)$$

Modo de vibração da Interface (IF)

Como o próprio nome já diz estes são os modos de vibração que se propagam na interface. A equação de movimento que rege essa propagação é:

$$\nabla^2 \cdot \mathbf{u}_{IF} = 0 \quad (2.4.71)$$

e a sua solução será:

$$\mathbf{u}_{IF} = k_{IF} (Ae^{ik_x z} + Be^{-ik_x z}) e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (2.4.72)$$

O deslocamento \mathbf{u}_{IF} pode ser definido da mesma maneira utilizada para o \mathbf{u}_L , pois estão no mesmo plano (x, z) , logo,

$$\mathbf{u}_{IF} = (u_{IF}^x, 0, u_{IF}^z). \quad (2.4.73)$$

O próximo passo é resolver o divergente, equação (2.4.71), e assim encontrar uma igualdade, que o deslocamento \mathbf{u}_{IF} deve satisfazer, ou seja,

$$\frac{\partial u_{IF}^x}{\partial x} = -\frac{\partial u_{IF}^z}{\partial z}. \quad (2.4.74)$$

Agora a resolução a partir daqui é igual a resolvida para o deslocamento \mathbf{u}_L . Será encontrado outra igualdade resolvendo as derivadas, depois usa-se o mesmo princípio de que $|u_{IF}^z| = |u_{IF}^x|$ e então encontra-se:

$$\begin{aligned} u_{IF}^x &= -ik_x (Ce^{ik_x z} + De^{-ik_x z}) e^{i(k_x x - \omega t)} \\ u_{IF}^z &= -k_x (Ce^{ik_x z} - De^{-ik_x z}) e^{i(k_x x - \omega t)}. \end{aligned} \quad (2.4.75)$$

È importante salientar que mesmo tendo encontrado uma equação diferencial e sua solução, equações (2.4.62) e (2.4.63) respectivamente, na seção 2.4.2 para o modo de vibração transversal as componentes não foram calculadas. Pois neste caso são pequenas vibrações na forma de radiação eletromagnética e não exerce uma grande influência nos resultados finais [8].

Entretanto o cálculo para encontrar as componentes do modo de vibração transversal é o mesmo feito para encontrar os resultados equivalentes para o modo de vibração longitudinal [3]-[5].

2.4.4 Campo Elétrico

Os materiais semicondutores que formam o poço potencial são polares e não magnéticos, quando ocorre vibração eles são polarizados e por sua vez gerarão um campo eletromagnético polar. Ou seja, existe a formação de um \mathbf{E} que deve satisfazer as equações de Maxwell no equilíbrio [10]-[3], pois o sistema não possui carga elétrica livre e nem corrente elétrica. As equações de Maxwell são:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad \text{com} \quad \mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad \text{logo} \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad (2.4.76)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \text{com} \quad \mathbf{B} = \mu_o \mathbf{H}, \quad \text{logo} \quad \nabla \cdot \mathbf{H} = 0, \quad (2.4.77)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.4.78)$$

e

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (2.4.79)$$

\mathbf{B} e \mathbf{H} são respectivamente a indução magnética e o campo magnético, \mathbf{E} o Campo Elétrico, \mathbf{H} é o deslocamento elétrico, μ_o é a permeabilidade do vácuo e ε é a permissividade do meio. No caso de semicondutores não magnético o $\mu_o = 1$, ou seja, $\mathbf{B} = \mathbf{H}$.

Com a combinação das equações de Maxwell encontra-se a equação de onda eletromagnética. O primeiro passo é aplicar o rotacional em ambos os lados da equação (2.4.79) e usando a relação (2.4.48) e a equação (2.4.76). Encontra-se a seguinte expressão:

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{B}). \quad (2.4.80)$$

Agora usando as expressões (2.4.77) na equação (2.4.78) obtemos:

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{\varepsilon(\omega)}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \quad (2.4.81)$$

Por fim substituindo a equação (2.4.81) em (2.4.80) encontra-se uma equação onda eletromagnética que possui a seguinte forma:

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{\varepsilon(\omega)}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}. \quad (2.4.82)$$

A equação (2.4.82) possui solução conhecida que é da seguinte forma:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_o F(z) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (2.4.83)$$

Uma vez que o valor de \mathbf{E} é conhecido, o passo seguinte será resolver a derivada temporal de segunda ordem, $\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}$, em seguida resolver o laplaciano. A solução será a relação (2.4.51) com \mathbf{E} no lugar do \mathbf{u}_L , logo,

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial z^2} = \left[-\omega^2 \frac{\varepsilon(\omega)}{c\mu_o} \right] \mathbf{E}, \quad (2.4.84)$$

e substituindo a equação (2.4.83) em (2.4.84). A equação obtida será

$$\frac{\partial^2 F(z)}{\partial^2 z} + \left[\omega^2 \frac{\varepsilon(\omega)}{c\mu_o} - k_x^2 \right] F(z) = 0, \quad (2.4.85)$$

igualando os termos entre colchetes a uma constante qualquer, aqui será chamada de k_{IF}^2 , a equação tomará uma forma bastante conhecida. Como:

$$\frac{\partial^2 F(z)}{\partial^2 z} = -k_{IF}^2 F(z), \quad (2.4.86)$$

cuja solução é conhecida e tem a seguinte forma:

$$F(z) = F e^{ik_{IF}z} + G e^{-ik_{IF}z} \quad (2.4.87)$$

com,

$$k_{IF}^2 = \omega^2 \frac{\varepsilon(\omega)}{c\mu_o} - k_x^2, \quad (2.4.88)$$

logo,

$$\omega^2 = \frac{c\mu_o}{\varepsilon(\omega)} (k_{IF}^2 + k_x^2). \quad (2.4.89)$$

A expressão (2.4.89) nada mais é do que a relação de dispersão na interface de polarização. Com o propósito de ter ω em ambos materiais (AlAs e GaAs), mesmo com valor pequeno como no caso das barreiras, é necessário que $(k_x^2 + k_{IF}^2) \approx 0$, porém ainda finito, uma vez que o $F(z)$ começa decair a partir da barreira do poço. Ou seja,

$$k_x^2 + k_{IF}^2 = 0, \quad \text{logo} \quad k_x = \pm ik_{IF}, \quad (2.4.90)$$

por comodidade usa-se $k_x = ik_{IF}$ na equação (2.4.87). Assim $F(z)$ tomará a seguinte forma:

$$F(z) = F e^{k_x z} + G e^{-k_x z}. \quad (2.4.91)$$

Como fora do poço o campo decresce, pois depende do $F(z)$. Será necessário fazer uma

análise com $z > 0$ e com $z < 0$ na equação (2.4.91). Assim observa-se que:

$$\begin{aligned} \text{para } z > 0 \quad F(z) &= Ge^{(-k_x z)}, \\ \text{para } z < 0 \quad F(z) &= Fe^{(k_x z)}. \end{aligned} \quad (2.4.92)$$

A solução da equação (2.4.82), será:

$$\begin{aligned} \text{para } z > 0 \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_o G e^{[-k_x z]} e^{i(k_x x - \omega t)}, \\ \text{para } z < 0 \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_o F e^{[k_x z]} e^{i(k_x x - \omega t)}, \end{aligned} \quad (2.4.93)$$

ou melhor,

$$\begin{aligned} \text{para } z > 0 \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{G} e^{[-k_x z]} e^{i(k_x x - \omega t)}, \\ \text{para } z < 0 \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{F} e^{[k_x z]} e^{i(k_x x - \omega t)}. \end{aligned} \quad (2.4.94)$$

com, $\mathbf{E}_o F = \mathbf{F}$ e $\mathbf{E}_o G = \mathbf{G}$. As equações podem ser reescritas em função dos componentes dos vetores \mathbf{F} e \mathbf{G} .

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t) &= (G_x, 0, G_z) e^{[-k_x z]} e^{i(k_x x - \omega t)}, \\ \mathbf{E}^<(\mathbf{r}, t) &= (F_x, 0, F_z) e^{[k_x z]} e^{i(k_x x - \omega t)}. \end{aligned} \quad (2.4.95)$$

$\mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t)$ e $\mathbf{E}^<(\mathbf{r}, t)$ são os campos quando $z > 0$ e $z < 0$ respectivamente.

O campo elétrico além de satisfazer a equação (2.4.82) tem que satisfazer $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$, ou seja, será necessário resolver o divergente. Da definição temos que

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z}, \quad (2.4.96)$$

logo,

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} = -\frac{\partial E_z}{\partial z}. \quad (2.4.97)$$

Aplicando igualdade (2.4.97) na equação (2.4.96) duas relações serão encontradas para os campos $\mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t)$ e $\mathbf{E}^<(\mathbf{r}, t)$ respectivamente.

$$k_x G_x = -ik_x G_z \quad \text{e} \quad k_x F_x = ik_x F_z, \quad (2.4.98)$$

ou simplesmente,

$$G_x = -iG_z \quad \text{e} \quad F_x = iF_z. \quad (2.4.99)$$

Com as relações (2.4.99) as equações de campo poderão ser reescritas, isto é,

$$\begin{aligned} a) \quad \mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t) &= (-iG_z, 0, G_z) e^{-k_x z} e^{i(k_x x - \omega t)}, \\ b) \quad \mathbf{E}^<(\mathbf{r}, t) &= (iF_z, 0, F_z) e^{k_x z} e^{i(k_x x - \omega t)} \end{aligned} \quad (2.4.100)$$

ou então,

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t) &= (G_x, 0, iG_x) e^{-k_x z} e^{i(k_x x - \omega t)}, \\ \mathbf{E}^<(\mathbf{r}, t) &= (F_x, 0, -iF_x) e^{k_x z} e^{i(k_x x - \omega t)}. \end{aligned} \quad (2.4.101)$$

O poço quântico possui um tamanho L , ou seja, é delimitado no eixo z entre $-\frac{L}{2}$ e $\frac{L}{2}$, assim para facilitar a análise das condições de contorno e simplificar as expressões destas equações estes limites serão incluídos nas expressões do campo, ou seja a equação (2.4.100). Aplicando em a)

$$\mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t) = (-iG_z, 0, G_z) e^{-k_x(z + \frac{L}{2} - \frac{L}{2})} e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (2.4.102)$$

fazendo algumas operações com os termos em exponenciais encontra-se:

$$\begin{aligned} e^{-k_x(z + \frac{L}{2} - \frac{L}{2})} e^{i(k_x x - \omega t)} &= e^{-k_x(z - \frac{L}{2})} e^{-k_x \frac{L}{2}} e^{i(k_x x - \omega t)} \\ &= \left[e^{-k_x \frac{L}{2}} e^{i(k_x x - \omega t)} \right] e^{-k_x(z - \frac{L}{2})}. \end{aligned} \quad (2.4.103)$$

Substituindo o resultado encontrado em (2.4.103) na equação (2.4.102) uma nova expressão para $\mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t)$ será obtida.

$$\mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t) = (-iG_z, 0, G_z) \left[e^{-k_x \frac{L}{2}} e^{i(k_x x - \omega t)} \right] e^{-k_x(z - \frac{L}{2})}, \quad (2.4.104)$$

reescrevendo de outra forma, onde realiza-se a multiplicação dos termos em colchete por aqueles que estão entre , ou seja,

$$\mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t) = \left[-iG_z \left(e^{-k_x \frac{L}{2}} e^{i(k_x x - \omega t)} \right), 0, G_z \left(e^{-k_x \frac{L}{2}} e^{i(k_x x - \omega t)} \right) \right] e^{-k_x(z - \frac{L}{2})}. \quad (2.4.105)$$

Agora fazendo a seguinte substituição:

$$I = G_z \left(e^{-k_x \frac{L}{2}} e^{i(k_x x - \omega t)} \right), \quad (2.4.106)$$

obtem-se:

$$\mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t) = [-iI, 0, I] e^{-k_x(z - \frac{L}{2})} \quad \text{para} \quad z \geq \frac{L}{2}. \quad (2.4.107)$$

A equação (2.4.107) é a expressão do campo elétrico correspondente a região $z \geq \frac{L}{2}$. Assim sendo o $\mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t)$ decresce exponencialmente ao longo da barreira,

$$\mathbf{E}^<(\mathbf{r}, t) = [iH, 0, H] e^{k_x(z + \frac{L}{2})} \quad \text{para} \quad z \leq -\frac{L}{2}. \quad (2.4.108)$$

Da mesma maneira que o $\mathbf{E}^>(\mathbf{r},t)$, o $\mathbf{E}^<(\mathbf{r},t)$ irá decrescer exponencialmente ao longo da barreira, neste caso a região correspondente é $z \leq -\frac{L}{2}$, onde H será dado por:

$$H = F_z \left(e^{-(k_x \frac{L}{2})} e^{i(k_x x - \omega t)} \right). \quad (2.4.109)$$

O cálculo para o campo $\mathbf{E}^<(\mathbf{r},t)$ é igual ao realizado para encontrar o $\mathbf{E}^>(\mathbf{r},t)$.

Observe que faltou falar no campo elétrico para a região $|z| \leq \frac{L}{2}$. Para calcular as componentes dos respectivos campos, \mathbf{E}_L e \mathbf{E}_{IF} , utiliza-se as definições citadas na sessão 2.4.2. O \mathbf{E}_L foi reescrito de outra maneira por convenção.

$$\mathbf{E}_L = -\rho_o \mathbf{u}_L, \quad \mathbf{E}_T = 0 \quad \text{e} \quad \mathbf{E}_{IF} = \rho_o s \mathbf{u}_{IF} \quad (2.4.110)$$

com,

$$\rho_o = \frac{e^*}{\varepsilon_\infty \varepsilon_o V_o} \quad \text{e} \quad s = \frac{(\omega^2 - \omega_T^2)}{(\omega_L^2 - \omega_T^2)}, \quad \text{quando} \quad \omega = \omega_{IF}^2 \quad (2.4.111)$$

Existem três tipos de campo elétrico neste sistema, $\mathbf{E}_L(\mathbf{r},t)$, $\mathbf{E}_T(\mathbf{r},t)$ e $\mathbf{E}_{IF}(\mathbf{r},t)$, com suas respectivas componentes. Na região, $|z| \leq \frac{L}{2}$, aqui avaliada somando as componentes em x o campo E_x será encontrado. Então uma vez que $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ é:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}_L(\mathbf{r},t) + \mathbf{E}_T(\mathbf{r},t) + \mathbf{E}_{IF}(\mathbf{r},t), \quad (2.4.112)$$

ou seja,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}_L(\mathbf{r},t) + \mathbf{E}_{IF}(\mathbf{r},t), \quad (2.4.113)$$

considerando só a componente x de cada campo a equação (2.4.112) fica:

$$E_x = E_L^x + E_{IF}^x \quad (2.4.114)$$

aplicando as definições dos campos na equação (2.4.114), encontra-se:

$$E_x = -\rho_o (u_L^x + s u_{IF}^x). \quad (2.4.115)$$

Para calcular a componente, E_{IF}^z , do campo na interface será utilizado o vetor deslocamento elétrico $\mathbf{D} = \varepsilon(\omega) \mathbf{E}$. Substituindo a equação (2.4.112) em (2.4.76), isto é,

$$\mathbf{D} = \varepsilon(\omega_L) \mathbf{E}_L + \varepsilon(\omega_T) \mathbf{E}_T + \varepsilon(\omega_{IF}) \mathbf{E}_{IF}. \quad (2.4.116)$$

Como afirmado antes $\mathbf{E}_T = 0$, no caso do produto $\varepsilon(\omega_L) \mathbf{E}_L$, $\mathbf{E}_L \neq 0$, logo $\varepsilon(\omega_L) = 0$,

quando $\omega = \omega_L$ de acordo com a seguinte equação:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{(\omega_L^2 - \omega^2)}{(\omega_T^2 - \omega^2)}. \quad (2.4.117)$$

Assim \mathbf{D} depende somente do \mathbf{E}_{IF} , e neste caso acontecerá especificamente para a componente z , observe:

$$D_{IF}^z = \varepsilon(\omega_{IF}) E_{IF}^z. \quad (2.4.118)$$

Deste modo substituindo a definição da componente E_{IF}^z do campo que provém da equação (2.4.110), obtém-se a expressão:

$$D_{IF}^z = \varepsilon(\omega) E_{IF}^z = -\varepsilon(\omega) \rho_o s u_{IF}^z, \quad \text{quando} \quad \omega = \omega_{IF}. \quad (2.4.119)$$

2.4.5 Condições de Contorno

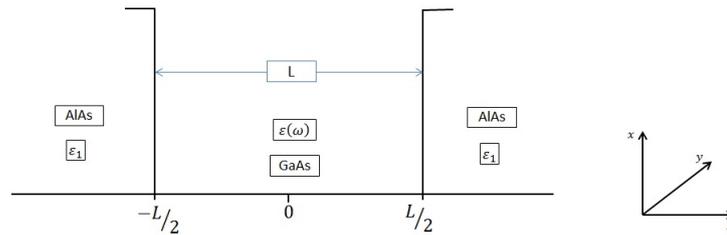


Figura 2.4.9: *Poço quântico formado devido à diferença de energia de band Gap entre o AlAs e o GaAs, com suas permissividades, respectivamente!*

Em cada interface tanto as condições de contorno eletromagnéticas quanto as mecânicas devem ser satisfeitas. Os modos eletromagnéticos, i.e., longitudinais (LO) e interface (IF), ambos satisfazem as equações de Maxwell [10]-[11]. São resumidas nas seguintes equações para o campo tangencial,

$$E_x^{\geq} \Big|_{z=\pm \frac{L}{2}} = E_x \Big|_{z=\pm \frac{L}{2}} \quad (2.4.120)$$

e para o campo normal,

$$D_z \Big|_{z=\pm \frac{L}{2}} = D_z \Big|_{z=\pm \frac{L}{2}}, \quad (2.4.121)$$

ou seja,

$$\varepsilon_1 E_z^{\geq} \Big|_{z=\pm \frac{L}{2}} = \varepsilon(\omega) E_z \Big|_{z=\pm \frac{L}{2}} \quad (2.4.122)$$

No caso do deslocamento, as condições de contorno são denominadas condição de

continuidade e são representadas através das condições abaixo:

$$\text{para } z = -\frac{L}{2} \longrightarrow \begin{cases} (u_x = 0) \\ (u_z = 0) \end{cases}, \quad \text{ou seja, } \begin{cases} u_L^x = u_{IF}^x \\ u_L^z = u_{IF}^z \end{cases} \quad (2.4.123)$$

$$\text{para } z = \frac{L}{2} \longrightarrow \begin{cases} (u_x = 0) \\ (u_z = 0) \end{cases}, \quad \text{ou seja, } \begin{cases} u_L^x = u_{IF}^x \\ u_L^z = u_{IF}^z \end{cases} \quad (2.4.124)$$

Uma vez conhecidas as condições de contorno o próximo passo será aplicá-las. Lembrado que, os deslocamentos são:

$$\begin{aligned} u_L^x &= k_x (Ae^{ik_L z} + Be^{-ik_L z}) e^{i(k_x x - \omega t)}, \\ u_L^z &= k_L (Ae^{ik_L z} - Be^{-ik_L z}) e^{i(k_x x - \omega t)}, \\ u_{IF}^x &= -ik_x (Ce^{ik_x z} + De^{-ik_x z}) e^{i(k_x x - \omega t)}, \\ u_{IF}^z &= -k_x (Ce^{ik_x z} - De^{-ik_x z}) e^{i(k_x x - \omega t)}. \end{aligned}$$

E os campos elétricos:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^>(\mathbf{r}, t) &= [-iI, 0, I] e^{[-k_x(z - \frac{L}{2})]} \quad \text{para } z \geq \frac{L}{2}, \\ \mathbf{E}^<(\mathbf{r}, t) &= [iH, 0, H] e^{[k_x(z + \frac{L}{2})]} \quad \text{para } z \leq \frac{L}{2}, \\ D_z &= \varepsilon(\omega) E_{IF}^z = -\varepsilon(\omega) \rho_o s u_{IF}^z, \\ E_x &= -\rho_o (u_L^x + s u_{IF}^x). \end{aligned}$$

Inicialmente as condições de contorno serão aplicadas para os campos elétricos e deslocamentos. Primeiro resolve-se para as componentes x dos campos.

$$E_x^< = iH, \quad (2.4.125)$$

$$E_x = -\rho_o k_x [(Av^- + Bv^+) + is(C\omega^- + D\omega^+)] e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (2.4.126)$$

igualando os campos, equações (2.4.125) e (2.4.126), encontra-se o valor de H ,

$$H = i\rho_o k_x [(Av^- + Bv^+) + is(C\omega^- + D\omega^+)] e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (2.4.127)$$

Agora o cálculo feito para E_x e $E_x^<$, será realizado para a componente z do campo.

$$E_z^< = \varepsilon H \quad (2.4.128)$$

e

$$\varepsilon(\omega) E_{IF}^z = \varepsilon(\omega) \rho_o s k_x (C\omega^- - D\omega^+) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (2.4.129)$$

igualando as equações (2.4.128) e (2.4.129), encontra-se uma outra expressão para H .

$$H = r\rho_o s k_x (C\omega^- - D\omega^+) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (2.4.130)$$

Igualando as duas expressões encontradas para H , encontra-se a relação:

$$i(Av^- + Bv^+) = s[(1+r)C\omega^- + (1-r)D\omega^+], \quad (2.4.131)$$

com,

$$r = \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon}, \quad v^\pm = e^{\pm i(k_L \frac{L}{2})} \quad \text{e} \quad \omega^\pm = e^{\pm i(k_x \frac{L}{2})}. \quad (2.4.132)$$

Acabado com o campo elétrico, o passo seguinte será aplicar as condições de contorno para o deslocamento, seguindo a mesma ordem.

$$u_L^x = k_x (Av^- + Bv^+) e^{i(k_x x - \omega t)} = 0 \quad (2.4.133)$$

e

$$u_{IF}^x = -k_x (C\omega^- + D\omega^+) e^{i(k_x x - \omega t)} = 0, \quad (2.4.134)$$

como ambas as equações encontradas são iguais a zero pode-se igualá-las e então encontrar a seguinte expressão:

$$(Av^- + Bv^+) = -(C\omega^- + D\omega^+). \quad (2.4.135)$$

Repetindo os cálculos feito a cima para as componentes x do deslocamento, encontra-se a solução para componentes z do deslocamento, logo,

$$u_L^z = k_L (Av^- - Bv^+) e^{i(k_x x - \omega t)} = 0 \quad (2.4.136)$$

e

$$u_{IF}^z = -k_x (C\omega^- - D\omega^+) e^{i(k_x x - \omega t)} = 0, \quad (2.4.137)$$

portanto,

$$k_L (Av^- - Bv^+) = -k_x (C\omega^- - D\omega^+) \quad (2.4.138)$$

Uma vez que a análise dos campos e dos deslocamentos para $z = -\frac{L}{2}$ foi concretizada, agora será iniciada a análise para $z = \frac{L}{2}$. Os cálculos efetuados serão os mesmos realizados para $z = -\frac{L}{2}$. Em principio os campos serão analisados, logo depois os deslocamentos. As operações serão efetuadas começando com as componentes da direção x e depois indo para as componentes da direção z .

Fazendo $z = \frac{L}{2}$ a componente x dos campos assumem a seguinte forma:

$$E_x^< = -iI \quad (2.4.139)$$

e

$$E_x = -\rho_o k_x [(Av^+ + Bv^-) + is(C\omega^+ + D\omega^-)] e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (2.4.140)$$

logo,

$$iI = \rho_o k_x [(Av^+ + Bv^-) + is(C\omega^+ + D\omega^-)] e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (2.4.141)$$

Efetuando a mesma análise para as componentes da direção z , obtém-se as expressões abaixo:

$$E_z^> = I \quad (2.4.142)$$

e

$$\varepsilon(\omega) E_{IF}^z = \varepsilon(\omega) \rho_o s k_x (C\omega^+ - D\omega^-) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (2.4.143)$$

portanto,

$$I = r \rho_o s k_x (C\omega^+ - D\omega^-) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (2.4.144)$$

Substituindo a expressão (2.4.144) em (2.4.141) chega-se na seguinte igualdade:

$$i(Av^+ + Bv^-) = s [(1-r)C\omega^+ + (1+r)D\omega^-]. \quad (2.4.145)$$

Para finalizar, será substituído nos deslocamentos o valor de $\frac{L}{2}$ no lugar do z . As equações abaixo serão encontradas.

$$u_L^x = k_x (Av^+ + Bv^-) e^{i(k_x x - \omega t)} = 0 \quad (2.4.146)$$

e

$$u_{IF}^x = -k_x (C\omega^+ + D\omega^-) e^{i(k_x x - \omega t)} = 0, \quad (2.4.147)$$

consequentemente,

$$(Av^+ + Bv^-) = -(C\omega^+ + D\omega^-). \quad (2.4.148)$$

Da mesma forma que foi feito com as componentes do deslocamento na direção x , calcula-se para componentes na direção z .

$$u_L^z = k_L (Av^+ - Bv^-) e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (2.4.149)$$

e

$$u_{IF}^z = -k_x (C\omega^+ - D\omega^-) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (2.4.150)$$

então,

$$k_L (Av^+ - Bv^-) = -k_x (C\omega^+ - D\omega^-). \quad (2.4.151)$$

Com a aplicação de todas as condições de contorno as seis igualdades abaixo foram

encontradas [3]:

$$\begin{aligned}
 i(Av^- + Bv^+) &= s[(1+r)C\omega^- + (1-r)D\omega^+], \\
 (Av^- + Bv^+) &= -(C\omega^- + D\omega^+), \\
 k_L(Av^- - Bv^+) &= -k_x(C\omega^- - D\omega^+), \\
 i(Av^+ + Bv^-) &= s[(1-r)C\omega^+ + (1+r)D\omega^-], \\
 (Av^+ + Bv^-) &= -(C\omega^+ + D\omega^-), \\
 k_L(Av^+ - Bv^-) &= -k_x(C\omega^+ - D\omega^-).
 \end{aligned}$$

Elas permitirão que tanto os deslocamentos quanto os campos elétricos sejam escritos em função de uma única constante. Com tal característica será possível normalizar os deslocamentos, e calcular o valor da constante. Este cálculo será executado no apêndice A, o qual faz referência ao problema do capítulo 3 que trará um estudo mais avançado e detalhado de um problema similar ao executado neste capítulo.

Capítulo III

Poço Quântico com Barreira

“As coisas mais maravilhosas que podemos experimentar são as misteriosas. Elas são a origem de toda verdadeira arte e ciência. Aquele para quem essa sensação é um estranho, aquele que não mais consegue parar para admirar e extasiar-se em veneração, é como se estivesse morto: seus olhos estão fechados”.

(Albert Einstein)

O estudo do confinamento de fônons óticos é um problema bastante atual tratado na física dos semicondutores de baixa dimensionalidade. Diversos trabalhos mostram que os fônons óticos têm um papel importante na redução da taxa de espalhamento de elétrons, e na limitação da sua mobilidade. Para entender e propor uma explicação, deste problema em um contexto teórico, é feita a inclusão de monocamadas no interior do poço quântico, de um material diferente, por exemplo, uma monocamada de InAs em um poço do tipo AlAs-GaAs [8]-[2].

Neste capítulo será iniciado o estudo no que diz respeito ao confinamento de fônons óticos. Aqui serão utilizados semicondutores de baixa dimensionalidade que formarão um poço quântico do tipo AlAs-GaAs, figura 2.4.8. E uma camada de InAs será introduzida em seu interior, figura 3.1.1. Será realizado o cálculo dos deslocamentos, dos campos elétricos, Potenciais elétricos, Relação de dispersão, Taxa de espalhamento, além de aplicar as condições de contorno para encontrar relações e/ou igualdades que permitem que os deslocamentos e campos sejam colocados em função de uma única constante possibilitando assim, o cálculo da constante de normalização, vide apêndice A [11]-[12].

3.1 Estudo do poço potencial com barreira

A resolução do poço potencial com uma barreira, de tamanho igual a $\frac{L}{3}$, em seu interior, figura 3.1.1, será realizada utilizando a solução encontrada no capítulo 2, para o poço potencial da figura 2.4.8, pois a única diferença são as condições de contorno.

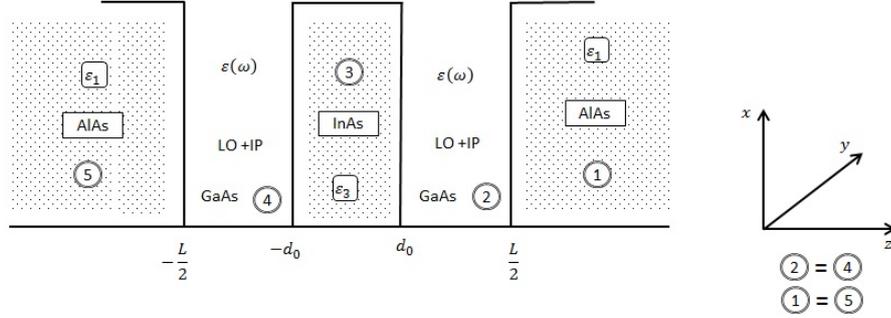


Figura 3.1.1: *Poço quântico do tipo AlAs-GaAs com uma camada de InAs introduzida em seu interior;*

A figura 3.1.1 possui 5 regiões distintas denominadas da seguinte forma [2]-[3]:

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 \text{ e } 5 : \text{ se } |z| \geq \frac{L}{2}, \\ 3 : \text{ se } |z| \leq \frac{L}{6} = d_0, \\ 4 : \text{ se } -\frac{L}{2} \leq z \leq -\frac{L}{6}, \\ 2 : \text{ se } \frac{L}{6} \leq z \leq \frac{L}{2}. \end{array} \right.$$

Para encontrar os deslocamentos e campos elétricos destas regiões é necessário levar em consideração os resultados encontrados no capítulo 2. Nas regiões 1, 3 e 5 o deslocamento será zero, $\mathbf{u} = 0$ e os campos serão definidos através das equações abaixo, respectivamente.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = [-iI, 0, I] e^{-k_x(z - \frac{L}{2})}, \quad (3.1.1)$$

$$\mathbf{E} = [k_x (C_3 e^{ik_x z} + D_3 e^{-ik_x z}), 0, -ik_x (C_3 e^{k_x z} - D_3 e^{-k_x z})] \quad (3.1.2)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = [iH, 0, H] e^{k_x(z + \frac{L}{2})}. \quad (3.1.3)$$

Por meio dessas equações percebe-se que o campo decai exponencialmente fora do poço.

Nas regiões 2, 3, 4 os deslocamentos são escritos da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} u_L^x &= k_x (A_2 e^{ik_L z} + B_2 e^{-ik_L z}) & \text{e} & \quad u_{IF}^x = ik_x (C_2 e^{k_x z} + D_2 e^{-k_x z}) \\ u_L^z &= k_L (A_2 e^{ik_L z} - B_2 e^{-ik_L z}) & \text{e} & \quad u_{IF}^z = -k_x (C_2 e^{k_x z} - D_2 e^{-k_x z}), \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

$$\begin{aligned} u_L^x &= k_x (A_3 e^{ik_L z} + B_3 e^{-ik_L z}) & \text{e} & \quad u_{IF}^x = ik_x (C_3 e^{k_x z} + D_3 e^{-k_x z}) \\ u_L^z &= k_L (A_3 e^{ik_L z} - B_3 e^{-ik_L z}) & \text{e} & \quad u_{IF}^z = -k_x (C_3 e^{k_x z} - D_3 e^{-k_x z}), \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

$$\begin{aligned} u_L^x &= k_x (A_4 e^{ik_L z} + B_4 e^{-ik_L z}) & \text{e} & \quad u_{IF}^x = ik_x (C_4 e^{k_x z} + D_4 e^{-k_x z}) \\ u_L^z &= k_L (A_4 e^{ik_L z} - B_4 e^{-ik_L z}) & \text{e} & \quad u_{IF}^z = -k_x (C_4 e^{k_x z} - D_4 e^{-k_x z}). \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

Os subíndices representam as respectivas regiões. No caso destas regiões os campos serão calculados na seção 3.5.

3.2 Aplicação das condições de contorno

Os modelos mais utilizados para o estudo do confinamento de fônons óticos são: (i) Modelo Híbrido (*HM*) que leva em conta a natureza mecânica que conecta os fônons dos diferentes materiais que constituem o poço na interface dos mesmos. Além das condições de contorno eletromagnéticas, que neste caso os três modos possíveis, Longitudinal (*LO*), Transversal (*TO*) e de Interface (*IP*) são hibridizados e devem satisfazer as equações de Maxwell [8], e o (ii) DC (Dielectric Continuum) [1] que despreza a natureza mecânica dos fônons na interface e considera apenas as condições de contorno eletromagnéticas, neste caso para os modos Longitudinais (*LO*) e Interface (*IF*). As condições de contorno devem ser sintetizadas da seguinte forma:

$$(A) \quad z = \pm \frac{L}{2} \longrightarrow \begin{cases} E_x^{\text{Barreira}} = E_x^{\text{GaAs}}, \\ D_z^{\text{Barreira}} = D_z^{\text{GaAs}}, & \text{com } D = \varepsilon E, \\ (u_z = 0), & \text{ou seja, } u_L^z = u_{IF}^z, \end{cases}$$

$$(B) \quad z = \pm d_0 \longrightarrow \begin{cases} (u_z = 0), & \text{isto é, } u_L^z = u_{IF}^z \\ \text{o campo elétrico será contínuo} & , \text{ com } d_0 = \frac{L}{6}, \end{cases}$$

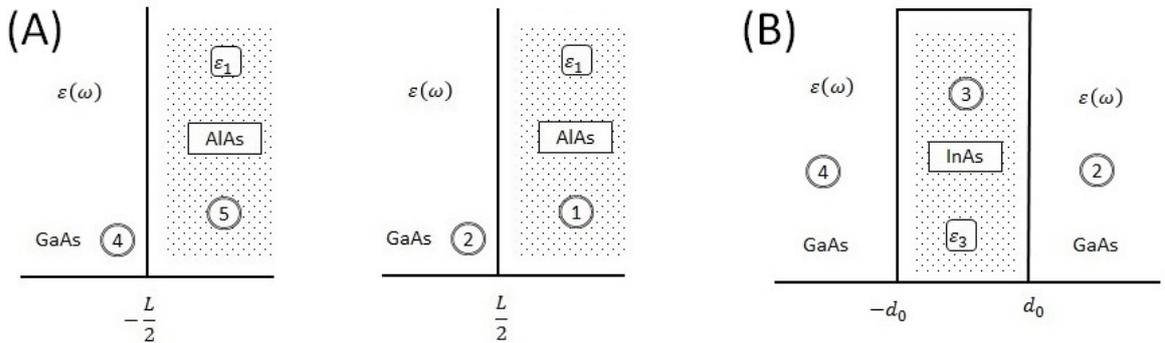


Figura 3.2.2: Interfaces do poço quântico do tipo AlAs-GaAs referente as condições de contorno (A) e (B);

$$(C) \quad \text{GaAs, ou seja, } \left(z \leq \frac{L}{2} \right) \longrightarrow \begin{cases} E_x = -\rho_o (u_L^x + s u_{IF}^x), \\ D_z = \varepsilon(\omega) E_z = -\rho_o s u_{IF}^z, \end{cases}$$

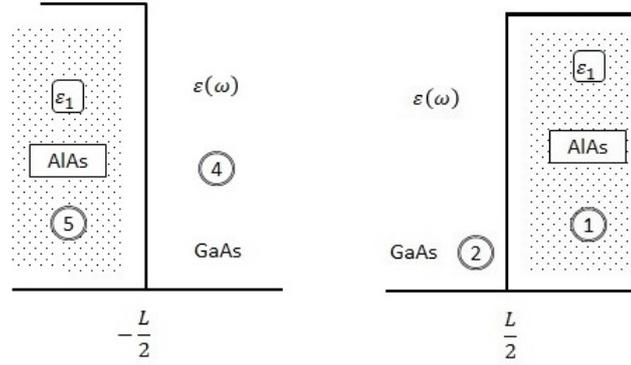


Figura 3.2.3: *Interfaces do poço quântico do tipo AlAs-GaAs referente as condições de contorno (C);*

O próximo passo será a aplicação das condições de contorno para encontrar expressões que permitirão futuramente a normalização das equações (3.1.4), (3.1.5) e (3.1.6), cálculo este que será semelhante aos realizados na seção 2.4.5. A posteriori para facilitar os cálculos as equações terão uma notação simplificada através das seguintes definições:

$$\begin{cases} v_m^\pm = e^{(ik_L n)} \\ \omega_m^\pm = e^{(k_x n)} \end{cases} \text{ com, } \begin{cases} n = \text{interfaces, ou seja, } \pm \frac{L}{2} \text{ ou } \pm d_o \\ m = \text{os meios, ou seja, } 2, 3 \text{ e } 4 \end{cases} . \quad (3.2.7)$$

Uma vez que as condições de contornos foram definidas, elas poderão ser aplicadas nos campos e deslocamentos para cada interface do poço. Os subíndices (2), (3), (4) e “Barreira”, “GaAs”, remetem às interfaces das regiões 2, 3 e 4, e às regiões 2 e 4, respectivamente, de acordo com a figura 3.1.1.

Quando $z = -\frac{L}{2}$, ou seja a região 2, as condições de contorno, no caso dos campos elétricos ficam:

$$\begin{aligned} E_x^{(2)} &\longrightarrow E_x^{\text{Barreira}} = E_x^{\text{GaAs}} \\ D_z^{(2)} &\longrightarrow D_z^{\text{Barreira}} = D_z^{\text{GaAs}} . \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

Aplicando tais condições, e as definições da equação (3.2.7) encontra-se:

$$E_x^{\text{Barreira}} = iH e^{[k_x(-\frac{L}{2} + \frac{L}{2})]} = iH, \quad (3.2.9)$$

$$\begin{aligned} E_x^{\text{GaAs}} &= \rho_o \left[k_x \left(A_2 e^{-iK_L \frac{L}{2}} + B_2 e^{iK_L \frac{L}{2}} \right) - isk_x \left(C_2 e^{-k_x \frac{L}{2}} + D_2 e^{-k_x \frac{L}{2}} \right) \right] \\ &= \rho_o \left[k_x \left(A_2 v_2^- + B_2 v_2^+ \right) - isk_x \left(C_2 \omega_2^- + D_2 \omega_2^+ \right) \right], \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

$$D_z^{\text{GaAs}} = \varepsilon(\omega) H e^{[k_x(-\frac{L}{2} + \frac{L}{2})]} = \varepsilon H, \quad (3.2.11)$$

$$\begin{aligned}
D_z^{Barreira} &= \varepsilon_1 \rho_o s k_x \left(C_2 e^{-k_x \frac{L}{2}} - D_2 e^{-k_x \frac{L}{2}} \right) \\
&= \varepsilon_1 \rho_o s k_x \left(C_2 \omega_2^- - D_2 \omega_2^+ \right).
\end{aligned} \tag{3.2.12}$$

As equações acima geram duas igualdades, os valores de H , que serão usadas para calcular a relação:

$$i \left(A_2 v_2^- + B_2 v_2^+ \right) = s \left[(r_o - 1) C_2 \omega_2^- - (r_o + 1) D_2 \omega_2^+ \right], \tag{3.2.13}$$

com, $r_o = \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_1}$.

O procedimento feito anteriormente será realizado para encontrar o deslocamento. Observe abaixo a condição de continuidade:

$$u_z^{(2)} = 0 \longrightarrow u_L^z = u_{IF}^z. \tag{3.2.14}$$

Aplicando a condição de contorno nos deslocamentos, os resultados encontrados possuirão as seguintes formas:

$$\begin{aligned}
u_L^z &= k_L \left(A_2 e^{-ik_L \frac{L}{2}} - B_2 e^{ik_L \frac{L}{2}} \right) \\
&= k_L \left(A_2 v_2^- - B_2 v_2^+ \right),
\end{aligned} \tag{3.2.15}$$

$$\begin{aligned}
u_{IF}^z &= -k_x \left(C_2 e^{-k_x \frac{L}{2}} - D_2 e^{-k_x \frac{L}{2}} \right) \\
&= -k_x \left(C_2 \omega_2^- - D_2 \omega_2^+ \right),
\end{aligned} \tag{3.2.16}$$

logo,

$$k_L \left(A_2 v_2^- - B_2 v_2^+ \right) = -k_x \left(C_2 \omega_2^- - D_2 \omega_2^+ \right). \tag{3.2.17}$$

Agora a análise será feita quando z for igual a $\frac{L}{2}$. Os cálculos que serão realizados vão ser iguais aos executados para $z = -\frac{L}{2}$. Então:

$$\begin{aligned}
E_x^{(4)} &\longrightarrow E_x^{Barreira} = E_x^{GaAs}, \\
D_z^{(4)} &\longrightarrow D_z^{Barreira} = D_z^{GaAs},
\end{aligned} \tag{3.2.18}$$

portanto,

$$E_x^{Barreira} = -iI, \tag{3.2.19}$$

$$E_x^{GaAs} = \rho_o \left[k_x \left(A_4 v_2^+ + B_4 v_2^- \right) - i s k_x \left(C_4 \omega_2^+ + D_4 \omega_2^- \right) \right], \tag{3.2.20}$$

$$D_z^{GaAs} = \varepsilon(\omega) I, \tag{3.2.21}$$

$$D_z^{Barreira} = \varepsilon_1 \rho_o s k_x \left(C_4 \omega_2^+ - D_4 \omega_2^- \right), \tag{3.2.22}$$

logo, os valores de I foram encontrados, o que gera a seguinte igualdade:

$$i (A_4 v_2^- + B_4 v_2^+) = s [(r_o - 1) C_4 \omega_2^- - (r_o + 1) D_4 \omega_2^+]. \quad (3.2.23)$$

O próximo procedimento será aplicar a condição de continuidade, a equação abaixo:

$$u_z^{(2)} = 0 \longrightarrow u_L^z = u_{IF}^z. \quad (3.2.24)$$

Usando as condições de contorno, as seguintes equações serão encontradas:

$$u_L^z = k_L (A_4 v_2^+ - B_4 v_2^-), \quad (3.2.25)$$

$$u_{IF}^z = k_x (C_4 \omega_2^+ - D_4 \omega_2^-), \quad (3.2.26)$$

desta maneira, encontra-se a relação abaixo:

$$k_L (A_4 v_2^+ - B_4 v_2^-) = -k_x (C_4 \omega_2^+ - D_4 \omega_2^-). \quad (3.2.27)$$

Os cálculos para $z = -d_o$, serão similares aos processos efetuados anteriormente, ou seja:

$$\begin{aligned} E_x^{(2)} &= E_x^{(3)}, \\ D_z^{(2)} &= D_z^{(3)}, \end{aligned} \quad (3.2.28)$$

com, $D_z^{(3)} = \varepsilon_3 E_z^{(3)}$, os campos serão definidos como nas equações abaixo:

$$E_x^{(2)} = \rho_o [k_x (A_2 v_{d_o}^- + B_2 v_{d_o}^+) - i s k_x (C_2 \omega_{d_o}^- + D_2 \omega_{d_o}^+)], \quad (3.2.29)$$

$$E_x^{(3)} = i \rho_o k_x (C_3 \omega_{d_o}^- + D_3 \omega_{d_o}^+), \quad (3.2.30)$$

$$D_z^{(2)} = \varepsilon(\omega) \rho_o s k_x (C_2 \omega_{d_o}^- - D_2 \omega_{d_o}^+), \quad (3.2.31)$$

$$D_z^{(3)} = -i \varepsilon_3 k_x (C_3 \omega_{d_o}^- - D_3 \omega_{d_o}^+). \quad (3.2.32)$$

Diferentemente das ocasiões anteriores à aplicação das condições de contorno, neste caso geram duas igualdades, as seguintes equações:

$$\frac{1}{i} (A_2 v_{d_o}^- + B_2 v_{d_o}^+) - s (C_2 \omega_{d_o}^- + D_2 \omega_{d_o}^+) = s (C_3 \omega_{d_o}^- + D_3 \omega_{d_o}^+), \quad (3.2.33)$$

$$i \rho_o s r (C_2 \omega_{d_o}^- - D_2 \omega_{d_o}^+) = (C_3 \omega_{d_o}^- - D_3 \omega_{d_o}^+), \quad (3.2.34)$$

com, $r = \frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_3}$.

Neste caso as condições de contorno para o deslocamento, são definidas por meio das

igualdades:

$$u_z = 0 \longrightarrow \begin{cases} u_L^{z(3)} = u_{IF}^{z(3)} \\ u_L^{z(2)} = u_{IF}^{z(2)}, \end{cases} \quad (3.2.35)$$

os deslocamentos referente a primeira igualdade são definidos como:

$$u_L^{z(3)} = k_L (A_3 v_{d_o}^- - B_3 v_{d_o}^+), \quad (3.2.36)$$

$$u_{IF}^{z(3)} = -k_x (C_3 \omega_{d_o}^- - D_3 \omega_{d_o}^+) \quad (3.2.37)$$

aplicando a condição de continuidade, a primeira igualdade da equação (3.2.35), encontra-se a seguinte relação:

$$k_L (A_3 v_{d_o}^- - B_3 v_{d_o}^+) = -k_x (C_3 \omega_{d_o}^- - D_3 \omega_{d_o}^+). \quad (3.2.38)$$

O deslocamento que correspondente a segunda igualdade da equação (3.2.35) são definidos como:

$$u_L^{z(2)} = k_L (A_2 v_{d_o}^- - B_2 v_{d_o}^+), \quad (3.2.39)$$

$$u_{IF}^{z(2)} = -k_x (C_2 \omega_{d_o}^- - D_2 \omega_{d_o}^+), \quad (3.2.40)$$

logo,

$$k_L (A_2 v_{d_o}^- - B_2 v_{d_o}^+) = -k_x (C_2 \omega_{d_o}^- - D_2 \omega_{d_o}^+). \quad (3.2.41)$$

Por fim as condições de contorno serão aplicadas quando $z = d_o$. Esta análise é semelhante à feita quando $z = -d_o$. As condições de contorno serão:

$$\begin{aligned} E_x^{(4)} &= E_x^{(3)}, \\ D_z^{(4)} &= D_z^{(3)}, \end{aligned} \quad (3.2.42)$$

os campos para este novo caso são definidos como:

$$E_x^{(4)} = \rho_o [k_x (A_4 v_{d_o}^+ + B_4 v_{d_o}^-) - i s k_x (C_4 \omega_{d_o}^+ + D_4 \omega_{d_o}^-)], \quad (3.2.43)$$

$$E_x^{(3)} = i \rho_o s k_x (C_3 \omega_{d_o}^+ + D_3 \omega_{d_o}^-), \quad (3.2.44)$$

$$D_z^{(4)} = \varepsilon(\omega) \rho_o s k_x (C_4 \omega_{d_o}^+ - \omega_4 v_{d_o}^-), \quad (3.2.45)$$

$$D_z^{(3)} = -i \varepsilon_3 k_x (C_3 \omega_{d_o}^+ - D_3 \omega_{d_o}^-), \quad (3.2.46)$$

aplicando as condições de contorno as duas igualdades abaixo serão obtidas:

$$\frac{1}{i} (A_4 v_{d_o}^+ + B_4 v_{d_o}^-) - s (C_4 \omega_{d_o}^+ + D_4 \omega_{d_o}^-) = s (C_3 \omega_{d_o}^+ + D_3 \omega_{d_o}^-), \quad (3.2.47)$$

$$i \rho_o s r (C_4 \omega_{d_o}^+ - C_4 \omega_{d_o}^-) = (C_3 \omega_{d_o}^+ - D_3 \omega_{d_o}^-). \quad (3.2.48)$$

Finalmente o cálculo para as ultimas condições de contorno serão realizados. A condição de continuidade para $z = d_o$ possui duas igualdades definidas como:

$$u_z = 0 \longrightarrow \begin{cases} u_L^{z(3)} = u_{IF}^{z(3)} \\ u_L^{z(4)} = u_{IF}^{z(4)} \end{cases}, \quad (3.2.49)$$

antes de aplicar as condições é necessário definir as expressões dos deslocamentos. São elas:

$$u_L^{z(3)} = k_L (A_3 v_{d_o}^+ - B_3 v_{d_o}^-), \quad (3.2.50)$$

$$u_{IF}^{z(3)} = -k_x (C_3 \omega_{d_o}^+ - D_3 \omega_{d_o}^-), \quad (3.2.51)$$

$$u_L^{z(2)} = k_L (A_4 v_{d_o}^+ - B_4 v_{d_o}^-), \quad (3.2.52)$$

$$u_{IF}^{z(2)} = -k_x (C_4 \omega_{d_o}^+ - D_4 \omega_{d_o}^-). \quad (3.2.53)$$

Com os deslocamentos conhecidos as condições são aplicadas. As duas igualdades abaixo são encontradas:

$$k_L (A_3 v_{d_o}^+ - B_3 v_{d_o}^-) = -k_x (C_3 \omega_{d_o}^+ - D_3 \omega_{d_o}^-), \quad (3.2.54)$$

$$k_L (A_4 v_{d_o}^+ - B_4 v_{d_o}^-) = -k_x (C_4 \omega_{d_o}^+ - D_4 \omega_{d_o}^-). \quad (3.2.55)$$

Todas as igualdades encontradas serão usadas para encontrar as relações entre as constantes A_n , B_n , C_n e D_n , onde $n = 2, 3$ e 4 . Estas relações permitirão que os deslocamentos u_x e u_z , de cada região, sejam encontrados em função de uma única constante. O que é necessário para realizar o cálculo da constante de normalização.

3.3 Relações

Foram encontradas na seção 3.2 12 equações. Aqui serão divididas em quatro grupos (a, b, c e d), com $\alpha = \frac{k_L}{k_x}$.

O grupo “a” contém três equações, onde (1), (2), e (3) são referentes às interfaces que corresponde aos pontos do eixo z equivalente a $-\frac{L}{2}$ e $-d_o$, respectivamente.

$$a = \begin{cases} (1) i (A_2 v_2^- + B_2 v_2^+) = s [(r_o - 1) C_2 \omega_2^- - (r_o + 1) D_2 \omega_2^+] \\ (2) \alpha (A_2 v_2^- - B_2 v_2^+) = (C_2 \omega_2^- - D_2 \omega_2^+) \\ (3) \alpha (A_2 v_{d_o}^- - B_2 v_{d_o}^+) = (C_2 \omega_{d_o}^- - D_2 \omega_{d_o}^+), \end{cases} \quad (3.3.56)$$

com as equações do grupo “a” encontra-se a relação $\frac{B_2}{A_2}$. Primeiro isola-se C_2 na equação

(3),

$$C_2 = \alpha \omega_{d_o}^+ (A_2 v_{d_o}^- - B_2 v_{d_o}^+) + D_2 \omega_{d_o}^+ \omega_{d_o}^+. \quad (3.3.57)$$

Substituindo C_2 na equação (2), do grupo “a”, encontra-se D_2 ,

$$D_2 = \frac{\alpha}{\omega_{d_o}^+ \omega_2^- - \omega_2^+ \omega_{d_o}^-} [(A_2 v_2^- - B_2 v_2^+) \omega_{d_o}^- - (A_2 v_{d_o}^- - B_2 v_{d_o}^+) \omega_2^-]. \quad (3.3.58)$$

Próximo passo substituir D_2 na equação (3.3.57), para encontrar C_2 como na seguinte equação:

$$C_2 = \frac{\alpha}{\omega_{d_o}^+ \omega_2^- - \omega_2^+ \omega_{d_o}^-} [(A_2 v_2^- - B_2 v_2^+) \omega_{d_o}^+ - (A_2 v_{d_o}^- - B_2 v_{d_o}^+) \omega_2^+], \quad (3.3.59)$$

como os valores de $\omega_{d_o}^+$ e ω_2^- foram definidos anteriormente, então:

$$\omega_{d_o}^+ \omega_2^- = e^{-[k_x(\frac{L}{2} - d_o)]}, \quad \omega_2^+ \omega_{d_o}^- = e^{[k_x(\frac{L}{2} - d_o)]}, \quad (3.3.60)$$

logo,

$$\omega_{d_o}^+ \omega_2^- - \omega_2^+ \omega_{d_o}^- = -2 \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \quad (3.3.61)$$

Substituindo (3.3.57), (3.3.58), (3.3.60) e (3.3.61) na equação (3) do grupo “a” obtém-se a razão:

$$\frac{B_2}{A_2} = \frac{\bar{\psi}_2 v_2^- - v_{d_o}^-}{\psi_2 v_2^+ - v_{d_o}^+}, \quad (3.3.62)$$

com,

$$\bar{\psi}_2 = \delta_d - \frac{i}{\alpha s} \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right], \quad \psi_2 = \delta_d + \frac{i}{\alpha s} \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right], \quad (3.3.63)$$

$$\delta_d = r \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] + \cosh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]. \quad (3.3.64)$$

As equações (4), (5) e (6) compõem o grupo “b” são referentes as interfaces do poço que correspondem aos pontos $\frac{L}{2}$ e d_o do eixo z respectivamente. Com este grupo será realizado o cálculo da razão $\frac{A_4}{B_4}$.

$$b = \begin{cases} (4) i (A_4 v_2^- + B_4 v_2^+) = s [(r_o - 1) C_4 \omega_2^- - (r_o + 1) D_4 \omega_2^+] \\ (5) \alpha (A_4 v_2^+ - B_4 v_2^-) = (C_4 \omega_2^+ - D_4 \omega_2^-) \\ (6) \alpha (A_4 v_{d_o}^+ - B_4 v_{d_o}^-) = (C_4 \omega_{d_o}^+ - D_4 \omega_{d_o}^-), \end{cases} \quad (3.3.65)$$

O calculo da razão $\frac{A_4}{B_4}$ pode ser efetuado de duas maneiras: (i) efetuar o cálculo da mesma forma usada para encontrar a razão $\frac{A_2}{B_2}$, só que usando as equações (4), (5) e (6), ou (ii) partindo das equações (3.3.59), (3.3.58), efetuando o ultimo passo feito para encontrar $\frac{A_2}{B_2}$

e usando as seguintes relações:

$$\begin{aligned} A_2 &\longrightarrow B_4 & e & C_2 \longrightarrow D_4 \\ B_2 &\longrightarrow A_4 & & D_2 \longrightarrow C_4. \end{aligned} \quad (3.3.66)$$

As relações da equação (3.3.66) podem ser usadas uma vez que se referem as interfaces correspondentes aos mesmos materiais semicondutores, (AlAs) e (InAs). É necessário também levar em consideração os pontos no eixo z em que elas se encontram.

Assim tendo em vista as duas maneiras para resolver este problema, as seguintes expressões serão encontradas:

$$C_4 = -\frac{\alpha}{\omega_{d_o}^+ \omega_2^- - \omega_2^+ \omega_{d_o}^-} [(A_4 v_2^+ - B_4 v_2^-) \omega_{d_o}^- - (A_4 v_{d_o}^+ - B_4 v_{d_o}^-) \omega_2^-], \quad (3.3.67)$$

$$D_4 = -\frac{\alpha}{\omega_{d_o}^+ \omega_2^- - \omega_2^+ \omega_{d_o}^-} [(A_4 v_2^+ - B_4 v_2^-) \omega_{d_o}^+ - (A_4 v_{d_o}^+ - B_4 v_{d_o}^-) \omega_2^+]. \quad (3.3.68)$$

Com os valores de C_4 e D_4 encontrados, substituindo-os na equação (4) do grupo b, obtém-se a razão abaixo:

$$\frac{B_4}{A_4} = \frac{v_{d_o}^+ - \psi_2 v_2^+}{v_{d_o}^- - \bar{\psi}_2 v_2^-} = \frac{\psi_2 v_2^+ - v_{d_o}^+}{v_{d_o}^- - \bar{\psi}_2 v_2^-} = \frac{A_2}{B_2}. \quad (3.3.69)$$

Diferentemente dos cálculos usados, até aqui para encontrar as razões $\frac{A_2}{B_2}$ e $\frac{A_4}{B_4}$, para calcular as próximas relações será necessário relacionar as equações do grupo “c” com as do grupo “d”.

$$c = \begin{cases} (7) \frac{1}{i} (A_2 v_{d_o}^- + B_2 v_{d_o}^+) - s (C_2 \omega_{d_o}^- + D_2 \omega_{d_o}^+) = s (C_3 \omega_{d_o}^- + D_3 \omega_{d_o}^+) \\ (8) i \rho_o s r (C_2 \omega_{d_o}^- - D_2 \omega_{d_o}^+) = (C_3 \omega_{d_o}^- - D_3 \omega_{d_o}^+) \\ (9) \alpha (A_3 v_{d_o}^- - B_3 v_{d_o}^+) = (C_3 \omega_{d_o}^- - D_3 \omega_{d_o}^+), \end{cases} \quad (3.3.70)$$

$$d = \begin{cases} (10) \frac{1}{i} (A_4 v_{d_o}^+ + B_4 v_{d_o}^-) - s (C_4 \omega_{d_o}^+ + D_4 \omega_{d_o}^-) = s (C_3 \omega_{d_o}^+ + D_3 \omega_{d_o}^-) \\ (11) i \rho_o s r (C_4 \omega_{d_o}^+ - D_4 \omega_{d_o}^-) = (C_3 \omega_{d_o}^+ - D_3 \omega_{d_o}^-) \\ (12) \alpha (A_3 v_{d_o}^+ - B_3 v_{d_o}^-) = (C_3 \omega_{d_o}^+ - D_3 \omega_{d_o}^-). \end{cases} \quad (3.3.71)$$

Usando as equações (9) e (12) encontra-se as constantes:

$$D_3 = \frac{\alpha}{\omega_{d_o}^+ \omega_{d_o}^+ - \omega_{d_o}^- \omega_{d_o}^-} [(A_3 v_{d_o}^+ - B_3 v_{d_o}^-) \omega_{d_o}^- - (A_3 v_{d_o}^- - B_3 v_{d_o}^+) \omega_{d_o}^+], \quad (3.3.72)$$

$$C_3 = \frac{\alpha}{\omega_{d_o}^+ \omega_{d_o}^+ - \omega_{d_o}^- \omega_{d_o}^-} [(A_3 v_{d_o}^+ - B_3 v_{d_o}^-) \omega_{d_o}^+ - (A_3 v_{d_o}^- - B_3 v_{d_o}^+) \omega_{d_o}^-], \quad (3.3.73)$$

com,

$$\omega_{d_o}^+ \omega_{d_o}^+ = e^{[2d_o k_x]} = e^{[k_x (\frac{L}{2} - d_o)]}, \quad \omega_{d_o}^- \omega_{d_o}^- = e^{[-2d_o k_x]} = e^{[-k_x (\frac{L}{2} - d_o)]},$$

$$\omega_{d_o}^+ \omega_{d_o}^+ - \omega_{d_o}^- \omega_{d_o}^- = -2 \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right], \quad \omega_{d_o}^+ \omega_{d_o}^+ + \omega_{d_o}^- \omega_{d_o}^- = -2 \cosh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right].$$

Usando as equações (7) e (10) a relação $\frac{D_3}{C_3}$ será calculada. O primeiro passo será montar um sistema de equações com (7) e (10) que serão igualados as constantes L_2 e L_4 , como na equação abaixo:

$$\begin{cases} \frac{1}{is} (A_2 v_{d_o}^- + B_2 v_{d_o}^+) - (C_2 \omega_{d_o}^- + D_2 \omega_{d_o}^+) = (C_3 \omega_{d_o}^- + D_3 \omega_{d_o}^+) = L_2 \\ \frac{1}{is} (A_4 v_{d_o}^+ + B_4 v_{d_o}^-) - (C_4 \omega_{d_o}^+ + D_4 \omega_{d_o}^-) = (C_3 \omega_{d_o}^+ + D_3 \omega_{d_o}^-) = L_4. \end{cases} \quad (3.3.74)$$

As quatro igualdades que compõem o sistema (3.3.74) originam dois novos sistemas o (3.3.81) e o (3.3.75) que será usado para encontrar relações entre as constantes L_2 e L_4 , e a razão $\frac{D_3}{C_3}$.

$$\begin{cases} (C_3 \omega_{d_o}^- + D_3 \omega_{d_o}^+) = L_2 \\ (C_3 \omega_{d_o}^+ + D_3 \omega_{d_o}^-) = L_4. \end{cases} \quad (3.3.75)$$

O primeiro passo para resolver o sistema (3.3.75) é isolar em ambas equações a constante C_3 , ou seja,

$$C_3 = L_2 \omega_{d_o}^+ - D_3 \omega_{d_o}^{2+}, \quad (3.3.76)$$

$$C_3 = L_4 \omega_{d_o}^- - D_3 \omega_{d_o}^{2-}, \quad (3.3.77)$$

igualando essas equações encontra-se a constante D_3 e depois substituindo-a na equação (3.3.76) ou na (3.3.77) a constante C_3 será obtida.

$$D_3 = \frac{L_2 \omega_{d_o}^+ - L_4 \omega_{d_o}^-}{2 \sinh(2k_x d_o)}, \quad (3.3.78)$$

$$C_3 = \frac{L_4 \omega_{d_o}^+ - L_2 \omega_{d_o}^-}{2 \sinh(2k_x d_o)}. \quad (3.3.79)$$

Com as constantes encontradas é só realizar a divisão $\frac{D_3}{C_3}$ que resultará na equação:

$$\frac{D_3}{C_3} = \frac{L_2 \omega_{d_o}^+ - L_4 \omega_{d_o}^-}{L_4 \omega_{d_o}^+ - L_2 \omega_{d_o}^-}. \quad (3.3.80)$$

O passo seguinte será encontrar as relações entre L_2 e L_4 , com o sistema:

$$\begin{cases} \frac{1}{is} (A_2 v_{d_o}^- + B_2 v_{d_o}^+) - (C_2 \omega_{d_o}^- + D_2 \omega_{d_o}^+) = L_2 \\ \frac{1}{is} (A_4 v_{d_o}^+ + B_4 v_{d_o}^-) - (C_4 \omega_{d_o}^+ + D_4 \omega_{d_o}^-) = L_4. \end{cases} \quad (3.3.81)$$

Para encontrar a razão $\frac{L_2}{L_4}$, será necessário encontrar os valores para cada termo entre parênteses do sistema (3.3.81). O termo A_2 é posto em evidência como na equação:

$$(A_2 v_{d_o}^- + B_2 v_{d_o}^+) = A_2 \left[v_{d_o}^- + \left(\frac{B_2}{A_2} \right) v_{d_o}^+ \right] \quad (3.3.82)$$

substituindo a equação (3.3.62) em (3.3.82), obtém-se:

$$A_2 \left[v_{d_o}^- + \left(\frac{B_2}{A_2} \right) v_{d_o}^+ \right] = A_2 \left[v_{d_o}^- + \left(\frac{\bar{\psi}_2 v_2^- - v_{d_o}^-}{\psi_2 v_2^+ - v_{d_o}^+} \right) v_{d_o}^+ \right]. \quad (3.3.83)$$

O próximo passo será realizar as operações dos termos entre colchetes. Depois substituir as definições (3.3.63), (3.3.64) e (3.2.7) para encontrar o resultado abaixo:

$$\begin{aligned} (A_2 v_{d_o}^- + B_2 v_{d_o}^+) &= -A_2 N_2 \left\{ 1 - \delta_a \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{k_x}{s k_L} \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right\}, \end{aligned} \quad (3.3.84)$$

com,

$$N_2^{-1} = \psi_2 v_2^+ - v_{d_o}^+, \quad (3.3.85)$$

redefinindo (3.3.84) encontra-se:

$$(A_2 v_{d_o}^- + B_2 v_{d_o}^+) = -A_2 N_2 \bar{d}_{,1} \quad (3.3.86)$$

com,

$$\bar{d}_1 = \left\{ 1 - \delta_a \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \frac{k_x}{s k_L} \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right\}. \quad (3.3.87)$$

Para calcular $(C_2 \omega_{d_o}^- + D_2 \omega_{d_o}^+)$ será necessário multiplicar as equações (3.3.58) e (3.3.59) por $\omega_{d_o}^+$ e $\omega_{d_o}^-$, respectivamente. Encontrando as equações:

$$D_2 \omega_{d_o}^+ = \frac{\alpha}{2 \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]} \left[(A_2 v_2^- - B_2 v_2^+) - (A_2 v_{d_o}^- - B_2 v_{d_o}^+) \omega_2^- \omega_{d_o}^+ \right], \quad (3.3.88)$$

$$C_2 \omega_{d_o}^- = \frac{\alpha}{2 \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]} \left[(A_2 v_2^- - B_2 v_2^+) - (A_2 v_{d_o}^- - B_2 v_{d_o}^+) \omega_2^+ \omega_{d_o}^- \right]. \quad (3.3.89)$$

Efetuando a adição das equações (3.3.88) e (3.3.114), o resultado obtido será:

$$\begin{aligned} (C_2 \omega_{d_o}^- + D_2 \omega_{d_o}^+) &= \frac{\alpha A_2}{\sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]} \left\{ \underbrace{\left[v_2^- - \left(\frac{B_2}{A_2} \right) v_2^+ \right]}_{(\#)} \right. \\ &\quad \left. - \underbrace{\left[v_{d_o}^- - \left(\frac{B_2}{A_2} \right) v_{d_o}^+ \right]}_{(\#\#)} \cos \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.3.90)$$

É fundamental agora calcular os valores de $(\#)$ e $(\#\#)$. Cálculo este que será realizado

da mesma forma que o efetuado para encontrar $(A_2v_{d_o}^- + B_2v_{d_o}^+)$. Consequentemente os resultados encontrados serão:

$$(\#) = 2iN_2 \left\{ \frac{1}{\alpha s} \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] + \sin \left[k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right\}, \quad (3.3.91)$$

$$\begin{aligned} (\#\#) = 2iN_2 \left\{ \frac{1}{\alpha s} \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \cos \left[k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right. \\ \left. + \delta_d \sin \left[k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.3.92)$$

Substituindo as equações (3.3.91) e (3.3.92) em (3.3.90) encontra-se $(C_2\omega_{d_o}^- + D_2\omega_{d_o}^+)$.

$$\begin{aligned} (C_2\omega_{d_o}^- + D_2\omega_{d_o}^+) = \frac{2i}{s} A_2 N_2 \left\{ 1 + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right. \\ - \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \\ \left. - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \delta_d \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right\}, \end{aligned} \quad (3.3.93)$$

redefinindo a equação (3.3.93) chega-se em:

$$(C_2\omega_{d_o}^- + D_2\omega_{d_o}^+) = \frac{2i}{s} A_2 N_2 \bar{d}_2, \quad (3.3.94)$$

com,

$$\begin{aligned} \bar{d}_2 = \left\{ 1 + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right. \\ - \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \\ \left. - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \delta_d \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.3.95)$$

Agora o cálculo a ser resolvido será $(A_4v_{d_o}^+ + B_4v_{d_o}^-)$. Inicialmente A_4 será isolado.

$$(A_4v_{d_o}^+ + B_4v_{d_o}^-) = A_4 \left[v_{d_o}^+ + \left(\frac{B_4}{A_4} \right) v_{d_o}^- \right], \quad (3.3.96)$$

substituindo (3.3.69) em (3.3.96) obtém-se:

$$\left[A_4v_{d_o}^+ + \left(\frac{B_4}{A_4} \right) v_{d_o}^- \right] = A_4 \left[v_{d_o}^+ + \left(\frac{\psi_2 v_2^+ - v_{d_o}^+}{\psi_2 v_2^- - v_{d_o}^-} \right) v_{d_o}^- \right]. \quad (3.3.97)$$

O passo seguinte será efetuar as operações dos termos entre colchetes, e substituir as definições (3.3.63), (3.3.64) e (3.2.7), e encontrar:

$$(A_4 v_{d_o}^+ + B_4 v_{d_o}^-) = -2A_4 N_4 \left\{ 1 - \delta_d \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \frac{k_x}{s k_L} \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right\}, \quad (3.3.98)$$

ou seja,

$$(A_4 v_{d_o}^+ + B_4 v_{d_o}^-) = -2A_4 N_4 \bar{d}_1, \quad (3.3.99)$$

com,

$$N_4^{-1} = \bar{\psi}_2 v_2^- - v_{d_o}^- \quad (3.3.100)$$

Falta encontrar agora $(C_4 \omega_{d_o}^+ + D_4 \omega_{d_o}^-)$. O primeiro passo será multiplicar as equações (3.3.67) e (3.3.68) por $\omega_{d_o}^+$ e $\omega_{d_o}^-$ respectivamente:

$$C_4 \omega_{d_o}^+ = -\frac{\alpha}{2 \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]} \left[(A_4 v_2^+ - B_4 v_2^-) - (A_4 v_{d_o}^+ - B_4 v_{d_o}^-) \omega_2^- \omega_{d_o}^+ \right], \quad (3.3.101)$$

$$D_4 \omega_{d_o}^- = -\frac{\alpha}{2 \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]} \left[(A_4 v_2^+ - B_4 v_2^-) - (A_4 v_{d_o}^+ - B_4 v_{d_o}^-) \omega_2^+ \omega_{d_o}^- \right]. \quad (3.3.102)$$

Como foi calculado $C_4 \omega_{d_o}^+$ e $D_4 \omega_{d_o}^-$ agora basta realizar a adição destes dois termos.

$$(C_4 \omega_{d_o}^+ + D_4 \omega_{d_o}^-) = -\frac{\alpha A_4}{\sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]} \left\{ \underbrace{\left[v_2^+ - \left(\frac{B_4}{A_4} \right) v_2^- \right]}_{(3\#)} - \underbrace{\left[v_{d_o}^+ - \left(\frac{B_4}{A_4} \right) v_{d_o}^- \right]}_{(4\#)} \cosh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right\}. \quad (3.3.103)$$

A solução desejada será alcançada quando (3#) e (4#) forem encontrados. Para encontrá-los será necessário usar as definições (3.3.63), (3.3.64) e (3.2.7). Ao fim dessas operações serão obtidos os seguintes resultados:

$$(3\#) = -2i N_4 \left\{ \frac{1}{\alpha s} \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] + \sin \left[k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right\}, \quad (3.3.104)$$

$$(4\#) = -2i N_4 \left\{ \frac{1}{\alpha s} \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \cos \left[k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] + \delta_d \sin \left[k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right\}. \quad (3.3.105)$$

Conhecendo (3#) e (4#) para obter a solução final de $(C_4\omega_{d_o}^+ + D_4\omega_{d_o}^-)$ é só substituí-los na equação (3.3.104), que resultará na seguinte solução:

$$\begin{aligned} (C_4\omega_{d_o}^+ + D_4\omega_{d_o}^-) &= \frac{2i}{s}A_4N_4 \left\{ 1 + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right. \\ &\quad - \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \\ &\quad \left. - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \delta_d \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right\}, \end{aligned} \quad (3.3.106)$$

ou seja,

$$(C_4\omega_{d_o}^+ + D_4\omega_{d_o}^-) = \frac{2i}{s}A_4N_4\bar{d}_2 \quad (3.3.107)$$

Considerando a parte esquerda das equações que compõem o sistema (3.3.81), ao substituir o resultado encontrado para cada termo entre parênteses, encontra-se as equações abaixo:

$$\frac{1}{is} (A_2v_{d_o}^- + B_2v_{d_o}^+) - (C_2\omega_{d_o}^- + D_2\omega_{d_o}^+) = \frac{2i}{s}A_2N_2 [\bar{d}_1 - \bar{d}_2], \quad (3.3.108)$$

$$\frac{1}{is} (A_4v_{d_o}^+ + B_4v_{d_o}^-) - (C_4\omega_{d_o}^+ + D_4\omega_{d_o}^-) = \frac{2i}{s}A_4N_4 [\bar{d}_1 - \bar{d}_2], \quad (3.3.109)$$

assim, com os resultados das equações (3.3.108) e (3.3.109) um novo sistema será formado, ou seja:

$$\begin{cases} L_2 = \frac{2i}{s}A_2N_2 [\bar{d}_1 - \bar{d}_2] \\ L_4 = \frac{2i}{s}A_4N_4 [\bar{d}_1 - \bar{d}_2] \end{cases} \quad (3.3.110)$$

portanto,

$$\frac{L_2}{L_4} = \frac{A_2N_2}{A_4N_4}. \quad (3.3.111)$$

Para concretizar o cálculo das relações, que serão necessárias para a solução deste problema. As ultimas duas serão calculadas, através das equações (8) e (11) dos sistemas “c” e “d”

Começando com a equação (8). O procedimento será o mesmo usado anteriormente neste tópico, para resolver a equação (3.3.82). Inicialmente usa-se as equações (3.3.88) e (3.3.90) para encontrar $(C_2\omega_{d_o}^- - D_2\omega_{d_o}^+)$.

$$\begin{aligned} (C_2\omega_{d_o}^- - D_2\omega_{d_o}^+) &= 2i\alpha A_2N_2 \left\{ \delta_d \sin \left[k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \cos \left[k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.3.112)$$

redefinindo (3.3.112), ou seja,

$$(C_2\omega_{d_o}^- - D_2\omega_{d_o}^+) = 2i\alpha A_2 N_2 \bar{d}_3, \quad (3.3.113)$$

com,

$$\begin{aligned} \bar{d}_3 = & \left\{ \delta_d \sin \left[k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right. \\ & \left. + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \cos \left[k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.3.114)$$

Ao substituir o valor do termo $(C_2\omega_{d_o}^- - D_2\omega_{d_o}^+)$, na equação (8) do sistema “c”. Encontra-se uma forma mais sintetizada para esta equação, ou seja,

$$(C_3\omega_{d_o}^- - D_3\omega_{d_o}^+) = -2rs\rho_o\alpha A_2 N_2 \bar{d}_3. \quad (3.3.115)$$

Agora o próximo passo envolve a equação (11) do sistema “d”. Será efetuado o cálculo do termo $(C_4\omega_{d_o}^+ - D_4\omega_{d_o}^-)$. Seguindo um processo homólogo ao utilizado para encontrar a equação (3.3.96) obtém-se o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} (C_4\omega_{d_o}^+ - D_4\omega_{d_o}^-) = & -2i\alpha A_4 N_4 \left\{ \delta_d \sin \left[k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right. \\ & \left. + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \cos \left[k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.3.116)$$

isto é,

$$(C_4\omega_{d_o}^+ - D_4\omega_{d_o}^-) = -2i\alpha A_4 N_4 \bar{d}_3. \quad (3.3.117)$$

Para finalizar, o valor encontrado na equação (3.3.117) será substituído na equação (11) do sistema “d” e originará a seguinte equação:

$$(C_3\omega_{d_o}^+ - D_3\omega_{d_o}^-) = 2rs\rho_o\alpha A_4 N_4 \bar{d}_3. \quad (3.3.118)$$

O sistema (3.3.119) será montado com as equações (3.3.115) e (3.3.118), ou seja,

$$\begin{cases} (C_3\omega_{d_o}^- - D_3\omega_{d_o}^+) = -2\alpha R A_2 N_2 \bar{d}_3 \\ (C_3\omega_{d_o}^+ - D_3\omega_{d_o}^-) = 2\alpha R A_4 N_4 \bar{d}_3, \end{cases} \quad (3.3.119)$$

com,

$$R = rs\rho_o. \quad (3.3.120)$$

Com o novo sistema montado, o próximo passo será encontrar os valores dos termos do lado esquerdo de ambas as equações. Começando com o termo $(C_3\omega_{d_o}^- - D_3\omega_{d_o}^+)$. Para

resolvê-lo, a constante C_3 será colocada em evidência,

$$(C_3\omega_{d_o}^- - D_3\omega_{d_o}^+) = C_3 \left[\omega_{d_o}^- - \left(\frac{D_3}{C_3} \right) \omega_{d_o}^+ \right]. \quad (3.3.121)$$

O termo entre colchetes seja resolvido, para isso substitui-se a equação (3.3.80) no lugar do termo $\frac{D_3}{C_3}$.

$$C_3 \left[\omega_{d_o}^- - \left(\frac{D_3}{C_3} \right) \omega_{d_o}^+ \right] = C_3 \left[\omega_{d_o}^- - \left(\frac{L_2\omega_{d_o}^+ - L_4\omega_{d_o}^-}{L_4\omega_{d_o}^+ - L_2\omega_{d_o}^-} \right) \omega_{d_o}^+ \right]. \quad (3.3.122)$$

Efetuando as operações contidas no termo do lado direito da equação (3.3.122), e usando a definição (3.2.7), encontra-se:

$$C_3 \left[\omega_{d_o}^- - \left(\frac{D_3}{C_3} \right) \omega_{d_o}^+ \right] = 2N_3C_3 [L_4 - L_2 \cosh(2k_x d_o)], \quad (3.3.123)$$

ou seja,

$$(C_3\omega_{d_o}^- - D_3\omega_{d_o}^+) = 2C_3N_3M_2, \quad (3.3.124)$$

com,

$$N_3^{-1} = L_4\omega_{d_o}^+ - L_2\omega_{d_o}^-, \quad M_2 = [L_4 - L_2 \cosh(2k_x d_o)]. \quad (3.3.125)$$

Para resolver o termo $(C_3\omega_{d_o}^+ - D_3\omega_{d_o}^-)$, o processo utilizado será similar ao efetuado para o termo $(C_3\omega_{d_o}^- - D_3\omega_{d_o}^+)$, logo,

$$(C_3\omega_{d_o}^+ - D_3\omega_{d_o}^-) = 2N_3 [L_4 \cosh(2k_x d_o), -L_2] \quad (3.3.126)$$

ou melhor,

$$(C_3\omega_{d_o}^+ - D_3\omega_{d_o}^-) = 2C_3N_3M_4, \quad (3.3.127)$$

com,

$$M_4 = [L_4 \cosh(2k_x d_o) - L_2]. \quad (3.3.128)$$

Substituindo as equações (3.3.124) e (3.3.127) no sistema (3.3.119), encontra-se:

$$\begin{cases} C_3N_3M_2 = -\alpha RA_2N_2\bar{d}_3 \\ C_3N_3M_4 = \alpha RA_4N_4\bar{d}_3. \end{cases} \quad (3.3.129)$$

Considere o sistema (3.3.129), o próximo passo é realizar o quociente entre suas equações, logo,

$$-\frac{M_2}{M_4} = \frac{A_2N_2}{A_4N_4}. \quad (3.3.130)$$

Substituindo a relação (3.3.130) em (3.3.111) encontra-se a equação:

$$\frac{L_2}{L_4} = -\frac{M_2}{M_4}, \quad (3.3.131)$$

na equação (3.3.131) de M_2 e M_4 serão trocadas por suas definições, as equações (3.3.125) e (3.3.128) respectivamente, ou seja,

$$\frac{L_2}{L_4} = -\frac{L_4 - L_2 \cosh(2k_x d_o)}{L_4 \cosh(2k_x d_o) - L_2}, \quad (3.3.132)$$

portanto,

$$L_2^2 - L_4^2 = 0, \quad (3.3.133)$$

ou melhor,

$$(L_2 - L_4)(L_2 + L_4) = 0. \quad (3.3.134)$$

A equação (3.3.134), possui duas soluções que serão escritas abaixo:

- *Caso 1* : $L_2 - L_4 = 0 \implies L_2 = L_4,$
- *Caso 2* : $L_2 + L_4 = 0 \implies L_2 = -L_4.$

Quando $L_2 = L_4$, os valores de M_2 , M_4 e N_3^{-1} serão:

$$M_2 = -2L_2 \sinh^2(k_x d_o), \quad (3.3.135)$$

$$M_4 = 2L_2 \sinh^2(k_x d_o), \quad (3.3.136)$$

$$N_3^{-1} = 2L_2 \sinh(k_x d_o), \quad (3.3.137)$$

ou seja, comparando as equações (3.3.135) e (3.3.136), ou aplicando a condição na (3.3.131) uma relação entre M_2 e M_4 vai ser encontrada.

$$M_4 = -M_2, \quad (3.3.138)$$

segundo o mesmo principio só que agora com a equação (3.3.130) obtém-se:

$$A_2 N_2 = A_4 N_4. \quad (3.3.139)$$

Para finalizar a análise do primeiro caso, troca-se as constantes M_2 e N_3 da primeira equação do sistema (3.3.129) pelos seus respectivos valores, as equações (3.3.135) e (3.3.137), encontra-se:

$$A_2 N_2 = -\frac{C_3 \sinh(k_x d_o)}{\alpha R \bar{d}_3}. \quad (3.3.140)$$

A partir desse momento o segundo, $L_2 = -L_4$, será estudado. O processo da análise

será o mesmo usado quando $L_2 = L_4$. Inicialmente será aplicada nas equações (3.3.128), (3.3.125) valores para M_2 , M_4 e N_3^{-1} serão encontrados.

$$M_2 = 2L_4 \cosh^2(k_x d_o), \quad (3.3.141)$$

$$M_4 = 2L_4 \cosh^2(k_x d_o), \quad (3.3.142)$$

$$N_3^{-1} = 2L_4 \cosh^2(k_x d_o), \quad (3.3.143)$$

ao comparar as equações (3.3.135), (3.3.136), ou aplicar a condição na equação (3.3.131) uma relação entre M_2 e M_4 , isto é,

$$M_4 = M_2 \quad (3.3.144)$$

a próxima relação será encontrada fazendo $L_2 = -L_4$ na equação (3.3.130).

$$A_2 N_2 = -A_4 N_4, \quad (3.3.145)$$

logo,

$$A_4 N_4 = \frac{C_3 \cosh(k_x d_o)}{\alpha R \bar{d}_3}. \quad (3.3.146)$$

3.4 Cálculos de deslocamentos

Na seção 3.1 as expressões para os deslocamentos foram citadas. Estas equações são muito genéricas e dependem de varias constantes, vide as equações (3.1.4), (3.1.5) e (3.1.6).

Nesta seção o objetivo é calcular outras expressões para os deslocamentos que sejam em função de apenas uma constante e assim tornar possível o cálculo da constante de normalização. Para tais cálculos, será necessário as constantes e relações encontradas nas seções 3.2, 3.3, além dos deslocamentos da seção 3.1.

A seção será iniciada com o cálculo da componente x do deslocamento, u_x , e finalizada com o cálculo da componente z , u_z .

3.4.1 Cálculo do u_x

Esta seção tem como objetivo encontrar a componente x do deslocamento, para as regiões $d_0 \leq z \leq \frac{l}{2}$ e $-\frac{l}{2} \leq z \leq -d_0$, 2 e 4, respectivamente, uma vez que nas barreiras

os deslocamentos decaem exponencialmente.

Inicialmente será calculado o u_x da região 2, ou seja,

$$u_x^{(2)} = k_x \underbrace{(A_2 e^{ik_L z} + B_2 e^{-ik_L z})}_p - ik_x \underbrace{(C_2 e^{k_x z} + D_2 e^{-k_x z})}_q. \quad (3.4.147)$$

Para encontrar $u_x^{(2)}$ é necessário encontrar os valores de p e q . Começando com p , a constante A_2 é posta em evidência, observe a equação:

$$p = A_2 \left[e^{ik_L z} + \left(\frac{B_2}{A_2} \right) e^{-ik_L z} \right], \quad (3.4.148)$$

agora o termo $\frac{B_2}{A_2}$ será substituído pela equação (3.3.62), logo,

$$p = A_2 \left[e^{ik_L z} + \left(\frac{\bar{\psi}_2 v_2^- - v_{d_o}^-}{\psi_2 v_2^+ - v_{d_o}^+} \right) e^{-ik_L z} \right]. \quad (3.4.149)$$

O próximo procedimento é usar as definições (3.2.7) e (3.3.63), depois efetuar as operações dos termos entre colchetes assim o valor de p será:

$$p = 2A_2 N_2 \left\{ \delta_d \cos k_L \left(z + \frac{L}{2} \right) - \cos k_L (d_o + z) - \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) \right\}. \quad (3.4.150)$$

O passo seguinte será encontrar o valor de q . Lembrando-se das definições de D_2 e C_2 às equações (3.3.58) e (3.3.59). A primeira coisa a fazer é multiplica-las por $e^{-k_x z}$ e $e^{k_x z}$ respectivamente. As duas equações abaixo serão obtidas:

$$C_2 e^{k_x z} = \frac{\alpha}{2 \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]} \left\{ (A_2 v_2^- - B_2 v_2^+) e^{k_x(z+d_o)} - (A_2 v_{d_o}^- - B_2 v_{d_o}^+) e^{k_x(z+\frac{L}{2})} \right\}, \quad (3.4.151)$$

$$D_2 e^{-k_x z} = \frac{\alpha}{2 \sinh \left[k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]} \left\{ (A_2 v_2^- - B_2 v_2^+) e^{-k_x(z+d_o)} - (A_2 v_{d_o}^- - B_2 v_{d_o}^+) e^{-k_x(z+\frac{L}{2})} \right\}, \quad (3.4.152)$$

portanto,

$$(C_2 e^{k_x z} + D_2 e^{-k_x z}) = \frac{\alpha}{\sinh k_x \left(d_o - \frac{L}{2}\right)} \left[\underbrace{(A_2 v_2^- - B_2 v_2^+)}_{(*)} \cosh k_x (d_o + z) - \underbrace{(A_2 v_{d_o}^- - B_2 v_{d_o}^+)}_{(**)} \cosh k_x \left(\frac{L}{2} + z\right) \right]. \quad (3.4.153)$$

O valor final de q será conhecido quando $(*)$ e $(**)$ forem encontrados. Estes dois termos são similares ao termo antes chamado de p , então, para calculá-los o procedimento será o mesmo realizado para p .

$$(*) = 2iA_2 N_2 \left[\left(\frac{1}{\alpha s}\right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) + \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \right], \quad (3.4.154)$$

$$(**) = 2iA_2 N_2 \left[\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) + \left(\frac{1}{\alpha s}\right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \times \right. \\ \left. \times \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \right], \quad (3.4.155)$$

logo, o valor final de q é:

$$q = -\frac{2iA_2 N_2 \alpha}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right)} \left\{ \cosh k_x (d_o + z) \left[\left(\frac{1}{\alpha s}\right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) + \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \right] - \cosh k_x \left(\frac{L}{2} + z\right) \left[\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) + \left(\frac{1}{\alpha s}\right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \right] \right\}. \quad (3.4.156)$$

Tendo em vista os valores calculados para p e q . Tais valores devem ser colocados em seus respectivos lugares na equação (3.4.147), chega-se no valor de $u_x^{(2)}$, a equação:

$$u_x^{(2)} = 2A_2 N_2 k_x \left\{ -\cos k_L (d_o + z) + \delta_d \cos k_L \left(z + \frac{L}{2}\right) - \left(\frac{1}{\alpha s}\right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} + d_o\right) + \frac{\alpha}{\sinh k_x \left(d_o - \frac{L}{2}\right)} \left\{ \left[\left(\frac{1}{\alpha s}\right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \right] \times \right. \right. \\ \left. \times \cosh k_x (d_o + z) - \left[\left(\frac{1}{\alpha s}\right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \cos k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) + \delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \right] \cosh k_x \left(\frac{L}{2} + z\right) \right\} \right\}. \quad (3.4.157)$$

Na equação de $u_x^{(2)}$ observa-se que as funções “sin”, “cos” e “cosh” possuem o termo: $\left(\frac{L}{2} + z\right)$, em seus argumentos. Lembrando que $d_o = \frac{L}{6}$. A parte do argumento referido será reescrita de acordo com as seguintes expressões:

$$\begin{aligned} d_o = \frac{L}{6} &\longrightarrow \frac{L}{2} + z = (d_o + z) + \left(\frac{L}{2} - d_o\right), \\ \frac{L}{2} = d_o + \frac{L}{3} & \end{aligned} \quad (3.4.158)$$

logo,

$$\begin{aligned} \sin k_L \left(\frac{L}{2} + z\right) &= \sin k_L \left[(d_o + z) + \left(\frac{L}{2} - d_o\right)\right] \\ \cos k_L \left(\frac{L}{2} + z\right) &= \cos k_L \left[(d_o + z) + \left(\frac{L}{2} - d_o\right)\right] \\ \cosh k_x \left(\frac{L}{2} + z\right) &= \cosh k_x \left[(d_o + z) + \left(\frac{L}{2} - d_o\right)\right]. \end{aligned} \quad (3.4.159)$$

Com o novo argumento das funções “sin”, “cos” e “cosh”, aplica-se as relações trigonométricas e hiperbólica da soma dos ângulos, onde cada termo entre parênteses significará um ângulo. Encontrada as novas relações elas irão substituir suas respectivas funções na equação (3.4.159), o que vai gerar a equação:

$$\begin{aligned} u_x^{(2)} &= 2A_2N_2k_x \left\{ \left[-1 - \left(\frac{k_x}{sk_L}\right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \delta_d \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \right] \cos k_L (z + d_o) + \left[\left(\frac{k_x}{sk_L}\right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) + \delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \right] \sin k_L (z + d_o) \right. \\ &\quad \left. + \frac{k_L}{k_x \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right)} \left\{ \left[\left(\frac{k_x}{sk_L}\right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) + \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \cos k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) - \left(\frac{k_x}{sk_L}\right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \right] \cosh k_x (z + d_o) \right. \\ &\quad \left. - \left[\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) + \left(\frac{k_x}{sk_L}\right) \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \sinh^2 k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \cos k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \right] \sinh k_x (z + d_o) \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (3.4.160)$$

A equação (3.4.160) pode ser reescrita de maneira mais simples [2], quando alguns

termos forem redefinidos, e chamados de \bar{d}_1 , \bar{d}_2 e \bar{d}_3 .

$$u_x^{(2)} = -2A_2N_2k_x \left\{ \bar{d}_1 \cos k_L(z + d_o) + \bar{d}_3 \sin k_L(z + d_o) + \frac{1}{s} \left[\bar{d}_2 \cosh k_x(z + d_o) - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x(z + d_o) \right] \right\}, \quad (3.4.161)$$

com,

$$\bar{d}_1 = 1 - \delta_d \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \frac{k_x}{sk_L} \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right), \quad (3.4.162)$$

$$\begin{aligned} \bar{d}_2 = & 1 + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} - \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \\ & - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \delta_d \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right), \end{aligned} \quad (3.4.163)$$

$$\bar{d}_3 = \left(\frac{k_x}{sk_L} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right). \quad (3.4.164)$$

Para finalizar o cálculo da componente x do deslocamento falta o u_x para as interfaces da região 4, ou $-\frac{L}{2} \leq z \leq -d_o$, que pode ser executado de duas maneiras. A primeira é um processo similar ao usado para calcular u_x da região 2. A segunda forma foi justamente a usada. Aproveitando que existe simetria entre a região 2 e 4. Fazendo uma mudança de variáveis da forma $d_o \rightarrow -d_o$ e $\frac{L}{2} \rightarrow -\frac{L}{2}$, obtém-se as relações abaixo:

$$\begin{aligned} \bar{d}_1 & \rightarrow \bar{d}_1 \\ \bar{d}_2 & \rightarrow \bar{d}_2 \\ \bar{d}_3 & \rightarrow -\bar{d}_3 \\ N_2 & \rightarrow N_4 \\ A_2 & \rightarrow A_4. \end{aligned} \quad (3.4.165)$$

Aplicando a mudança, $d_o \rightarrow -d_o$ e $\frac{L}{2} \rightarrow -\frac{L}{2}$ e as relações (3.4.165) na equação (3.4.161), encontra-se $u_x^{(4)}$ para a região 4.

$$u_x^{(4)} = -2A_4N_4k_x \left\{ \bar{d}_1 \cos k_L(z - d_o) - \bar{d}_3 \sin k_L(z - d_o) + \frac{1}{s} \left[\bar{d}_2 \cosh k_x(z - d_o) + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x(z - d_o) \right] \right\}. \quad (3.4.166)$$

3.4.2 Cálculo do u_z

Esta seção tem como objetivo demonstrar o cálculo da componente z do deslocamento, para as interfaces das regiões $d_0 \leq z \leq \frac{L}{2}$ e $-\frac{L}{2} \leq z \leq -d_0$. Começando com u_z na região 4.

$$u_z^{(2)} = k_L \underbrace{(A_2 e^{ik_L z} - B_2 e^{-ik_L z})}_a - k_x \underbrace{(C_2 e^{k_x z} - D_2 e^{-k_x z})}_b. \quad (3.4.167)$$

A princípio os dois termos, denominados de “a” e “b”, que compõem $u_z^{(2)}$ deverão ser calculados. O processo para encontrar “a” é análogo ao efetuado para “p”. Logo,

$$a = 2iN_2 A_2 \left\{ \delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) \right. \quad (3.4.168)$$

$$\left. + \frac{1}{\alpha s} \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cos k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) - \sin(d_o + z) \right\}. \quad (3.4.169)$$

Agora é necessário encontrar o valor de “b”. Lembrando-se das equações (3.4.151) e (3.4.152) encontradas na seção 3.4.1, o passo seguinte é realizar a subtração $C_2 e^{k_x z} - D_2 e^{-k_x z}$, ou seja,

$$b = \frac{\alpha}{2 \sinh k_x \left(d_o - \frac{L}{2} \right)} \left[\underbrace{(A_2 v_2^- - B_2 v_2^+)}_{(3*)} 2 \sinh k_x (d_o + z) \right. \quad (3.4.170)$$

$$\left. - \underbrace{(A_2 v_{d_o}^- - B_2 v_{d_o}^+)}_{(4*)} 2 \sinh k_x \left(\frac{L}{2} + z \right) \right]. \quad (3.4.171)$$

Ao observar a equação (3.4.171) percebe-se que existem dois termos entre parênteses que dependem de A_2 e B_2 que serão denominados de (3*) e (4*). Estes dois termos poderão ser calculados de maneira análoga ao processo feito para encontrar “a”.

$$(3*) = 2iA_2 N_2 \left[\frac{1}{\alpha s} \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right], \quad (3.4.172)$$

$$(4*) = 2iA_2 N_2 \left[\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \frac{1}{\alpha s} \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right], \quad (3.4.173)$$

portanto, o valor de “b” será:

$$b = -2iA_2N_2\alpha \left\{ \sinh k_x (d_o + z) \left[\frac{1}{\alpha s} + \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right] - \sinh k_x \left(\frac{L}{2} + z \right) \left[\cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \frac{\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right] \right\}. \quad (3.4.174)$$

Substituindo os valores de “a” e “b” na equação (3.4.172) uma nova expressão para $u_z^{(2)}$ é determinada, isto é,

$$u_z^{(2)} = -2iA_2N_2 \left\{ k_L \left[\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \times \right. \\ \times \cos k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) - \sin (d_o + z) \left. \right] - k_x \alpha \left[\sinh k_x (d_o + z) \times \right. \\ \left. \left(\frac{1}{\alpha s} + \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right) - \sinh k_x \left(\frac{L}{2} + z \right) \times \right. \\ \left. \left. \left. \left. \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \frac{\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right) \right] \right] \right\}. \quad (3.4.175)$$

A expressão encontrada para u_z é composta com as funções “sin”, “cos” e “sinh”. O argumento destas funções possui o termo $\left(\frac{L}{2} + z\right)$. Lembrando que $d_o = \frac{L}{6}$, observe:

$$\begin{aligned} d_o = \frac{L}{6} &\longrightarrow \frac{L}{2} + z = (d_o + z) + \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \\ \frac{L}{2} = d_o + \frac{L}{3} & \end{aligned} \quad (3.4.176)$$

Tendo em vista a equação (3.4.176), o argumento das funções “sin”, “cos” e “sinh” podem ser rescritos como:

$$\begin{aligned} \sin k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) &= \sin k_L \left[(d_o + z) + \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \\ \cos k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) &= \cos k_L \left[(d_o + z) + \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \\ \sinh k_x \left(\frac{L}{2} + z \right) &= \sinh k_x \left[(d_o + z) + \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \end{aligned} \quad (3.4.177)$$

Ao analisar a equação (3.4.177), percebe-se que os termos entre colchetes contém dois termos entre parênteses que formam uma soma, assim as relações trigonométricas e hiperbólicas das somas dos ângulos poderão ser aplicadas e novas expressões encontradas. Com estas novas expressões substituídas em seus respectivos lugares na equação (3.4.175),

encontra-se a equação:

$$\begin{aligned}
u_z^{(2)} = & -2iA_2N_2 \left\{ k_L \left\{ \left[1 - \delta_d \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \left(\frac{k_x}{sk_L} \right) \times \right. \right. \right. \\
& \times \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \left. \right] \sin k_x (d_o + z) \\
& - \left[\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \left(\frac{k_x}{sk_L} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \times \right. \\
& \times \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \left. \right] \cos k_L (d_o + z) - \left\{ \left(\frac{k_x}{sk_L} \right) \left[1 + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \times \right. \right. \\
& \times \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} - \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \\
& - \left. \left. \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \delta_d \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \times \right. \\
& \times \sinh k_x (d_o + z) - \left[\left(\frac{k_x}{sk_L} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \times \right. \\
& \times \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \left. \right] \cosh k_x (d_o + z) \left. \right\} \left. \right\}. \quad (3.4.178)
\end{aligned}$$

A equação (3.4.178) pode ser reescrita de maneira mais simplificada redefinindo alguns de seus termos [2], ou seja,

$$\begin{aligned}
u_z^{(2)} = & -2iA_2N_2k_L \left\{ \bar{d}_1 \sin k_L (d_o + z) - \bar{d}_3 \cos k_L (d_o + z) \right. \\
& \left. - \frac{k_x}{sk_L} \left[\bar{d}_2 \sinh k_x (d_o + z) - \frac{sk_L}{k_x} \bar{d}_3 \cosh k_x (d_o + z) \right] \right\}, \quad (3.4.179)
\end{aligned}$$

, com,

$$\bar{d}_1 = 1 - \delta_d \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \frac{k_x}{sk_L} \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right), \quad (3.4.180)$$

$$\begin{aligned}
\bar{d}_2 = & 1 + \frac{sk_L}{k_x} \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} - \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \\
& - \frac{sk_L}{k_x} \delta_d \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right), \quad (3.4.181)
\end{aligned}$$

$$\bar{d}_3 = \frac{k_x}{sk_L} \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right). \quad (3.4.182)$$

Uma vez que o valor de u_z para as interfaces contidas na região $d_0 \leq z \leq \frac{L}{2}$ foi encontrado. O próximo passo será calcular o u_z para as interfaces da região $-\frac{L}{2} \leq z \leq$

$-d_o$. Este cálculo é idêntico ao executado na seção 3.4.1 para $u_x^{(4)}$, logo,

$$u_z^{(4)} = -2iA_4N_4k_L \left\{ \bar{d}_1 \sin k_L(z - d_o) + \bar{d}_3 \cos k_L(z - d_o) - \frac{k_x}{sk_L} \left[\bar{d}_2 \sinh k_x(z - d_o) + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \cosh k_x(z - d_o) \right] \right\}. \quad (3.4.183)$$

3.5 Campo Elétrico

O campo elétrico em um ponto é uma grandeza vetorial. Neste caso como o estudo é realizado em semicondutores de baixa dimensionalidade, ou seja, uma das dimensões é muito menor do que as outras, isto é um caso bidimensional. Como definido desde o início as coordenadas retangulares que compõe o sistema serão, x e z . Logo,

$$\mathbf{E} = (E_x, 0, E_z), \quad (3.5.184)$$

as componentes do campo para as interfaces contidas nas regiões $d_o \leq z \leq \frac{L}{2}$ e $-\frac{L}{2} \leq z \leq -d_o$ serão calculadas a partir das seguintes definições:

$$E_x = -\rho_o [u_L^x - su_{IP}^x], \quad E_z = -\rho_o [u_L^z(z) - su_{IP}^z]. \quad (3.5.185)$$

O campo elétrico na região 3 ou $|z| \leq d_o$, é dado por:

$$\mathbf{E} = [(C_3e^{k_x z} + D_3e^{-k_x z}), 0, -ik_x (C_3e^{k_x z} - D_3e^{-k_x z})] e^{i(k_x z - \omega t)}. \quad (3.5.186)$$

3.5.1 Cálculo do E_x

Nesta seção o objetivo é encontrar as componentes x do campo elétrico para a região 2 e 4, que serão denominadas como $E_x^{(2)}$ e $E_x^{(4)}$ respectivamente. O cálculo para $E_x^{(2)}$ tem início quando a componente x do deslocamento, a equação (3.1.4) é substituída na definição (3.5.185), ou seja,

$$E_x^2 = -\rho_o k_x (A_2 e^{ik_L z} + B_2 e^{-ik_L z}) + i\rho_o sk_x (C_2 e^{k_x z} + D_2 e^{-k_x z}). \quad (3.5.187)$$

Na equação anterior, (3.5.187), a densidade de carga ρ_o é colocada em evidência, deixando assim a equação dividida em dois termos chamados de (γ) e (2γ) , como na seguinte

equação:

$$E_x^2 = -\rho_o \left\{ \underbrace{\left[k_x (A_2 e^{ik_L z} + B_2 e^{-ik_L z}) \right]}_{(\gamma)} - s \underbrace{\left[ik_x (C_2 e^{k_x z} + D_2 e^{-k_x z}) \right]}_{(2\gamma)} \right\}. \quad (3.5.188)$$

Próximo passo será encontrar o valor de (γ) e (2γ) . Os termos $(C_2 e^{k_x z} + D_2 e^{-k_x z})$ e $(A_2 e^{ik_L z} + B_2 e^{-ik_L z})$, foram resolvidos na seção 3.4.1, logo,

$$\begin{aligned} (\gamma) = & 2A_2 N_2 k_L \left\{ \delta_d \cos k_L \left(z + \frac{L}{2} \right) - \cos k_L (d_o + z) \right. \\ & \left. - \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) \right\}, \end{aligned} \quad (3.5.189)$$

$$\begin{aligned} (2\gamma) = & \frac{2A_2 N_2 \alpha s k_L}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \left\{ \cosh k_x (d_o + z) \left[\left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] - \cosh k_x \left(\frac{L}{2} + z \right) \left[\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.5.190)$$

O passo seguinte será substituir as equações (3.5.189) e (3.5.190) na equação (3.5.188).

$$\begin{aligned} E_x^{(2)} = & -2\rho_o A_2 N_2 k_x \left\{ \delta_d \cos k_L \left(z + \frac{L}{2} \right) - \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \times \right. \\ & \times \sin k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) - \cos k_L (d_o + z) - \cosh k_x (d_o + z) - (\alpha s) \times \\ & \times \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \cosh k_x (d_o + z) + (\alpha s \delta_d) \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \times \\ & \left. \times \cosh k_x \left(\frac{L}{2} + z \right) + \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cosh k_x \left(\frac{L}{2} + z \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.5.191)$$

Ao observar a (3.5.191) percebe-se que existe muita semelhança com a equação (3.4.157). Efetuado o procedimento como feito na equação (3.4.157) obtém-se:

$$\begin{aligned} E_x^{(2)} = & 2\rho_o A_2 N_2 k_x \left\{ \bar{d}_1 \cos k_L (z + d_o) + \bar{d}_3 \sin k_L (z + d_o) \right. \\ & \left. + \bar{d}_2 \cosh k_x (z + d_o) - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x (z + d_o) \right\}. \end{aligned} \quad (3.5.192)$$

Para finalizar a expressão de $E_x^{(4)}$ será calculada. Este campo é representado pela

definição (3.5.185) quando a equação (3.1.6) for substituída, ou seja,

$$E_x^4 = -\rho_o k_x (A_4 e^{ik_L z} + B_4 e^{-ik_L z}) + i\rho_o s k_x (C_4 e^{k_x z} + D_4 e^{-k_x z}). \quad (3.5.193)$$

Como feito anteriormente, a principio ρ_o será colocado em evidência. E mais uma vez dois termos são formados, e denominados de (3γ) e (4γ) como mostrado na equação abaixo:

$$E_x^4 = -\rho_o \left\{ \underbrace{\left[k_x (A_4 e^{ik_L z} + B_4 e^{-ik_L z}) \right]}_{(3\gamma)} - s \underbrace{\left[ik_x (C_4 e^{k_x z} + D_4 e^{-k_x z}) \right]}_{(4\gamma)} \right\}, \quad (3.5.194)$$

Agora é necessário encontrar o valor de (3γ) e (4γ) . Inicialmente será realizado o cálculo para (3γ) , no qual as definições (3.2.7) e (3.3.69) serão de fundamental importância. O processo a ser executado será semelhante ao utilizado no cálculo de “a” da equação (3.3.74), logo,

$$(3\gamma) = 2A_4 N_4 k_x \left\{ \delta_d \cos k_L \left(z - \frac{L}{2} \right) - \cos k_L (d_o - z) + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - z \right) \right\}, \quad (3.5.195)$$

para obter (4γ) , multiplica-se as equações (3.3.67) e (3.3.68) por $e^{k_x z}$ e $e^{-k_x z}$ respectivamente, proporcionando os seguintes resultados:

$$C_4 e^{k_x z} = \frac{\alpha}{2 \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \left[(A_4 v_2^+ - B_4 v_2^-) e^{k_x (z-d_o)} - (A_4 v_{d_o}^+ - B_4 v_{d_o}^-) e^{k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right], \quad (3.5.196)$$

$$D_4 e^{-k_x z} = \frac{\alpha}{2 \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \left[(A_4 v_2^+ - B_4 v_2^-) e^{-k_x (z-d_o)} - (A_4 v_2^+ - B_4 v_2^-) e^{-k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right]. \quad (3.5.197)$$

Somando as equações (3.5.196) e (3.5.197), depois multiplica-se o resultado por ik_x , obtém-se a seguinte equação:

$$(4\gamma) = \frac{i\alpha k_x}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \left\{ \underbrace{(A_4 v_2^+ - B_4 v_2^-) \cosh k_x (z - d_o)}_{(1)} - \underbrace{(A_4 v_{d_o}^+ - B_4 v_{d_o}^-) \cosh k_x \left(z - \frac{L}{2} \right)}_{(2)} \right\}. \quad (3.5.198)$$

A expressão de (4 γ) possui dois termos denominados de (1) e (2). Estes termos foram calculados na seção 3.3, as equações (3.3.104) e (3.3.105), logo,

$$(1) = -2iA_4N_4 \left[\left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(z - \frac{L}{2} \right) + \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right], \quad (3.5.199)$$

$$(2) = -2iA_4N_4 \left[\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(z - \frac{L}{2} \right) \right. \\ \left. \times \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right], \quad (3.5.200)$$

substituindo as equações de (1) e (2) em (3.5.198), encontra-se o seguinte resultado:

$$(4\gamma) = 2A_4N_4\alpha k_x \left\{ \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \cosh k_x (z - d_o) + \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \times \right. \\ \left. \times \cosh k_x (z - d_o) - \delta_d \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \cosh k_x \left(z - \frac{L}{2} \right) \right. \\ \left. - \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cosh k_x \left(z - \frac{L}{2} \right) \right\}. \quad (3.5.201)$$

Agora que os valores de (3 γ) e (4 γ) são conhecidos, substituindo-os na equação (3.5.198) uma solução para $E_x^{(4)}$ será encontrada.

$$E_x^{(4)} = -2A_4N_4k_x\rho_o \left\{ \delta_d \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \times \right. \\ \left. \sin k_x \left(z - \frac{L}{2} \right) - \cos k_L (z - d_o) - \cosh k_x (z - d_o) - (\alpha s) \times \right. \\ \left. \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \cosh k_x (z - d_o) + (\alpha s \delta_d) \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \times \right. \\ \left. \times \cosh k_x \left(z - \frac{L}{2} \right) + \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cosh k_x \left(z - \frac{L}{2} \right) \right\}, \quad (3.5.202)$$

com a intenção de simplificar a expressão (3.5.202), e deixá-la de uma maneira mais prática de analisar e de manipular futuramente, usa-se:

$$\frac{d_o = \frac{L}{6}}{\frac{L}{2} = d_o + \frac{L}{3}} \longrightarrow \left(z - \frac{L}{2} \right) = (z - d_o) + \left(\frac{L}{2} - d_o \right), \quad (3.5.203)$$

a expressão (3.5.203) será usada nas funções “sin”, “cos” e “cosh” que possuem o argu-

mento igual a $(z - \frac{L}{2})$, ou seja,

$$\begin{aligned}\sin k_L \left(z - \frac{L}{2} \right) &= \sin k_L \left[(z - d_o) - \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \\ \cos k_L \left(z - \frac{L}{2} \right) &= \cos k_L \left[(z - d_o) - \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \\ \cosh k_x \left(z - \frac{L}{2} \right) &= \cosh k_x \left[(z - d_o) - \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right].\end{aligned}\quad (3.5.204)$$

Nos novos argumentos encontrados em (3.5.204) existe uma subtração de dois termos, então para finalizar as relações trigonométricas e hiperbólicas da diferença dos ângulos serão utilizadas. As expressões encontradas serão substituídas na equação (3.5.202), portanto,

$$\begin{aligned}E_x^{(4)} &= -2\rho_o A_4 N_4 k_x \left\{ \left[-1 + \delta_d \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) - \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \times \right. \right. \\ &\quad \times \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \left. \right] \cos k_L (z - d_o) \\ &\quad \left[+\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \times \right. \\ &\quad \times \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \left. \right] \sin k_L (z - d_o) + \left(\frac{k_x}{k_L} \right) \left\{ \left[-1 \right. \right. \\ &\quad - \left(\alpha s \right) \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} + \left(\alpha s \delta_d \right) \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \times \\ &\quad \times \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \left. \right] \times \\ &\quad \times \cosh k_x (z - d_o) + \left[-(\alpha s \delta_d) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right. \\ &\quad \left. - \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \sinh k_x (z - d_o) \left. \right\},\end{aligned}\quad (3.5.205)$$

da mesma forma que foi feito no cálculo de $u_x^{(4)}$, a equação de $E_x^{(4)}$ pode ser redefinida como:

$$\begin{aligned}E_x^{(4)} &= 2\rho_o A_4 N_4 k_x \left\{ \bar{d}_1 \cos k_L (z - d_o) - \bar{d}_3 \sin k_L (z - d_o) \right. \\ &\quad \left. + \bar{d}_2 \cosh k_x (z - d_o) + \left(\frac{s k_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x (z - d_o) \right\}.\end{aligned}\quad (3.5.206)$$

3.5.2 Cálculo do E_z

Na seção anterior foi calculado a componente x do Campo Elétrico para as regiões $d_o \leq z \leq \frac{L}{2}$ e $-\frac{L}{2} \leq z \leq -d_o$. Considerando estas mesmas regiões aqui será efetuado o cálculo da componente z , ou seja, $E_z^{(2)}$ e $E_z^{(4)}$.

A expressão de $E_z^{(2)}$ é proveniente da definição dada pela definição (3.5.185) quando, a equação (3.1.4) for substituída.

$$E_z^2 = -\rho_o k_L (A_2 e^{ik_L z} - B_2 e^{-ik_L z}) + \rho_o s k_x (C_2 e^{k_x z} - D_2 e^{-k_x z}). \quad (3.5.207)$$

A partir daqui o processo executado é análogo ao efetuado para encontrar E_x na seção 3.5.1. Primeiro $-\rho_o$ é posto em evidência, logo,

$$E_z^2 = -\rho_o \left\{ \underbrace{[k_L (A_2 e^{ik_L z} - B_2 e^{-ik_L z})]}_{(5\gamma)} - s \underbrace{[k_x (C_2 e^{k_x z} - D_2 e^{-k_x z})]}_{(6\gamma)} \right\}, \quad (3.5.208)$$

a equação (3.5.208) possui dois termos que foram denominados de (5 γ) e (6 γ). Os termos $(A_2 e^{ik_L z} - B_2 e^{-ik_L z})$ e $(C_2 e^{k_x z} - D_2 e^{-k_x z})$ foram calculados na seção 3.4.2, ao multiplicá-los por k_x e $s k_L$, respectivamente, encontra-se os valores de (5 γ) e (6 γ).

$$(5\gamma) = 2i N_2 A_2 k_L \left\{ \delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cos k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) - \sin (d_o + z) \right\}, \quad (3.5.209)$$

$$(6\gamma) = -2i A_2 N_2 k_L \alpha s \left\{ \sinh k_x (d_o + z) \left[\frac{1}{\alpha s} + \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right] - \sinh k_x \left(\frac{L}{2} + z \right) \left[\cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \frac{\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right] \right\}, \quad (3.5.210)$$

com os valores de (5 γ) e (6 γ) já conhecidos, substituindo-os em (3.5.208), encontra-se a

equação:

$$\begin{aligned}
E_z^{(2)} = & -2i\rho_o A_2 N_2 k_L \left\{ \left[\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \times \right. \right. \\
& \times \cos k_L \left(\frac{L}{2} + z \right) - \sin (d_o + z) \left. \right] + \left(\frac{k_x}{k_L} \right) \left\{ \sinh k_x (d_o + z) \left[1 \right. \right. \\
& \left. \left. + (\alpha s) \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right] - \sinh k_x \left(\frac{L}{2} + z \right) \times \right. \\
& \left. \left. \times \left[(\alpha s) \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + (\alpha s \delta_d) \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \right] \right\} \right\}. \quad (3.5.211)
\end{aligned}$$

Pode-se reescrever a expressão de $E_z^{(2)}$ deixando-a mais simplificada e mais fácil de manuseá-la. Este procedimento será semelhante ao efetuado na seção 3.4.2 com a equação (3.4.175) e seu resultado será:

$$\begin{aligned}
E_z^2 = & 2i\rho_o A_2 N_2 k_L \left\{ \bar{d}_1 \sin k_L (z + d_o) - \bar{d}_3 \cos k_L (z + d_o) \right. \\
& \left. + \left(\frac{k_x}{k_L} \right) \left[\bar{d}_2 \sinh k_x (z + d_o) - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \cosh k_x (z + d_o) \right] \right\}. \quad (3.5.212)
\end{aligned}$$

Como no cálculo de $E_z^{(2)}$, ao substituir u_L^z e u_{IF}^z , neste caso a equação (3.1.6), em (3.5.185) encontra-se uma expressão para $E_z^{(4)}$, ou seja,

$$E_z^4 = -\rho_o k_L (A_4 e^{ik_L z} - B_4 e^{-ik_L z}) + \rho_o s k_x (C_4 e^{k_x z} - D_4 e^{-k_x z}), \quad (3.5.213)$$

Para encontrar a equação de $E_z^{(4)}$ usa-se o mesmo processo que foi usado para calcular as outras componentes do Campo. Primeiro $-\rho_o$ será posto em evidência, o que ocasionará na subtração de dois termos que serão denominados de (7 γ) e (8 γ).

$$E_z^4 = -\rho_o \left\{ \underbrace{k_L (A_4 e^{ik_L z} - B_4 e^{-ik_L z})}_{(7\gamma)} - s \underbrace{[k_x (C_4 e^{k_x z} - D_4 e^{-k_x z})]}_{(8\gamma)} \right\}, \quad (3.5.214)$$

O próximo passo será encontrar os valores de (7 γ) e (8 γ), a partir das definições (3.2.7) e (3.3.69). O processo executado será parecido com o usado para calcular o termo “a” da equação (3.3.74). Ao fim deste processo encontra-se a equação:

$$\begin{aligned}
(7\gamma) = & 2iA_4 N_4 k_L \left\{ \delta_d \sin k_L \left(z - \frac{L}{2} \right) - \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sin k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \times \right. \\
& \left. \times \cos k_L \left(z - \frac{L}{2} \right) - \sin k_L (z - d_o) \right\}, \quad (3.5.215)
\end{aligned}$$

com as equações (3.5.196) e (3.5.197) encontra-se $C_4 e^{k_x z} - D_4 e^{-k_x z}$. Multiplicando este

resultado por k_x a seguinte expressão será encontrada:

$$(8\gamma) = -\frac{\alpha k_x}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right)} \left\{ \underbrace{(A_4 v_2^+ - B_4 v_2^-)}_{(3)} \sinh k_x (z - d_o) - \underbrace{(A_4 v_{d_o}^+ - B_4 v_{d_o}^-)}_{(4)} \sinh k_x \left(z - \frac{L}{2}\right) \right\}. \quad (3.5.216)$$

A equação (3.5.216) depende de dois termos que foram denominados como (3) e (4). Estes termos possuem os mesmos valores de (1) e (2), equações (3.5.199) e (3.5.200), respectivamente. Substituindo tais valores na equação (3.5.216) chega-se na expressão:

$$(8\gamma) = 2iA_4N_4k_x \left\{ \left(\frac{1}{\alpha s}\right) \sinh k_x (z - d_o) + \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right)} \times \sinh k_x (z - d_o) - \delta_d \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right)} \sinh k_x \left(z - \frac{L}{2}\right) + \left(\frac{1}{\alpha s}\right) \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \sinh k_x \left(z - \frac{L}{2}\right) \right\}. \quad (3.5.217)$$

A componente $E_z^{(4)}$ será calculada quando (3.5.215) e (3.5.217) forem substituídas na equação (3.5.214).

$$E_z^{(4)} = 2i\rho_o A_4 N_4 k_L \left\{ -\delta_d \sin k_L \left(z - \frac{L}{2}\right) + \sin k_L (z - d_o) + \left(\frac{1}{\alpha s}\right) \times \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \cos k_L \left(z - \frac{L}{2}\right) + \left(\frac{k_x}{k_L}\right) [\sinh k_x (z - d_o) + \alpha s \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right)} \sinh k_x (z - d_o) + \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right) \times \sinh k_x \left(z - \frac{L}{2}\right) + \alpha s \delta_d \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o\right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o\right)} \sinh k_x \left(z - \frac{L}{2}\right) \right\} \quad (3.5.218)$$

Com a intenção de simplificar a expressão encontrada para $E_z^{(4)}$, alguns termos serão reescritos. De acordo com a expressão:

$$\frac{d_o}{2} = \frac{L}{6} \quad \longrightarrow \quad \left(z - \frac{L}{2}\right) = (z - d_o) - \left(\frac{L}{2} - d_o\right), \quad (3.5.219)$$

usando a expressão (3.5.219) nas funções “sin”, “cos” e “sinh” que possuírem no argu-

mento um termo igual a $(z - \frac{L}{2})$, encontra-se:

$$\begin{aligned} \sin k_L \left(z - \frac{L}{2} \right) &= \sin k_L \left[(z - d_o) - \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \\ \cos k_L \left(z - \frac{L}{2} \right) &= \cos k_L \left[(z - d_o) - \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \\ \sinh k_x \left(z - \frac{L}{2} \right) &= \sinh k_x \left[(z - d_o) - \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.5.220)$$

Analisando os novos argumentos das funções “sin”, “cos” e “sinh” obtidos na equação (3.5.220), percebe-se que há uma subtração entre dois termos, portanto, aplica-se as relações trigonométricas e hiperbólicas da diferença dos ângulos. Novas expressões serão encontradas e substituídas na equação (3.5.218) e dará origem a equação:

$$\begin{aligned} E_z^{(4)} &= 2i\rho_o A_4 N_4 k_L \left\{ \left[1 - \delta_d \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \times \right. \right. \\ &\quad \times \left. \left. \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \sin k_L (z - d_o) \right. \\ &\quad + \left[\delta_d \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) + \left(\frac{1}{\alpha s} \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \times \right. \\ &\quad \times \left. \left. \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \cos k_L (z - d_o) + \left(\frac{k_x}{k_L} \right) \left\{ \left[1 \right. \right. \right. \\ &\quad + \left(\alpha s \right) \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} - \left(\alpha s \delta_d \right) \frac{\sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right)}{\sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right)} \times \\ &\quad \times \left. \left. \left. \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) - \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \cosh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \times \right. \right. \\ &\quad \times \left. \left. \left. \sinh k_x (z - d_o) + \left[(\alpha s \delta_d) \sin k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + \cos k_L \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \sinh k_x \left(\frac{L}{2} - d_o \right) \right] \cosh k_x (z - d_o) \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (3.5.221)$$

A equação (3.5.221) pode ser reescrita simplificadamente como foi feito no cálculo das outras componentes do Campo e dos Deslocamentos, ou seja,

$$\begin{aligned} E_z^4 &= 2i\rho_o A_4 N_4 k_L \left\{ \bar{d}_1 \sin k_L (z - d_o) + \bar{d}_3 \cos k_L (z - d_o) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{k_x}{k_L} \right) \left[\bar{d}_2 \sinh k_x (z - d_o) + \left(\frac{s k_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \cosh k_x (z - d_o) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.5.222)$$

3.5.3 Campo elétrico na região (3)

Como dito no capítulo 3 a barreira compreendida na região $|z| \leq d_o$ possui somente Campo Elétrico, uma vez que $u = 0$. Tal Campo é descrito através da equação (3.5.186), e suas componentes são:

$$E_x = k_x (C_3 e^{k_x z} + D_3 e^{-k_x z}), \quad (3.5.223)$$

$$E_z = -ik_x (C_3 e^{k_x z} - D_3 e^{-k_x z}). \quad (3.5.224)$$

Agora usando algumas das relações encontradas na seção 3.3 outras expressões para o campo serão calculadas. Aplicando os resultados da equação (3.3.134) na (3.3.80) duas novas relações serão obtidas:

$$L_2 = L_4 \longrightarrow C_3 = D_3, \quad (3.5.225)$$

$$L_2 = -L_4 \longrightarrow C_3 = -D_3. \quad (3.5.226)$$

ou seja, para $C_3 = D_3$:

$$E_x = 2k_x C_3 \cosh(k_x z), \quad (3.5.227)$$

$$E_z = 2ik_x C_3 \sinh(k_x z), \quad (3.5.228)$$

e quando $C_3 = -D_3$:

$$E_x = 2k_x C_3 \sinh(k_x z), \quad (3.5.229)$$

$$E_z = 2ik_x C_3 \cosh(k_x z). \quad (3.5.230)$$

3.6 Potencial elétrico

Com os campos elétricos para as regiões $d_o \leq |z| \leq \frac{L}{2}$ e $|z| \leq d_o$ conhecidos, o potencial poderá ser calculado, de acordo com as equações:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi, \quad \text{ou} \quad \phi = -\int \mathbf{E} d\mathbf{r}, \quad (3.6.231)$$

o campo \mathbf{E} e a posição \mathbf{r} são grandezas vetoriais, ou seja,

$$\mathbf{E} = (E_x, 0, E_z), \quad \mathbf{r} = (x, 0, z), \quad (3.6.232)$$

logo,

$$\phi = -\int E_x dx \quad \text{e} \quad \phi = -\int E_z dz \quad (3.6.233)$$

3.6.1 Cálculo do Potencial na região $d_o \leq z \leq \frac{L}{2}$

Antes de começar calcular os potenciais é necessário reescrever as componentes do campo na região em questão considerando a parte temporal. Tanto a expressão do campo, quanto a do deslocamento tem esse termo dependente do tempo, como foi mostrado no capítulo 2. Nos cálculos que serão efetuados a partir daqui esse termo influenciará nos resultados.

$$E_x^{(2)} = 2\rho_o A_2 N_2 k_x \left\{ \bar{d}_1 \cos k_L (z + d_o) + \bar{d}_3 \sin k_L (z + d_o) + \bar{d}_2 \cosh k_x (z + d_o) - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x (z + d_o) \right\} e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (3.6.234)$$

$$E_z^{(2)} = 2i\rho_o A_2 N_2 k_L \left\{ \bar{d}_1 \sin k_L (z + d_o) - \bar{d}_3 \cos k_L (z + d_o) + \left(\frac{k_x}{k_L} \right) \times \left[\bar{d}_2 \sinh k_x (z + d_o) - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \cosh k_x (z + d_o) \right] \right\} e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (3.6.235)$$

Próximo passo será resolver as integrais da equação (3.6.233), começando com a integral em x . Para manusear facilmente a expressão de E_x deve ser reescrita como na equação:

$$E_x^{(2)} = E_2 e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (3.6.236)$$

com E_2 igual ao termo entre chaves da expressão (3.6.234) constante no tempo.

$$\int E_2 e^{i(k_x x - \omega t)} dx = \frac{E_2}{ik_x} e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (3.6.237)$$

logo,

$$\int E_x^{(2)} dx = 2i\rho_o A_2 N_2 \left\{ -\bar{d}_1 \cos k_L (z + d_o) - \bar{d}_3 \sin k_L (z + d_o) - \bar{d}_2 \times \cosh k_x (z + d_o) + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x (z + d_o) \right\} e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (3.6.238)$$

O Para resolver a integral em y , aplica-se a regra da soma, ou seja, a integral da soma

é igual a soma das integrais, portanto,

$$\begin{aligned} \int E_z^{(2)} dz &= 2i\rho_o A_2 N_2 k_L \left\{ \bar{d}_1 \int \sin k_L (z + d_o) dz - \bar{d}_3 \times \right. \\ &\quad \times \int \cos k_L (z + d_o) dz + \left(\frac{k_x}{k_L} \right) \left[\bar{d}_2 \int \sinh k_x (z + d_o) dz \right. \\ &\quad \left. \left. - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \int \cosh k_x (z + d_o) dz \right] \right\} e^{i(k_x x - \omega t)}, \end{aligned} \quad (3.6.239)$$

isto é,

$$\begin{aligned} \int E_z^{(2)} dz &= 2i\rho_o A_2 N_2 \left\{ -\bar{d}_1 \cos k_L (z + d_o) - \bar{d}_3 \sin k_L (z + d_o) - \bar{d}_2 \times \right. \\ &\quad \left. \times \cosh k_x (z + d_o) + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x (z + d_o) \right\} e^{i(k_x x - \omega t)}. \end{aligned} \quad (3.6.240)$$

As soluções encontradas para ambas integrais são iguais. Quando forem substituídas na equação (3.6.233), duas expressões matematicamente iguais serão encontradas para o potencial. É importante salientar que cada uma contribui de uma maneira diferente, ou seja, uma x e a outra em z . Assim o potencial será representado por uma das expressões, logo,

$$\begin{aligned} \phi &= -2i\rho_o A_2 N_2 \left\{ -\bar{d}_1 \cos k_L (z + d_o) - \bar{d}_3 \sin k_L (z + d_o) \right. \\ &\quad \left. - \bar{d}_2 \cosh k_x (z + d_o) + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x (z + d_o) \right\} e^{i(k_x x - \omega t)}. \end{aligned} \quad (3.6.241)$$

3.6.2 Cálculo do Potencial na região $-d_o \geq z \geq -\frac{L}{2}$

Com o mesmo princípio que foi usado na seção 3.6.1 o potencial da região $-d_o \geq z \geq -\frac{L}{2}$ será calculado. Primeiro os campos $E_x^{(4)}$ e $E_z^{(4)}$ serão reescritos como nas equações:

$$\begin{aligned} E_x^{(4)} &= 2\rho_o A_4 N_4 k_x \left\{ \bar{d}_1 \cos k_L (z - d_o) - \bar{d}_3 \sin k_L (z - d_o) \right. \\ &\quad \left. + \bar{d}_2 \cosh k_x (z - d_o) + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x (z - d_o) \right\} e^{i(k_x x - \omega t)}, \end{aligned} \quad (3.6.242)$$

$$\begin{aligned} E_z^{(4)} &= 2i\rho_o A_4 N_4 k_L \left\{ \bar{d}_1 \sin k_L (z - d_o) + \bar{d}_3 \cos k_L (z - d_o) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{k_x}{k_L} \right) \left[\bar{d}_2 \sinh k_x (z - d_o) + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \cosh k_x (z - d_o) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.6.243)$$

O cálculo da integral de $E_x^{(4)}$ será feito igual ao efetuado para $E_x^{(2)}$, logo,

$$\int E_x^{(4)} dx = 2i\rho_o A_4 N_4 \left\{ -\bar{d}_1 \cos k_L (z - d_o) + \bar{d}_3 \sin k_L (z - d_o) - \bar{d}_2 \times \right. \\ \left. \times \cosh k_x (z - d_o) - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x (z - d_o) \right\} e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (3.6.244)$$

Próximo passo será resolver a integral de $E_z^{(4)}$, com a mesma regra usada anteriormente para solucionar $E_z^{(2)}$, ou melhor,

$$\int E_z^{(4)} dz = 2i\rho_o A_4 N_4 k_L \left\{ \bar{d}_1 \int \sin k_L (z - d_o) dz + \bar{d}_3 \times \right. \\ \left. \times \int \cos k_L (z - d_o) dz + \left(\frac{k_x}{k_L} \right) \left[\bar{d}_2 \int \sinh k_x (z - d_o) dz \right. \right. \\ \left. \left. + \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \cosh k_x (z - d_o) \right] \right\} e^{i(k_x x - \omega t)} \quad (3.6.245)$$

, conseqüentemente,

$$\int E_z^{(4)} dz = 2i\rho_o A_4 N_4 \left\{ -\bar{d}_1 \cos k_L (z - d_o) + \bar{d}_3 \sin k_L (z - d_o) - \bar{d}_2 \times \right. \\ \left. \times \cosh k_x (z - d_o) - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x (z - d_o) \right\} e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (3.6.246)$$

Do mesmo jeito que na seção anterior as soluções das integrais são iguais, assim,

$$\phi = -2i\rho_o A_4 N_4 \left\{ -\bar{d}_1 \cos k_L (z - d_o) + \bar{d}_3 \sin k_L (z - d_o) \right. \\ \left. - \bar{d}_2 \cosh k_x (z - d_o) - \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x (z - d_o) \right\} e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (3.6.247)$$

3.6.3 Cálculo do Potencial na região $|z| \leq d_o$

A região $|z| \leq d_o$ que foi denominada de 3, possui o campo elétrico da equação (3.5.186). Para calcular o potencial é necessário reescrever as componentes do Campo em questão como:

$$E_x^{(3)} = k_x (C_3 e^{ik_x z} + D_3 e^{-ik_x z}) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (3.6.248)$$

$$E_z^{(3)} = -ik_x (C_3 e^{k_x z} - D_3 e^{-k_x z}) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (3.6.249)$$

Como nas seções anteriores para encontrar o potencial é essencial que as integrais da equação (3.6.249) sejam resolvidas, iniciando com $E_x^{(3)}$.

$$\int E_x^{(3)} dx = k_x (C_3 e^{ik_x z} + D_3 e^{-ik_x z}) \int e^{i(k_x x - \omega t)} dx, \quad (3.6.250)$$

logo,

$$\int E_x dx = i (-C_3 e^{ik_x z} - D_3 e^{-ik_x z}) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (3.6.251)$$

Próximo passo será resolver a integral de E_z , para isso a expressão (3.6.249) é substituída na equação (3.6.233), depois aplica-se a regra da soma dita na seção 3.6.1, assim:

$$\int E_z dz = -ik_x \left(C_3 \int e^{k_x z} dz - D_3 \int e^{-k_x z} dz \right) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (3.6.252)$$

ou seja,

$$\int E_z dz = -i (C_3 e^{ik_x z} + D_3 e^{-ik_x z}) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (3.6.253)$$

Analisando as soluções encontradas para as integrais, como nas seções anteriores elas são iguais. Ou seja, geram duas equações idênticas matematicamente para o Potencial, mais que contribuem de maneira diferente. Assim a expressão que representará o Potencial será:

$$\phi = i (C_3 e^{ik_x z} + D_3 e^{-ik_x z}) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (3.6.254)$$

Voltando nas relações (3.5.225), (3.5.226), duas novas expressões para o potencial serão encontradas:

$$\phi = -2iC_3 \cosh(k_x z) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (3.6.255)$$

$$\phi = -2iC_3 \sinh(k_x z) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (3.6.256)$$

3.7 Relação de Dispersão

A relação de dispersão pode ser encontrada a partir da condição de continuidade do potencial, ou seja, $\frac{1}{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial z}$, entre os meios a serem estudados. O caso que está sendo analisado é entre os meios 4 e 3 e/ou 2 e 3. Como já foi dito os meios 4 e 2 são simétricos e representam o mesmo material, GaAs, assim será necessário considerar apenas uma dessas regiões para o cálculo da relação de dispersão, isto é:

$$\varepsilon(\omega) \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dz} \Big|_{z=-d_o}^{z \leq d_o} = \varepsilon_3 \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dz} \Big|_{z=d_o}^{z \leq d_o}. \quad (3.7.257)$$

Para facilitar, o cálculo será realizado da seguinte forma: Primeiro calcula-se o lado esquerdo da igualdade (3.7.257), depois o lado direito. Por último realiza-se a igualdade. Primeiro realiza-se o quociente $\frac{1}{\phi}$ depois é só fazer $z = -d_o$ deste modo obtém-se:

$$\left. \frac{1}{\phi} \right|_{z=-d_o}^{z \leq d_o} = 2i\rho_o A_2 N_2 (\bar{d}_1 + \bar{d}_2), \quad (3.7.258)$$

o próximo passo é derivar ϕ com relação a z , e na expressão encontrada fazer $z = -d_o$, depois da substituição e simplificações chega-se na equação:

$$\left. \frac{d\phi}{dz} \right|_{z=-d_o}^{z \leq d_o} = -2i\rho_o A_2 N_2 k_L \bar{d}_3 (s-1) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (3.7.259)$$

consequentemente,

$$\varepsilon(\omega) \left. \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dz} \right|_{z=-d_o}^{z \leq d_o} = \varepsilon(\omega) \frac{k_L \bar{d}_3 (1-s)}{\bar{d}_1 + \bar{d}_2}. \quad (3.7.260)$$

O lado esquerdo da igualdade (3.7.257) é referente ao meio 3. O potencial deste meio possui duas expressões as equações (3.6.255) e (3.6.256), ou seja, para $L_2 = L_4$,

$$\left. \frac{d\phi}{dz} \right|_{z=d_o}^{|z| \leq d_o} = 2iC_3 k_x \sinh(k_x d_o) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (3.7.261)$$

$$\left. \frac{1}{\phi} \right|_{z=d_o}^{|z| \leq d_o} = -\frac{1}{2iC_3 \cosh(k_x d_o) e^{i(k_x x - \omega t)}}, \quad (3.7.262)$$

logo,

$$\varepsilon_3 \left. \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dz} \right|_{z=d_o}^{|z| \leq d_o} = -\varepsilon_3 k_x \tanh(k_x d_o) \quad (3.7.263)$$

quando $L_2 = -L_4$,

$$\left. \frac{d\phi}{dz} \right|_{z=d_o}^{|z| \leq d_o} = -2iC_3 k_x \cosh(k_x d_o) e^{i(k_x x - \omega t)}, \quad (3.7.264)$$

$$\left. \frac{1}{\phi} \right|_{z=d_o}^{|z| \leq d_o} = -\frac{1}{2iC_3 \sinh(k_x d_o) e^{i(k_x x - \omega t)}}, \quad (3.7.265)$$

portanto,

$$\varepsilon_3 \left. \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dz} \right|_{z=d_o}^{|z| \leq d_o} = -\varepsilon_3 k_x \coth s(k_x d_o). \quad (3.7.266)$$

Com os resultados encontrados, as equações (3.7.263) e (3.7.266), para o lado direito, resolve-se a igualdade (3.7.257).

$$\varepsilon(\omega) \frac{k_L \bar{d}_3 (1-s)}{\bar{d}_1 + \bar{d}_2} = -\varepsilon_3 k_x \tanh(k_x d_o), \quad (3.7.267)$$

$$\varepsilon(\omega) \frac{k_L \bar{d}_3 (1-s)}{\bar{d}_1 + \bar{d}_2} = -\varepsilon_3 k_x \coth(k_x d_o). \quad (3.7.268)$$

As expressões (3.7.267) e (3.7.268) são as relações de dispersão do modo simétrico (s-mode) e assimétrico (a-mode), respectivamente, quando $L_2 = L_4$ e $L_2 = -L_4$.

3.8 Taxa de Espalhamento

Conhecendo o potencial elétrico, a taxa de espalhamento pode ser calculada. As interações que a compõem pode ser inter-subband, a-mode, e intra-subband, s-mode, como mostrado na figura 3.8.4 [8]-[12]. Esta figura representa as bandas de energia nos três primeiros níveis.

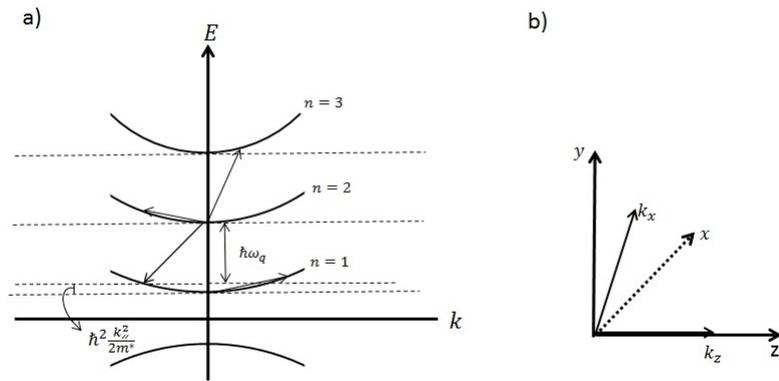


Figura 3.8.4: *Bandas de energias e as interações inter-subband e intra-subband;*

De acordo com a letra “a” da figura 3.8.4 a energia de emissão será dada por:

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m^*} + \hbar\omega_q, \quad (3.8.269)$$

Da letra “b” da figura 3.8.4 obtém-se:

$$\varepsilon_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L^2} n^2, \quad (3.8.270)$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \varepsilon_n. \quad (3.8.271)$$

A taxa de espalhamento é proveniente da Regra Dourada de Fermi e pode ser expressa pela equação:

$$W = \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |\langle f | H_{int} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i), \quad (3.8.272)$$

como o problema em questão tem dependência em k_L e k_x a equação da taxa passa a ser expressa da seguinte forma:

$$W = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{k_L} \sum_{k_x} |\langle f | H_{int} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (3.8.273)$$

Próximo passo será calcular o elemento de matriz, onde $\langle f | = \langle \Psi_f |$ e $| i \rangle = | \Psi_i \rangle$. Ψ_f e Ψ_i são as funções de ondas dos estados final e inicial, respectivamente. Utilizando a aproximação adiabática a função de onda é um produto entre a função de onda eletrônica e função de onda do oscilador harmônico, isto é a equação:

$$\Psi = \psi_{nk}(r)_{q,b} \theta_{q,b}(Q), \quad (3.8.274)$$

logo,

$$\Psi_f = \psi_f(\mathbf{r}) \theta_f(Q) \quad \text{e} \quad \Psi_i = \psi_i(\mathbf{r}) \theta_i(Q) \quad (3.8.275)$$

Usando as funções da equação (3.8.275), o módulo quadrado do elemento de matriz poderá ser escrito como na equação (3.8.276). Por fim as soluções formarão o elemento de matriz original.

$$|\langle \psi_f(\mathbf{r}) \theta_f(Q) | H_{int} | \psi_i(\mathbf{r}) \theta_i(Q) \rangle|^2 = |\langle \psi_f(\mathbf{r}) | H_{int} | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle \langle \theta_f(Q) | \theta_i(Q) \rangle|^2. \quad (3.8.276)$$

Inicialmente o elemento de matriz do Oscilador Harmônico será calculado. Sua expressão poderá ser reescrita como na equação (3.8.277), uma vez que H_{int} é linearmente dependente de Q .

$$\langle \theta_f(Q) | \theta_i(Q) \rangle = \langle \theta_f(Q) | Q | \theta_i(Q) \rangle. \quad (3.8.277)$$

Para solucioná-lo deve-se usar os operadores criação e destruição a^\dagger e a respectivamente [16], além do elemento de matriz do operador a representado pela equação:

$$Q = z = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} (a + a^\dagger), \quad (3.8.278)$$

com,

$$a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} | n+1 \rangle, \quad (3.8.279)$$

$$a | n \rangle = \sqrt{n} | n-1 \rangle, \quad (3.8.280)$$

reescrevendo o elemento de matriz da equação (3.8.277) obtém-se:

$$\langle \theta_f(Q) | Q | \theta_i(Q) \rangle = \langle n' | z | n \rangle. \quad (3.8.281)$$

Para encontrar o elemento de matriz do oscilador é preciso resolver $\langle n' | z | n \rangle$ aplicando a equação (3.8.278) e depois os operadores a e a^\dagger . Ao final das operações algébricas

encontra-se a solução, a equação (3.8.282) que possui uma dependência linear das coordenadas normais do H_{int} , que é representado por Q , o que implica na dispersão de um elétron na rede que é acompanhada da emissão e absorção de um fônon,

$$\langle \theta_f(Q) | Q | \theta_i(Q) \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_q}} \left[(n(\omega_q))^{1/2} \delta_{n',n-1} + (n(\omega_q) + 1)^{1/2} \delta_{n',n+1} \right]. \quad (3.8.282)$$

Agora falta calcular o outro elemento de matriz do oscilador. O primeiro passo é aplicar a relação de completudeza, dada pela expressão: $\mathbb{1} = |\psi_i(\mathbf{r})\rangle \langle \psi_f(\mathbf{r})|$, em $\langle \psi_f(\mathbf{r}) | H_{int} | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle$, ou seja,

$$\begin{aligned} \langle \psi_f(\mathbf{r}) | H_{int} | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle &= \langle \psi_f(\mathbf{r}) | H_{int} \mathbb{1} | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle \\ &= \langle \psi_f(\mathbf{r}) | H_{int} | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_f(\mathbf{r}) | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle, \end{aligned} \quad (3.8.283)$$

com,

$$| \psi_f \rangle = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \cos \left(\frac{\pi z}{L} \right) e^{ik_{//}^{(f)} x} \quad (3.8.284)$$

$$| \psi_i \rangle = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \sin \left(\frac{2\pi z}{L} \right). \quad (3.8.285)$$

Para resolver (3.8.283) é necessário passar para a forma integral, observe a seguinte equação:

$$\langle \psi_f(\mathbf{r}) | H_{int} | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_f(\mathbf{r}) | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle = \int \psi_f^* H_{int} \psi_i d\mathbf{r} \int \psi_f^* \psi_i d\mathbf{r}, \quad (3.8.286)$$

como $\int \psi_f^* \psi_i d\mathbf{r} = I(k, k')$ e acrescentando o termo de normalização $\frac{1}{\sqrt{N}}$ obtém-se:

$$\langle \psi_f(\mathbf{r}) | H_{int} | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_f(\mathbf{r}) | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} I(k, k') \int \psi_f^* H_{int} \psi_i d\mathbf{r}. \quad (3.8.287)$$

Como dito antes o termo H_{int} é o Hamiltoniano de Forlich, que é dado pela equação (3.8.287), ou seja é a relação entre um elétron de carga $-|e|$ e o potencial macroscópico, isto é:

$$H_{int} = e\phi(z), \quad (3.8.288)$$

O potencial $\phi(z)$, representa todos os potenciais encontrados na seção 3.6, com $\varphi(z)$ sendo apenas a parte dependente de z .

$$\phi(z) = \varphi(z) e^{i(k_x x - \omega t)}. \quad (3.8.289)$$

Por fim o potencial será escrito como na equação (3.8.290). O que significa que a parte temporal será incluída no termo $\delta(E_f - E_i)$. Isto acontece por se tratar de um caso

estacionário, logo, ao integrar $e^{-i\omega t}$ com o tempo indo para ∞ a resposta encontrada será uma δ da variação de energia. A regra dourada de Fermi parte do princípio que em um caso estacionário a dependência temporal é indireta, ou seja, está dentro da função delta, $\delta(E_f - E_i)$.

$$H_{int} = e\varphi(z) e^{ik_x x}. \quad (3.8.290)$$

O próximo passo para resolver as integrais da equação (3.8.287), é substituir os termos H_{int} , ψ_f e ψ_i por seus respectivos valores.

$$\begin{aligned} \langle \psi_f(\mathbf{r}) | H_{int} | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} I(k, k') \int_{cell} \left\{ \left[\frac{1}{2\pi} \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \times \right. \right. \\ &\quad \times \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) e^{-ik_{//}^{(f)} x} \left. \right] e\varphi(z) e^{ik_x x} \times \\ &\quad \times \left. \left[\frac{1}{2\pi} \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{2\pi z}{L}\right) \right] \right\} d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (3.8.291)$$

O estudo aqui realizado é em um caso bidimensional, ou seja, $d\mathbf{r}$ será um elemento de área, $d\mathbf{r} = dx dz$. Assim a equação (3.8.291) poderá ser reescrita como:

$$\begin{aligned} \langle \psi_f(\mathbf{r}) | H_{int} | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle &= \frac{e}{\sqrt{N}} \frac{1}{\pi L} I(k, k') \int_{-L/2}^{L/2} \left(\cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi z}{L}\right) \times \right. \\ &\quad \times \varphi(z) \left. \right) dz \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{(-ik_{//}^{(f)} x + ik_x x)} dx, \end{aligned} \quad (3.8.292)$$

com, a integral em z renomeada a expressão será simplificada e se tornará mais genérica, e aplicável a qualquer potencial que poderá ser objeto de estudo futuramente. Para a situação em questão será resolvida posteriormente.

$$\int_{-L/2}^{L/2} \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) \sin\left(\frac{2\pi z}{L}\right) \varphi(z) dz = \tilde{C}_q, \quad (3.8.293)$$

a integral em x possui uma solução tabelada dada pela equação:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{(-ik_{//}^{(f)} x + ik_x x)} dx = \delta_{k_{//}, q}, \quad \text{com, } k_x = q. \quad (3.8.294)$$

Com as equações (3.8.293) e (3.8.294) sendo substituídas em (3.8.292) a expressão para o elemento de matriz do poço potencial será:

$$\langle \psi_f(\mathbf{r}) | H_{int} | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle = \frac{e}{\sqrt{N}} \frac{1}{\pi L} I(k, k') \tilde{C}_q \delta_{k_{//}, q}, \quad (3.8.295)$$

substituindo (3.8.282) e (3.8.295) em (3.8.276) a expressão para $|\langle f | H_{int} | i \rangle|^2$ será obtida:

$$\begin{aligned} |\langle f | H_{int} | i \rangle|^2 &= \frac{\hbar}{2M\omega_q} \frac{1}{N} \left(\frac{e}{\pi L} \right)^2 \left(\tilde{C}_q I(k, k') \right)^2 \delta_{k//,q} \times \\ &\times \left[(n(\omega_q))^{1/2} \delta_{n',n-1} + (n(\omega_q) + 1)^{1/2} \delta_{n',n+1} \right]^2, \end{aligned} \quad (3.8.296)$$

o passo seguinte é analisar as funções deltas do termo entre colchetes. Observe as equações abaixo,

$$n' = n - 1 \implies \begin{cases} \delta_{n',n-1} = 1 \\ \delta_{n',n+1} = 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad n' = n + 1 \implies \begin{cases} \delta_{n',n-1} = 0 \\ \delta_{n',n+1} = 1 \end{cases}$$

ou seja, para $n' = n - 1$ o termo entre colchetes será igual a $n(\omega_q)$ isto é acontece emissão de fônons. Quando $n' = n + 1$ o termo entre colchetes será igual a $n(\omega_q + 1)$ o que significa absorção de fônons. A fim de considerar a absorção e a emissão pode-se acrescentar $\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}$, assim o termo entre colchetes ficaria igual a $n(\omega_q) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}$ o que satisfaz as duas soluções possíveis.

Outro fato a se analisar é a integral $I(k, k')$, dada a natureza da interação polar de longo alcance, ou seja, polar óptico ou espalhamento piezoelétrico, são considerados geralmente como eventos intra-subband. Porém, ambos os espalhamentos intra-subband e inter-subband, são possíveis devido a deformação do potencial de interação. Em qualquer um destes casos, pode-se fazer $I(k, k') = 1$ no caso de transição permitida e $I(k, k') \rightarrow 0$ para o caso de uma transição proibida, obtém-se:

$$|\langle f | H_{int} | i \rangle|^2 = \frac{\hbar}{2M\omega_q} \frac{1}{N} \left(\frac{e}{\pi L} \right)^2 \left(\tilde{C}_q \right)^2 \delta_{k//,q} \left[n(\omega_q) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right], \quad (3.8.297)$$

Para simplificar a expressão chama-se o termo $\frac{e}{\pi L} \tilde{C}_q$ de C_q , logo,

$$|\langle f | H_{int} | i \rangle|^2 = \left(\frac{\hbar}{2MN} \right) C_q^2 \left(\frac{n(\omega_q)}{\omega_q} \right) \delta_{k//,q}. \quad (3.8.298)$$

Com o termo $|\langle f | H_{int} | i \rangle|^2$ calculado, substituindo-o na equação (3.8.273) encontra-se a Taxa de Espalhamento.

$$W = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) \sum_{k_L} \sum_q \left(\frac{\hbar}{2MN} \right) C_q^2 \left(\frac{n(\omega_q)}{\omega_q} \right) \delta_{k//,q} \delta(E_f - E_i). \quad (3.8.299)$$

Na equação (3.8.299) há uma delta da variação de energia. Variação esta que é dada pela equação (3.8.269) no início desta seção. Logo a expressão final para a Taxa de

espalhamento será a equação:

$$W = \left(\frac{\pi}{NM} \right) \sum_{k_L} \sum_q C_q^2 \left(\frac{n(\omega_q)}{\omega_q} \right) \delta_{k_{//}, q} \delta \left(\varepsilon_1 + \frac{\hbar^2 k_{//}^2}{2m^*} + \hbar\omega_q - \varepsilon_2 \right), \quad (3.8.300)$$

com,

$$C_q = \frac{e}{\pi L} \tilde{C}_q, \quad \tilde{C}_q = \int_{-L/2}^{L/2} \cos \left(\frac{\pi z}{L} \right) \sin \left(\frac{2\pi z}{L} \right) \varphi(z) dz.$$

Capítulo IV

Análise e Discussão

“ Nenhuma grande descoberta foi feita jamais sem um palpite ousado”.
(Isaac Newton)

O estudo efetuado no capítulo 3, tem como continuação este capítulo. Uma vez que o entendimento a cerca do confinamento de fônons, se dá a partir do cálculo da função de onda, da Relação de Dispersão, do Campo e Potencial Elétrico, por fim Taxa de espalhamento. Neste capítulo discussões dos resultados serão realizadas, com gráficos feitos a partir de das equações encontradas e valores experimentais [8].

4.1 Conclusões

Nas últimas décadas diversas publicações apresentaram estudos de investigações teóricas sobre o confinamento de fônons ópticos para reduzir a taxa de espalhamento com elétrons em poços quânticos. Os fônons ópticos são os principais responsáveis pela limitação, ou redução da mobilidade eletrônica á temperatura ambiente, e portanto qualquer estrutura física que possa alterar as barreiras energéticas devido aos fônons e auxiliar na redução do espalhamento deve ser estudada.

Neste contexto, a possibilidade de construção e utilização de estruturas semicondutoras com o objetivo de reduzir a interação entre os elétrons e fônons ópticos ocupou muitos pesquisadores nas últimas décadas. Os modelos teóricos mais utilizados nestes estudos foram: (i) o modelo DC (dielectric continuum), e (ii) modelo híbrido, HM.

O modelo DC é o mais comum para o estudo de confinamento de fônons. Ele despreza a natureza mecânica dos fônons dos diferentes materiais, ou seja, despreza a presença das interfaces dos materiais, e.g., AlAs-GaAs, e a conexão entre estes fônons é dada

pelo campo eletrostático do meio, neste caso, devido à natureza polar do material. Veja o capítulo 3 para a discussão da interação elétron-fônon. Portanto, as condições de contorno estabelecidas são as usuais dos campos eletromagnéticos, ou seja, os campos E e D têm suas componentes tangencial e normal contínuas, respectivamente. Portanto, neste caso os modos longitudinais ópticos (LO) confinados satisfazem a condição $\varepsilon(\omega) = 0$ que corresponde a um potencial eletrostático nulo na interface, e os modos de interface, com máximos na interface, satisfazem a condição $\nabla^2\Phi = 0$.

O modelo híbrido incorpora a natureza mecânica dos fônons nas interfaces e inclui além das condições de contorno eletromagnéticas, condições sobre os deslocamentos dos fônons nas interfaces. Portanto, se não há sobreposição nas frequências dos materiais, e assim não há deslocamento mecânico, impõem-se condições de contorno de deslocamento nulo nas interfaces, ou seja, $u = 0$. Para que todas essas condições de contorno sejam utilizadas, os modos são hibridizados, ou seja, uma superposição dos modos longitudinais, transversais e de interface. Essa superposição (ver capítulo 3) é possível devido ao caráter linear das equações de movimento para os fônons.

Os resultados teóricos apresentados, no contexto destes modelos, sugerem que uma redução na taxa de espalhamento elétron-fônon num poço quântico pode ser obtida pela inclusão de camadas de materiais diferentes. Desprezando os efeitos da barreira sobre a função de onda eletrônica, estes estudos inseriram, numa perspectiva teórica, monocamadas de InAs num poço do tipo AlAs-GaAs. A representação para as monocamadas era a inclusão de um potencial no interior do poço quântico representado matematicamente por uma função delta de Dirac.

Na maioria dos casos estudados, o modelo DC apresenta um resultado razoável para a taxa total de espalhamento. Entretanto, a relação de dispersão para os modos observados em espalhamento Raman, para longos comprimentos de onda não estão corretos. Esses modos são corretamente previstos e estudados no contexto do modelo híbrido, pois neste caso as condições de contorno mecânica e elétricas são devidamente consideradas.

Neste trabalho abordamos o problema introduzindo uma barreira de dimensão finitas no interior do poço quântico. Para simular o efeito da barreira e comparar com os resultados da literatura, mimetizamos a barreira pela introdução de duas monocamadas, centralmente distribuídas no interior do poço quântico. O interior do poço compreendido pelas monocamadas, ao final foi substituído por um material com a mesma constante dielétrica das barreiras. Assim, o meio compreendido pelas monocamadas comportava-se com um meio único (ver figura 3.1.1).

Esta abordagem, embora mais laborosa, propiciou verificar que os resultados obtidos nos limites ($d_0 \rightarrow 0$) de espessura mínima da barreira reproduz os resultados obtidos com uma monocamada centralmente localizada no poço quântico.

A inserção da barreira finita não alterou substancialmente os modos simétricos, responsáveis pelo espalhamento na mesma subbanda. Sendo assim, a redução na taxa de

espalhamento não deve se alterar significativamente. Por outro lado, os modos antisimétricos apresentaram uma relação de dispersão diferente,

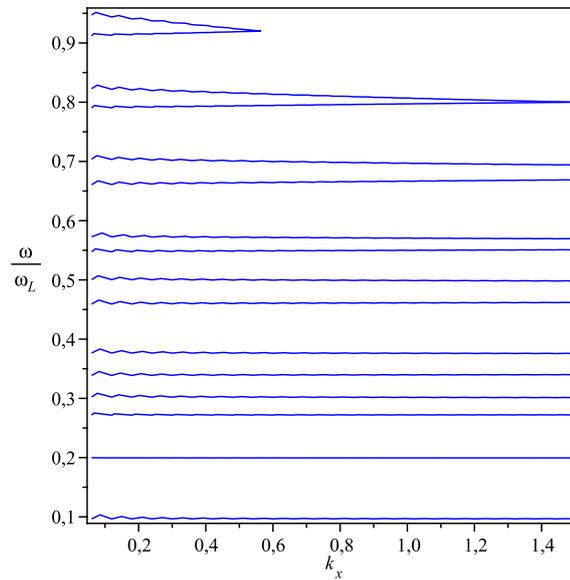


Figura 4.1.1: *Dispersão dos modos simétricos*

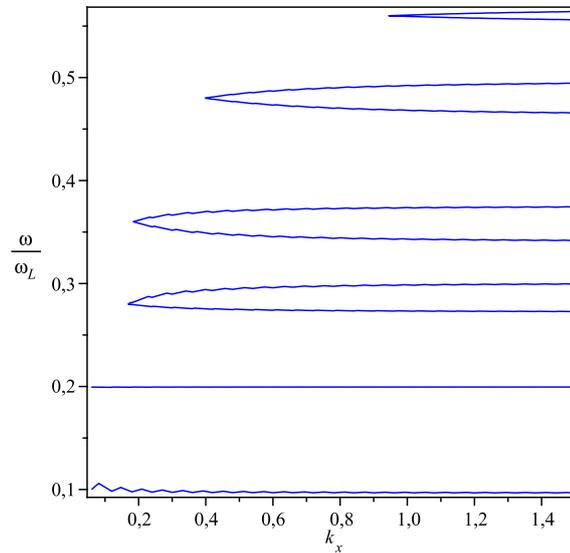


Figura 4.1.2: *Dispersão dos modos antisimétricos*

portanto, pode-se esperar uma alteração na taxa de espalhamento. Entretanto, neste trabalho não procedemos a uma análise mais detalhada do resultado obtido para a taxa de espalhamento. Esta análise deverá ser abordada no futuro. Da mesma forma, o estudo com duas monocamadas pode ser uma abordagem inicial para construir e estudar uma superrede com monocamadas.

Apêndice A

Constante de Normalização

Esta seção tem como objetivo mostrar o cálculo da constante de normalização. Considerando uma função de onda de onda $\psi(x, y, z, t)$ de uma partícula livre, a probabilidade dela ser encontrada na posição (x, y, z) , no instante t , pode ser obtida por meio da equação:

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, y, z, t)|^2 d\mathbf{r}^3. \quad (1.0.1)$$

Como a partícula tem que estar em algum lugar a probabilidade de se encontrar a partícula em qualquer região do espaço, num dado instante de tempo, deve ser igual a 1 como na equação abaixo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, y, z, t)|^2 d\mathbf{r}^3 = 1. \quad (1.0.2)$$

Supondo que a função de onda $\psi(x, y, z, t)$ foi determinada através da equação de Schrödinger. Se $\psi(x, y, z, t)$ é solução, então $A\psi(x, y, z, t)$ também será, desde que a equação (1.0.2) seja satisfeita. Então a constante A deve ser escolhida para garantir que (1.0.2) seja satisfeita. Esse processo será chamado de normalização e A será a constante de normalização.

O problema apresentado neste trabalho possui quatro funções de ondas, que foram calculadas anteriormente no capítulo 3. São elas:

$$u_x = -2 \left\{ \begin{array}{l} A_2 N_2 \\ A_4 N_4 \end{array} \right\} k_x \left\{ \bar{d}_1 \cos k_L (z \pm d_o) \pm \bar{d}_3 \sin k_L (z \pm d_o) \right. \\ \left. + \frac{1}{s} \left[\bar{d}_2 \cosh k_x (z \pm d_o) \mp \left(\frac{sk_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \sinh k_x (z \pm d_o) \right] \right\}, \quad (1.0.3)$$

$$u_z = -2i \left\{ \begin{array}{l} A_2 N_2 \\ A_4 N_4 \end{array} \right\} k_L \left\{ \bar{d}_1 \sin k_L(z \pm d_o) \mp \bar{d}_3 \cos k_L(z \pm d_o) \right. \\ \left. - \frac{k_x}{s k_L} \left[\bar{d}_2 \sinh k_x(z \pm d_o) \mp \left(\frac{s k_L}{k_x} \right) \bar{d}_3 \cosh k_x(z \pm d_o) \right] \right\}, \quad (1.0.4)$$

os sub índices (2) e (4), indicam a região a qual cada uma pertence, observe a figura 3.1.1. Para calcular a constante de normalização usa-se a equação:

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{-d_o} |u_x^{(4)} + u_z^{(4)}|^2 dz + \int_{d_o}^{\frac{L}{2}} |u_x^{(2)} + u_z^{(2)}|^2 dz = 1. \quad (1.0.5)$$

Os intervalos descrevem dois poços quânticos formados após a introdução da barreira de InAs. O Primeiro passo para resolver as integrais da equação (1.0.5) é realizar uma mudança de variável, onde:

$$\begin{array}{l} \varphi = z + d_o, \\ d\varphi = dz \end{array} \quad \text{e} \quad \begin{array}{l} z = \frac{L}{2} \longrightarrow \varphi = \frac{2L}{3} \\ z = d_o \longrightarrow \varphi = \frac{L}{3} \end{array}, \quad (1.0.6)$$

$$\begin{array}{l} \varphi = z - d_o \\ d\varphi = dz \end{array} \quad \text{e} \quad \begin{array}{l} z = -\frac{L}{2} \longrightarrow \varphi = -\frac{2L}{3} \\ z = d_o \longrightarrow \varphi = -\frac{L}{3} \end{array}, \quad (1.0.7)$$

pois, o cálculo ficará mais simples.

As integrais da equação (1.0.5) e as funções de onda assumirão a forma:

$$\int_{-\frac{2L}{3}}^{-\frac{L}{3}} |u_x^{(4)} + u_z^{(4)}|^2 d\varphi + \int_{\frac{L}{3}}^{\frac{2L}{3}} |u_x^{(2)} + u_z^{(2)}|^2 d\varphi = 1, \quad (1.0.8)$$

$$u_x = -2Wk_x \left\{ \bar{d}_1 \cos k_L(\varphi) \pm \bar{d}_3 \sin k_L(\varphi) \right. \\ \left. + \frac{1}{s} [\bar{d}_2 \cosh k_x(\varphi) \mp c \bar{d}_3 \sinh k_x(\varphi)] \right\}, \quad (1.0.9)$$

$$u_z = -2iWk_L \left\{ \bar{d}_1 \sin k_L(\varphi) \mp \bar{d}_3 \cos k_L(\varphi) \right. \\ \left. - [q \bar{d}_2 \sinh k_x(\varphi) \mp \bar{d}_3 \cosh k_x(\varphi)] \right\}, \quad (1.0.10)$$

com,

$$c = \left(\frac{s k_L}{k_x} \right), \quad q = \left(\frac{k_x}{s k_L} \right), \quad A_2 N_2 = A_4 N_4 = W, \quad (1.0.11)$$

como calculado anteriormente existi duas situações: Uma quando $A_2 N_2 = -A_4 N_4$, isto é, para o modo assimétrico. E a segunda no caso do modo simétrico quando $A_2 N_2 = A_4 N_4$. Para calcular a constante de normalização (W) pode-se usar ambos os casos, pois as funções de onda encontram-se em módulo ao quadrado.

$$\begin{aligned}
& \times ck_x^2 + \left(\frac{1}{2}\right) d_2 d_3 k_x^3 (s-1) \sinh\left(\frac{Lk_x}{3}\right) + s \left(\left(-d_1^2 - d_3^2 \right) k_L^2 + \right. \\
& k_x^2 \left(\left(-1 + L \right) d_3^2 - 2d_1^2 \right) \left(k_x^2 + k_L^2 \right) \cos(Lk_L) \left. \right) \sin\left(\frac{Lk_L}{3}\right) + 6 \times \\
& \times \left(k_x^2 + k_L^2 \right) d_2 d_3 \left(2s^2 q k_L^3 + k_x^2 c k_L + k_x^3 c s^2 \right) \cosh\left(\frac{2Lk_x}{3}\right)^2 + \\
& 24 s k_L k_x \left(d_3 \left(\left(\frac{1}{2} \right) s k_L^3 d_1 - \left(\frac{5}{8} \right) s k_L^2 k_x d_2 q + \left(\frac{1}{2} \right) d_2 k_x^2 k_L \times \right. \right. \\
& \times \left(s + 1 \right) + d_1 c k_x^3 \left. \right) \cos\left(\frac{2Lk_L}{3}\right) + k_L \left(\left(d_3^2 k_L^2 s + k_L s k_x d_1 d_2 q - \right. \right. \\
& \left. \left(\frac{1}{2} \right) d_1 k_x^2 \left(d_2 + d_3 \right) \right) \sin\left(\frac{2Lk_L}{3}\right) + \left(\frac{1}{2} \right) k_L^2 s d_1 d_2 \times \\
& \times \cos\left(\frac{Lk_x}{3}\right) \left. \right) \cosh\left(\frac{2Lk_x}{3}\right) - 12 \left(k_x^2 + k_L^2 \right) d_2 d_3 k_L \left(s^2 q \times \right. \\
& k_L^2 + k_x^2 \left. \right) \cosh\left(\frac{Lk_x}{3}\right)^2 - 24 s k_L k_x \left(d_3 \left(\left(\frac{1}{2} \right) s k_L^3 d_1 - \left(\frac{5}{8} \right) \times \right. \right. \\
& \times s k_L^2 k_x d_2 q + \left(\frac{1}{2} \right) d_2 k_L k_x^2 \left(s + 1 \right) + d_1 c k_x^3 \left. \right) \cos\left(\frac{Lk_L}{3}\right) + \\
& \left(\frac{1}{2} \right) s k_L^3 d_1 d_2 \cos\left(\frac{Lk_x}{3}\right) \left. \right) \cosh\left(\frac{Lk_x}{3}\right) - 6 s^2 d_1 d_3 k_L^2 k_x \times \\
& \times \left(k_L^2 + k_x^2 \right) \cos\left(\frac{2Lk_L}{3}\right)^2 + 3 s^2 d_1 d_3 k_x \left(2k_x^2 - k_L^2 \right) \left(k_x^2 + \right. \\
& k_L^2 \left. \right) \cos\left(\frac{2Lk_x}{3}\right) + 6 s^2 d_1 d_3 k_L^2 k_x \left(k_L^2 + k_x^2 \right) \cos\left(\frac{Lk_L}{3}\right)^2 + 24 \times \\
& \times s k_L k_x \sinh\left(\frac{Lk_x}{3}\right) \left(s d_1 d_3 k_L^3 q - d_3^2 k_L^2 k_x s + d_3^2 c k_L k_x^2 + \left(\frac{1}{2} \right) \times \right. \\
& \times d_1 k_x^3 \left(d_2 + d_3 \right) \left. \right) \cos\left(\frac{Lk_L}{3}\right) + \left(3 k_L \left(\left(-\frac{1}{2} \right) s^2 \left(3d_3^2 + d_3^2 q^2 \right) \times \right. \right. \\
& \times k_L^2 + k_x^2 \left(d_3^2 c - \left(\frac{1}{2} \right) d_2^2 \right) \left. \right) \sinh\left(\frac{4Lk_x}{3}\right) + \left(\frac{3}{2} \right) \left(s^2 d_2^2 q^2 k_L^3 + \right. \\
& k_x^2 d_3^2 c^2 k_L + k_x^3 d_2^2 \left. \right) \sin\left(\frac{2Lk_x}{3}\right) + \left(-\frac{3}{2} \right) \left(s^2 d_2^2 q^2 k_L^3 + k_x^2 d_3^2 c^2 \times \right. \\
& \times k_L + k_x^3 d_2^2 \left. \right) \sin\left(\frac{4Lk_x}{3}\right) + 3 k_x^3 d_1 d_3 s^2 \cos\left(\frac{4Lk_L}{3}\right)^2 - 3 s^2 d_1 \times \\
& \times d_3 k_x \left(k_L - k_x \right) \left(k_L + k_x \right) \cos\left(\frac{4Lk_L}{3}\right) + k_L \left(3 s^2 k_L \cos(Lk_x) \times \right. \\
& \times \left(d_1^2 k_L - d_3^2 k_x \right) \sin\left(\frac{Lk_x}{3}\right) + k_x L \left(s^2 \left(-2d_1^2 + d_2^2 q^2 - 2d_3^2 \right) \times \right. \\
& \times k_L^2 + k_x^2 \left(\left(-2s^2 \right) \left(d_1^2 + d_3^2 \right) + c d_3^2 \left(c - 1 \right) \right) \left. \right) \left. \right] \left(k_L^2 + k_x^2 \right) \left. \right\}^{-\frac{1}{2}} \quad (1.0.16)
\end{aligned}$$

Por fim a constante de normalização será encontrada substituindo W nas equações (3.3.140)

e (3.3.146), logo,

$$C_3 = \frac{W \alpha R \bar{d}_3}{\cosh(k_x d_o)} \quad (1.0.17)$$

para o modo assimétrico, e o valor de:

$$C_3 = -\frac{W \alpha R \bar{d}_3}{\sinh(k_x d_o)} \quad (1.0.18)$$

para o modo simétrico.

Referências Bibliográficas

- [1] K. Huang and B.F. Zhu. "Dielectric continuum model and Fröhlich interaction in superlattices." *Physical Review B* **38.18** (1988): 13377.
- [2] Ridley, B. K. "Optical phonons in a quantum well containing monolayers." *Applied physics letters* **66.26** (1995): 3633-3635.
- [3] Ridley, B. K. "Electron-hybridon interaction in a quantum well." *Physical Review B* **47.8** (1993): 4592.
- [4] Ridley, B. K. "Optical mode hybrids in quantum wells, superlattices and slabs." *Physica Scripta* **1993.T49B** (1993): 454.
- [5] B.K. Ridley, O. Al-Dossary, N. C. Constantinou, and M. Babiker. "Continuum model of the optical modes of vibration of an ionic crystal slab." *Physical Review B* **50.16** (1994): 11701.
- [6] Ridley, B. K. "Optical-phonon tunneling." *Physical Review B* **49.24** (1994): 17253.
- [7] Doehler, Gottfried H. "Solid-state superlattices." *scientific American* **249** (1983): 144-151.
- [8] Bennett, C. R., M. A. Amato, N. A. Zakhleiniuk, B. K. Riedley, and M. Babiker. "Effects of a monolayer on the electron-phonon scattering rates in a quantum well: Dielectric continuum versus hybrid model." *Journal of applied physics* **83.3** (1998): 1499-1506.
- [9] Harrison, Paul. *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley & Sons, (2005).
- [10] Yu, Peter Y., and Manuel Cardona. *Fundamentals of semiconductors*. Springer, (2005).
- [11] Ridley, B. K. *Electrons and phonons in semiconductor multilayers*. Vol. 5. Cambridge University Press, (2009).
- [12] Ridley, B. K. "Quantum processes in semiconductors." (1999).

-
- [13] Milan, J. Physics and applications of semiconductor microstructures. Vol. 1. Oxford University Press, USA, (1989).
- [14] Dingle, Raymond. "Confined carrier quantum states in ultrathin semiconductor heterostructures." *Festkörperprobleme 15*. Springer Berlin Heidelberg, (1975). 21-48.
- [15] Davydov, A. S. "Quantum Mechanics, translated, edited and with additions by D. Ter Haar." (1965).
- [16] Sakurai, Jun John, and Jim J. Napolitano. *Modern quantum mechanics*. Pearson Higher Ed, 2014.