Este exemplar corresponde à réclaceos final da Tese defendida pelo aluno Omar de Olmeira Seinis Nelo e aprovida pela Comssao Julgadora. Compenso Paragosto de 1985 Compenso Paragosto de 1985

"CONSIDERAÇÕES SOBRE UM SÓLIDO CRISTALINO SUBMETIDO A UM CAMPO DE LASER INTENSO!"

Omar de Oliviera Diniz Neto

Orientador: Prof.Dr. Carlos Alberto da Silva Lima

Trabalho apresentado ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universid<u>a</u> de Estadual de Campinas, para obte<u>n</u> ção do grau de Mestre em Ciências.

- agosto 85 -

# Aos meus pais,

à minha esposa Neide e a minha lourinha Laura, com muito amor.

#### AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Carlos Alberto da Silva Lima, pela orientação segura e dedicado incentivo dados a este trabalho e ainda por sua confiança, seus ensinamentos e sua sincera ami zade que me foram oferecidos durante essa etapa de minha carreira, meus mais sinceros agradecimentos.

Meu profundo agradecimento:

Aos professores do grupo de laser pela orientação e apoio rec<u>e</u> bidos. Em particular

- ao Prof. Dr. Artemio Scalabrin
- a Profa. Dra. Miriná Barbosa de Sousa Lima pelo incentivo de amizade.
- Aos coordenadores de Pós-Graduação do IFGW durante a realização dessa tese, Prof. Dr. José Carlos Valladão de Mattos e Prof. Dr. José Galvão de P. Ramos, bem como as Secretárias Maria Ignez Mokarzel e Aparecida Menezes, pelo apoio e ajuda que me proporcionaram.

À CAPES E CNPq pela concessão da bolsa de mestrado.

A todos os professores do Instituto de Fisica da UNICAMP, e e<u>s</u> pecialrente aos da Pós-Graduação, pelos cursos ministrados. A todos os colegas da sala 113 do A-6: Alfredo, José Luiz, Mauricio, Daniel, Glória, Niuza e Valéria, pela grande interação e amizade.

- A Ana Toma e Loritilde P. de Paula pelo dedicado e compete<u>n</u> te trabalho de datilografia.
- A minha esposa Neide pelo incentivo, cooperação, amor e pa-

ciência e minha filha Laura por ser a garota linda que é, meus mais carinhosos e sinceros agradecimentos.

- A meus pais e meus irmãos pelo constante incentivo e sua inestimável e leal amizade.

Aos meus amigos Angela e Edson pela hospedagem tão amiga durante minha estadia em Campinas, meu muito obrigado.

A todos aquelas outras pessoas que direta ou indiretamente co<u>n</u> tribuiram para a realização dessa etapa de minha carreira meu sincero muito obrigado.

#### RESUMO

Nessa tese após uma breve digressão sobre o trata mento quântico de um sólido cristalino (estrutura de bandas) dentro dos vários esquemas implementados até hoje, procuramos desenvolver um estudo de alguns aspectos dos efeitos de um campo eletromagnético intenso (laser) sobre um sólido cristalino. Usando um programa desenvolvido para computador 0 VAX-11/780 calculamos inicialmente a estrutura de banda do sólido de Kronig-Penney, na ausência de campo. Explorando o uso de uma transformação unitária, o mesmo problema foi abordado agora levando em conta a presença do campo. resultados Osrevelam um estreitamento do "gap", que é também constatado quan do se procede cálculos similares dentro da aproximação de elétron quase-livre. Utilizando a informação especificamente obtida em nossos cálculos da estrutura de banda em presença do campo, i.e. a relação de dispersão, podemos calcular а massa efetiva dos elétrons num sólido de Kronig-Penney irradiado. Com isso foi-nos possível determinar também as modificações do coeficiente de absorção de um foton neste sólido, devido abs efeitos da ação de um campo de laser intenso. Nossos resultados são interpretáveis como consequências diretas do estreita mento da banda proibida que surge como o principal efeito da redução do potencial cristalino, devido ao campo eletromagnético intenso.

#### ABSTRACT

Thesis is devoted to the study of This some aspects of the crystalline solid x radiation field interaction. We start with a brief review of the quantum solid-state problem (band structure) as viewed by some of the major descriptive schemes already developed in this connection. We then move on to tackle some aspects of the even more elaborate problem of the quantum solid under the action of an intense laser field. By using a code developed for use our with VAX-11/780 computer we have initially calculated the band structure of a Kronig-Penney solid, in the absence of the field. Then, we explored the use of a unitary transformation to approach the same problem but now taking into full account the presence of a laser field. Our results reveal the existence of a field induced gap narrowing which has also been confirmed in additional calculations within the guasi-free electron approximation. The information derived from our band structure calculations, namely the dispersion relation, was then used to compute the electron effective mass for an irradiated Kronig-Penney solid. We could, thereby, assess the modifications introduced by a strong laser on the one-photon absorption coefficient of the solid, as probed bv an additional weak field. Our results are easily interpreted as direct consequences on the gap narrowing which seems to be main outcome of the intense field induced reduction of crystalline potential.

,

# INDICE

INTRODUÇÃO	0			
CAPÍTULO	.I -	CONSID	ERACÕES BÁSICAS SOBRE A ESTRUT <u>U</u>	
		RA EL	ETRÔNICA DOS SÓLIDOS CRISTALINOS	
		I.a - 1	Elétrons nos Sólidos: Bandas de	
		ľ	Energia	4
	-	I.b - 1	Formulação Teórica do Problema	6
		I.C - 1	Esquemas para descrição da es-	
		÷	trutura de Bandas : Considera-	
		(	ções Gerais	12
		-	I.c.l - Elétron Livre	13
			I.c.2 - Modelo de Kronig-Penney	14
			I.c.3 - Aproximação de Elétron	
			Quase-Livre	15
			I.c.4 - Método das Ligações Fo <u>n</u>	
			tes	16
			I.c.5 – Método Celular	17
			I.c.6 - Método APW	18
			I.c.7 - Método de Funções de Green	19
CAPÍTULO	II -	EFEITO LIDO	DE UM CAMPO ELETROMAGNÉTICO NUM SÓ-	
		II.a -	Considerações Gerais	21
		II.b -	Hamiltoniano para um Sólido num	
			Campo Eletromagnético	22
		II.c -	O Uso de Transformações Unitá-	
			rias : O Método de Henneberger	
			Kramer	24

l

CAPÍTULO	III -	SÕLIDOS	IRRADIAD	0 <b>5 ;</b> E	FEITOS	SOBRI	A S	
		LARGURA	DA BANDA	PROIB	IDA			
		III.a -	Modelo d	le Kron	ig-Penn	ey		
			III.a.l	- Na A	usência	de	Campo	29
			III.a.2	- Em P	resença	de	um	
				Camp	o Inten	so		40
		III.b -	• Aproximação de Elétron Quase-					
	•		Livre .					
			III.b.l	- Na A	usência	de C	lampo	41
			III.b.2	- Na P	resença	de	um	
				Lase	r Inten	SO		48
CAPÍTULO	IV -	ABSORÇÃ	O ÓPTICA	EM SÓL	IDO : E	FEIT	) DA	
		PRESENÇA	A DE UM C	AMPO I	NTENSO			
		IV.a - (	Considera	ções s	obre a	Absoi	ção	
		c	de Luz po	r um S	ólido			
		3	IV.a.l -	Introd	ução			49
		]	IV.a.2 -	Absorç	ão Ópti	са		50
		IV.b - 0	Coeficien	te de	Absorçã	0 - 1	Form <u>u</u>	
		-	lação Ass	umindo	o Mode	10 0	le	
		ŀ	Kronig-Pe	nney p	ara um	sõlid	lo	52
		3	IV.b.1 -	Cálcul	o da Mas	ssa Ef	etiva	54
		-	IV.b.2 -	Coefic	iente d	e Abs	sorção	
				no Mod	elo de	Kroni	g-Penney	56
		Ţ	[V.b.3 -	Efeito	de um	Campo	o de	
				Laser	Intenso	sobi	ce a	
				Massa	Efetiva	еo	Coef <u>i</u>	
				ciente	de Abs	orção	<b>b</b>	60

.

### INTRODUÇÃO

Um continuo desafio para o pesquisador, na ārea de Matéria Condensada, tem sido a compreensão, em têrmos đe primeiros princípios, das propriedades básicas de um sólido cristalino. É claro que, com o surgimento da Mecânica Quântica, muito progresso foi feito nessa direção e, hoje, a grande maioria dos pesquisadores dispõe, para suas investigações adicionais, de algumas formulações teóricas de reconhecido suces so. Não obstante, o problema não está - e dificilmente o poderia - fechado, uma vez que se trata de resolver um problema onde a presença de muitos corpos está levada a um extremo. Assim, não há senão que apelar para formulações aproximadas, que guardem a maior verossimilhança possível com o problema em questão, respeitando contornos eventualmente existentes, como a exploração de propriedades de simetria e periodicidade, e re correndo, abertamente, à parafernália computacional hoje dis ponive].

Nosso tema de trabalho, nesta Tese, contempla uma pequena faceta desse formidável problema e o faz dentro de um esquema onde uma maior transparência física dos resultados nos pareceu mais importante do que a implementação de uma maior complexidade de tratamento teórico. Nosso propósito é o de numa formulação conceitualmente simples, investigar o efeito da presença de um laser intenso irradiando um sólido, sobre a sua estrutura eletrônica, especialmente aqueles efeitos que, de imediato, se refletem sobre suas propriedades de absorção õptica. Assim, concentramos nossos esforços em procurar estabelecer, ainda que dentro de esquemas aproximados, as modificações na estrutura de bandas do sólido, mantendo-nos não obstante, dentro de limites aceitáveis de complexidade, tanto te<u>ó</u> rica quanto computacional.

Os átomos, em quase todos os sólidos cristalinos, metálicos ou não, estão tão próximos um dos outros que seus elétrons de valência passam a constituir um sistema único, iden tificável como associado ao cristal como um todo. A obediência ao Princípio de Exclusão de Pauli verifica-se, nesse sistema, pelo fato de que os estados de energia, das camadas ele trônicas mais externas, estão alterados devido a interação inter-atômica. Assim é que, em lugar de níveis característicos individualizados surgem, então, aglomerados de níveis de energia permitidos, com espaçamento tão extremamente pequeno (hấ tantos niveis quantos átomos no cristal) que seus agrupamentos, em regiões específicas do espectro energético eletrônico, receberam a designação de bandas (ou faixas) de energia, caracte rísticas do sólido cristalino em questão. Na verdade, a presen ça das bandas de energia, dos "gaps" que, eventualmente, se apresen tam entre elas e a maior ou menor extensão da ocupação dessas bandas pelos elétrons, estabelecem, essencialmente, as bases do comportamento eletrônico, óptico, térmico, etc. dos sólidos.

Em nosso trabalho abordamos, inicialmente, no Cap<u>i</u> tulo I, em seus aspectos mais básicos, a questão da estrutura eletrônica num sólido. A concepção básica de partida é o seguimento das modificações dos níveis de energia dos átomos isolados, à medida que os vamos aproximando para formar o s<u>o</u> lido. A seguir, aborda-se algumas consequências da formação das bandas. Procura-se, também, em termos de uma descrição fisica quantitativa explorar, numa primeira aproximação dentro

de nosso trabalho, a ser ampliada em Capítulo posterior, o mo delo unidimensional de Kronig e Penney, bem como uma aproximação tradicionalmente explorada para tratar elétrons num sõlido cristalino que é a aproximação de elétron quase-livre. No Capítulo II abordamos os efeitos da presença de um campo eletromagnético sobre tal estrutura, procurando uma formulação que permita evidenciar, com simplicidade, tais efeitos (tratamento semi-clássico). Após considerações de caráter geral sobre a interação radiação x sólido, a solução da Equação de Schroedinger, dentro da formulação de elétron independente, pa ra descrever o comportamento eletrônico no sólido irradiado, é abordada com o uso de uma transformação unitária (translação espacial). Com o objetivo de simplificar o problema, tratamos o campo de radiação na aproximação de dipolo. No Capitulo III aprofundamos esta abordagem, buscando configurar os efeitos do campo dentro das duas descrições para o elétron num sólido, já implementadas anteriormente. Assim, o problema do sólido, na ausência e em presença de um laser intenso, é tratado qualitativa e quantitativamente, explorando soluções obtidas com o uso de um computador (VAX 11/780 VMS Versão 3,7) dentro do modelo de Kronig-Penney e na aproximação de elétron quase-livre buscando-se, especialmente, estabelecer como se modifica o "gap" de energia em função da intensidade do laser. No capítulo IV, finalmente, esses resultados são aplicados à investigação de como um laser potente afeta o coeficiente de absorção óptica de um sólido.

As formulações gerais desenvolvidas no trabalho, tanto de método como de cálculo, bem como as conclusões a que chegamos, são finalmente resumidas no Capítulo V.

### CAPÍTULO I

# CONSIDERAÇÕES BÁSICAS SÔBRE A ESTRUTURA ELETRÔNICA DOS SÓLIDOS CRISTALINOS

### I.a ~ Eletrons nos Sólidos : Bandas de Energia

No fim do século passado, com a síntese do eletromagnetismo feita por Maxwell, e com as leis de Newton, acreditava-se que as leis fundamentais da Física estavam to das estabelecidas. Restava, então aplicā-las nas diversas áreas da Física. Assim sendo, foram usadas com sucesso, pa ra descrever os movimentos dos objetos, tanto em escala terres e como em escala celeste, para descrever a natureza ondu te latória da luz e os fenômenos eletrodinâmicos, etc. Falharam, no entanto, dramaticamente, na tentativa de explicar fenômenos no mundo microscópico, tais como aqueles revelados nos dados obtidos pela espectroscopia, a radiação do corpo negro, o com portamento do calor específico dos sólidos para baixas temperaturas, o efeito fotoelétrico, etc... Para vencer estes desa fios, surgem as primeiras sementes da Mecânica Quântica : а quantização da energia eletromagnética, os princípios de Ĕх e da Incerteza, a idéia de função de onda para clusão as partículas elementares, e a eq. Schroedinger. А aplicação. destes fundamentos contribui para elucidar os fenômenos aci citados, entre outros, bem como para a resolução da ma ques tão do átomo de hidrogênio, com precisão. Estes primeiros foram suficientes para dar credibilidade à nova vi sucessos são de encarar o mundo microscópico : a Física Quântica. Com

seu desenvolvimento, como é natural na Física, foram aparecendo os novos desafios, como a descrição quântica dos atômos multieletrônicas, as moléculas e os sólidos, que são problemas de muitos corpos. Isto deu origem aos métodos aproxim<u>a</u> dos: teoria da perturbação, método variacional, teoria de ba<u>n</u> das, etc., alguns dos quais discutiremos neste Capítulo.

Nosso ponto de partida é o conhecimento da estrutura quântica dos átomos isolados visto que esta estrutura terá reflexos no comportamento de sólido que é formado a partir da reunião ordenada, ou não, de átomos. Como se sabe o tratamento quântico dos átomos, resolvendo a correspondente equação de Schroedinger, revela a existência de níveis de ener gia quantizados, cujas população eletrônica é regulada pelo princípio de Pauli.

Quando os ātomos isolados se aproximam uns dos outros para formar o sólido cristalino, os núcleos e os elé trons das camadas mais internas (caroço positivo) ordenam-se de maneira periódica. Então podem s ver um sólido como formado por uma sucessão de unidades básicas que se repetem espacialmente (celas unitárias), unidas por forças eletrostáticas. Os elétrons mais externos tem uma maior interação com os outros átomos. Podemos, na verdade, pensar que estes elétrons são compartilhados por todos 🦯 os átomos que formam o cristal. Se os níveis discretos de ener gia atômica não se modificassem teríamos cada nível 2-N vezes (N é o número de átomos no sólido). Sabedegenerados mos que cada elétron, agora, não somente interage com seu núcleo e elétrons vizinhos, mas também com todos outros áto-Com isto, acrescenta-se (N-1) termos ao hamiltoniano mos. de cada elétron, o que leva à quebra de degenerescência dos níveis energéticos atômicos. Isto implica que cada nível dis-

creto gera uma "banda de energia". Assim, cada banda possui N níveis quânticos com separação infinitamente pequena entre eles pois o número de átomos em sólidos é extremamente grande. Portanto, mesmo em face à degenerescência, existem certos intervalos de energia que não são ocupados pelos elétrons, constituindo o que chamamos de "faixas proibidas de energia" (gaps). As larguras das bandas de energia assim como dos "gaps", dependem da natureza do sólido, ou seja, dos átomos que o formam, bem como da maneira como os núcleos se ordenam (e<u>s</u> trutura cristalina).

A estrutura de banda do sólido é decisiva na determinação de suas propriedades ópticas, elétricas, térmicas, químicas e estruturais.

Passaremos agora a apresentar uma formulação mais elaborada do problema, desenvolvendo as bases da chamada Teoria de Bandas.

### I.b - Formulação Teórica do Problema

### Aproximação do Elétron Independente

No tratamento quântico de um sólido, temos que resolver um problema de N-corpos em condições extremas (N→∞). Então, faz-se necessário uma série de aproximações, que apresentamos a seguir.

A Eq. Schroedinger para os elétrons num cristal periódico, cujo o potencial é independente do tempo é:

$$\widehat{\mathbf{H}}\boldsymbol{\psi} = \mathbf{E}\boldsymbol{\psi} \tag{1.1}$$

onde  $\psi$  depende das posições  $\vec{r}_i$  de todos os elétrons, E é a energia do cristal, e o hamiltoniano H é dado por:

$$\hat{H} = \sum_{i} (-\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla_{i}^{2}) + \sum_{\alpha} (-\frac{\hbar^{2}}{2M} \nabla_{\alpha}^{2}) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq i} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{j \neq j} \frac{1}{\kappa r_{ij}} \sum_{i \neq j} \frac{1}{\kappa r_{ij}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{i \neq j} \frac{1}{\kappa r_{ij}} \sum_{i \neq j} \frac{1}{\kappa r_$$

Aqui, R<sub>α</sub> são os vetores posições dos núcleos, e os operadoros de energia cinótica dos elétrons e dos núcleos são, respectivamente,

$$\sum_{i} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \qquad , \qquad \sum_{i} -\frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2$$

onde  $V_i^2$  é o laplaciano para o i-ésimo eletron,  $V_{\alpha}^2$  para o núcleo  $\alpha$ , m e  $M_{\alpha}$ , são massas do elétron e do núcleo  $\alpha$ , respectivamente.

A energia potencial de interação inter-eletrônica  $\vec{e} : \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \ j \ \kappa_r_{ij}}} \sum_{\substack{j \ \kappa_r_{ij}}} e^2$  onde  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  é a distância en $i \neq j$  tre os elétrons i e j e "\k" é a constante dielétrica do cristal.

Temos, ainda, a energia de interação internuclear  $V(\vec{R}_1, \vec{R}_2 \dots \vec{R}_N)$  é a energia de interação elétron-nucleo  $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_n, \vec{R}_1, \vec{R}_2 \dots \vec{R}_N)$ 

O grande número de partículas existentes em um cristal,torna impossível achar a solução exata da Eq. (1.1). Assim, para resolvê-la, tem-se que apelar para certas aproxi-

mações.

A primeira que se faz é a aproximação na qual con sideramos os núcleos em "repouso", pois a energia cinética dos elétrons é muito maior que a dos núcleos. Assume-se assim que a energia inter-nuclear é constante. Escolhendo, convenientemente, a origem das energias podemos fazer  $v_0 = 0$ . Assim a eq. (1.1) ficará:

$$\left[\sum_{i} \frac{\vec{n}^{2}}{2m} \nabla_{i}^{2} + \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{i} \frac{e^{2}}{\kappa r_{ij}} + U(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2} \dots \vec{r}_{n}; \vec{R}_{1}, \vec{R}_{2} \dots \vec{R}_{m})\right]\psi_{e} = E\psi_{e}$$

Em segundo lugar, faz-se uso da aproximação de Hartree-Fock, na qual a energia de interação de pares de el<u>é</u> trons é substituida pela interação de cada elétron com um cam po médio criado por todos os demais. A energia associada a este campo,  $\Omega$ , para um dado elétron só depende de sua coorde nada  $\Omega = \Omega_i(\vec{r}_i)$ . Assim, o duplo somatório  $\frac{1}{2}\sum_{\substack{i \\ j \\ i \neq j}} \sum_{\substack{i \neq j \\ i \neq j}} \frac{\hat{\theta}^2}{\kappa r_{ij}}$  é substituido pela somatório  $\sum_{i=1}^{n} \Omega_i(\vec{r}_i)$ .

Procede-se de forma analóga com a energia petencial de interação dos elétrons com os núcleos onde substituir<u>e</u> mos  $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_n, \vec{R}_1, \vec{R}_2 \dots \vec{R}_n)$  pela somatória  $\sum_{i=1}^{N} Z_i(\vec{r}_1)$ .

Assim, o hamiltoniano só depende agora da pos<u>i</u> ção  $\vec{r}_i$  de cada elétron, separadamente, i. e.

$$\hat{H}_{i} = \frac{-\hbar^{2}}{2m} \nabla_{i}^{2} + \Omega_{i}(\vec{r}_{i}) + Z_{i}(\vec{r}_{i})$$
(1.4)

$$\hat{H} = \sum_{i} \hat{H}_{i}$$
(1.5)

O hamiltoniano, agora desacoplado nas várias v<u>a</u> riáveis eletrônicas, é o somatório dos hamiltonianos de : cada elétron. Portanto a função de onda total é o produto das funções de onda de cada elétron:

$$\psi_{e} = \psi_{i} \psi_{2} \cdots \psi_{n}$$

e a energia total e a soma da energia de cada elétron:

$$E = \sum_{i} E_{i}$$

Para cada elétron temos:

$$\hat{H}_{i} \psi_{i} = E_{i} \psi_{i} \qquad (1.6)$$

Se,em cada cristal, os átomos estão disposto de maneira <u>pe</u> riódica, é razoável imaginarmos que o potencial total que atua sobre o elétron i  $(V_i(\vec{r}_i) = Z_i(\vec{r}_i) + \Omega(\vec{r}_i))$ , seja também periódico.

$$\hat{H}_{i} = \frac{-\hbar^{2}}{2m} \nabla_{i}^{2} + \nabla_{i}(\vec{r}_{i})$$
(1.7)

Com este conjunto de aproximações, transformamos um problema de N corpos em um problema equivalente de apenas um corpo. Nesta formulação a interação elétron-fónon foi desprezada. Considerando a solução da eq. (6), Bloch<sup>(1)</sup> demonstrou que as funções de onda são da forma:

$$\psi_{i} = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} U_{K}(\vec{r}_{i})$$
(1.8)

onde U<sub>K</sub>(r) tem a periodicidade da rede, pois em cada cela unitária o elétron tem que se comportar da mesma maneira. Assim, quando calculamos a densidade de probabilidade para encontrar o elétron, esta tem que ser igual em pontos equivalentes de cada cela unitária:

$$P_{i} = \psi_{i}\psi_{i} = e^{-i\vec{k}\vec{r}}U_{K}(\vec{r}_{i})e^{i\vec{k}\vec{r}}U_{K}(\vec{r}_{i}) = U_{K}^{*}(\vec{r}_{i}) u_{K}(\vec{r}_{i})$$

$$P_{i+\ell} = \psi_{i+\ell}^{*}\psi_{i+\ell} = U_{K}^{*}(\vec{r}_{i}+\ell\vec{a}) U_{K}(\vec{r}_{i}+\ell\vec{a}) = U_{K}^{*}(\vec{r}_{i}) U_{K}(\vec{r}_{i}) +$$

$$\Rightarrow P_{i} = P_{i+\ell} \qquad (1.9)$$

onde à é o vetor de translação da rede cristalina é lum inteiro.

O potencial periódico  $V(r_i)$  depende da natureza dos átomos que formam o cristal, bem como das espaçamento en tre eles, e da distribuição dos elétrons pelo cristal. Para cada tipo de potencial ( $V(r_i)$ ) temos uma relação entre o vetor de onda  $\vec{k}$ , é as possíves energias (E) : é o que designamos de relação de dispersão para elétrons no cristal  $E(\vec{k})$ .

Existem dois tipos de faixas de energia : a) intervalos nos quais os valores de  $\vec{k}$  são reais, chamadas de "bandas permitidas Ř de energia"; b) intervalos onde os valores de teriam. que imaginários, o que torna o comportamento da função ser de onda Eq. (1.8) inadequado, e a Eq. (1.9) não é mais obedeci Em outras palavras, estas energias os elétrons não poda. são as "faixas de energia proibidas" ter. Estas ou dem "bandas proibidas". Como já dissemos, cada banda permitida ē gerada a partir da quebra de degenerescência de um dado ní vel eletrônico dos átomos formam o cristal. que

Assim, cada banda acomoda 2 N estados guânticos, o fator 2 tendo origem na dupla possibilidade de orientação do spin eletrônico.



Fig. 1 - Energias permitidas e proibidas para elétrons num cristal.

O preenchimento das bandas permitidas pelos el $\underline{\check{e}}$ trons do cristal determinară, entre outras características se o material é isolante, semicondutor ou condutor.

Chamamos de banda de valência a última banda completa em uma escala crescente de energia, e de banda de condução a primeira banda vazia ou parcialmente preenchida.

Nos isolantes, além da banda de valência estar totalmente preenchida a banda de condução está totalmente vazia. A banda proibida de energia (gap) é larga o suficiente para impedir que um elétron seja excitado para a banda de condução por um processo que envolva energia menor que cerca de 3 - 4 ev.

Nos semicondutores, temos uma situação semelhan-

te ao isolante, exceto que a banda proibida de energia entre as bandas de condução e valência é estreita, tornando fácil excitar um elétron para banda de condução. Em certos semicondutores e sob certas condições, até a energia termica  $K_BT$  é suficiente. Uma vez na banda de condução, o elétron se comporta como estivesse "livre", pois a separação entre os níveis quânticos, dentro da banda, é muito pequena. Em consequência, um campo elétrico externo pode facilmente modificar o momentum do elétron.

Já nos condutores, a banda de condução está parcialmente preenchida. Não há exigência sobre a energia mín<u>i</u> ma que deve ser transferida a um elétron para movimentálo nesta banda e assim pode-se facilmente, fazer passar uma forte corrente pelo condutor, mesmo que o campo aplicado s<u>e</u> ja fraco.

O fato da função de onda do elétron ser a mesma, a menos de um fator de fase, em cada cela unitária, leva-nos a obter um livre caminho médio infinito para o elétron. Como, então, explicar o fato dele ser finito? Hã duas justificativas: a primeira, é a presença de impurezas no cristal (átomos outros que não aqueles da cela unitária) que além de quebrar a periodicidade do cristal, agem como centros de espalhamento. A segunda, é a presença do movimento dos núcleos que na verdade, agem, também, como centros espalha (sua existência foi ignorada em nosso tratamento aprodores ximado).

I.c) Esquemas para descrição da estrutura de bandas : considerações gerais:

Faremos a seguir um breve resumo dos diversos

modelos e aproximações utilizados para calcular a estrutura de banda dos diversos sólidos.

De acordo com o modelo que se tome para descrever o potencial periódico  $V(\vec{r}_i)$ , ao resolvermos a Eq. (1.6), tem-se uma partícular estrutura de banda (relação de dispersão).

# I.c.1 - Eletron Livre<sup>(3)</sup>

Em primeiro lugar consideremos o modelo do el<u>é</u> tron livre, onde o potencial periódico é tomado nulo  $(V(\vec{r})=0)$ . O elétron é tratado como se estivesse confinado em uma caixa com as dimensões do cristal. Este modelo é adequado apenas <u>pa</u> ra explicar certas propriedades dos metais. A Eq.(1.6) torna-se, neste caso:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \psi_i = E \psi_i \qquad (1.10)$$

Esta equação pode ser resolvida exatamente. A solução é uma onda plana :

$$\psi_{i} = A e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}}$$

Aplicando as condições de contorno e normaliza<u>n</u> do  $\psi_i$ , chega-se a seguinte relação de dispersão:

$$E = \frac{\pi^2}{2m} \kappa^2$$

onde o vetor  $\vec{K}$  tem as seguintes possíveis coordenadas cart<u>e</u> sianas

$$K_x = \frac{2\pi}{L_x} \&$$
;  $K_y = \frac{2\pi}{L_y} m$ ;  $K_z = \frac{2\pi}{L_z} n$ 

onde  $\ell$ , m, n são inteiros e L, L, L são as dimensões lineares do cristal.

Este foi um dos primeiros modelos desenvolvidos para descrever um sólido cristalino. Nele,o potencial tem a seguinte forma, em cada cela unitária:

> $V(\xi_i) = 0$  para  $0 < \xi_i < b$  $V(\xi_i) = -V_0$  para  $b < \xi_i < a$

onde  $\xi_i = x, y, x$  e  $V_0 > 0$ 



Substituindo a função de Bloch na Eq.(1.6), e apl<u>i</u> cando as condições de continuidade para  $U_{K}^{'}$ ,  $U_{K}^{'}$  nos pontos  $\xi = b$  e  $\xi = a$ , chega-se a relação de dispersão:

$$\frac{2f - 1}{2[f(1-f)]^{1/2}} \{ \operatorname{senh}(\frac{\gamma b f^{1/2}}{c}) \operatorname{sen}[\gamma (1-f)^{1/2}] \} +$$

+ 
$$\cosh(\frac{\gamma b f^{1/2}}{c}) \cos(\gamma (1-f)^{1/2}) = \cos Ka$$

sendo a energia associada ao movimento em cada direção (i = x, y, x) dada por:

$$E_{i} = -fV_{o} \quad com \quad 0 < f < 1 \quad e \quad \gamma = \left(\frac{2mV_{o}}{\hbar^{2}}\right)^{1/2}c$$

Este modelo será tratado, em detalhe, no capítulo III.

## I.c.3 - Aproximação do Elétron Quase-Livre<sup>(3)</sup>

Nesta aproximação o potencial periódico é tratado como uma perturbação do hamiltoniano do modelo do elétron livre, ou seja, o hamiltoniano é :  $\hat{H}_{T} = \hat{H}_{livre} + \hat{V}(r)$  on de  $\hat{V}(r)$  é uma perturbação de  $\hat{H}_{livre}$ .

Em que medida o potencial periódico  $V(\vec{r})$ , que representa as interações elétron-elétron e as interações entre elétrons e núcleos, pode ser considerado fraco? Uma abordagem mais detalhada desta aproximação, será feita no capítulo III.

Por enquanto, vamos tomar  $V(\vec{r})$  como perturbação e aplicar agora a Teoria de de Perturbação ao problema. P<u>a</u> ra a função de onda, em l<sup><u>a</u></sup> ordem, encontramos:

$$\psi_{\vec{K}}(\mathbf{r}) = \Lambda e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}$$

e para energia:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 \quad \text{para} \quad \kappa_x \neq \frac{n\pi}{a_x} ; \quad \kappa_y \neq \frac{n\pi}{a_y} , \quad \kappa_2 \neq \frac{n\pi}{a_z}$$

е

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \quad \frac{\pi^2 n^2}{a_{\xi}^2} \quad \pm \quad \frac{1}{a_{\xi}} \quad \int_0^{a_{\xi}} \frac{\pi n n_{\xi}}{a_{\xi}} \quad \nabla(\xi) d\xi \quad \text{, para } K = \frac{n n_{\xi}}{a_{\xi}}$$

onde  $\xi = x, y, x$ 

# I.c.4 - Método das Ligações Forte (3,4)

Aqui, a hipótese básica é que o hamiltoniano p<u>e</u> riódico cristalino total pouco difere do hamiltoniano do átomo isolado, em cada ponto da rede, isto é  $\hat{H}_T = \hat{H}_{at} + \hat{U}$ onde  $\hat{U}$  é uma perturbação de  $\hat{H}_{a+}$ .

A técnica de resolução, da eq. (1.6), neste caso, consiste em construir os orbitais cristalino como uma combinação linear dos orbitais atômicos de cada átomo. Escre vemos  $\psi(\mathbf{r})$  na forma de Bloch :  $\psi_{K}(\mathbf{r}) = \sum_{K} e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}\phi(\vec{r})$ , onde  $\phi(\vec{r})$  é a combinação linear das funções de ondas atômicas, i.e.

$$\phi(\vec{r}) = \sum_{n} b_n \psi_{An}(\vec{r}) +$$

Substituindo esta função de onda na eq. Schro<u>e</u> dinger, obtém-se, após manipulações algébrica<sub>s</sub>, a corre<u>s</u> pondente estrutura de banda.

Mencionaremos apenas,a seguir, outros métodos, que são baseados no potencial Muffin-Tin<sup>(3)</sup>, cuja definição é a seguinte: imaginemos esferas idênticas centradas em cada centro atômico na rede cristalina, com raio tal que toda esfera tangencia suas vizinhas mais próximas. Torna-se, e<u>n</u> tão, o potencial no interior das esferas como sendo esfericamente simétrico e, na região intersticial, como um pote<u>n</u> cial constante.

Potencial "Muffin - Tin"



Região Instersticial V = constante

Região de potencial esfericamente simétrico V = V(r) $|r| < r_0$ 

I.c.5 - Método Celular<sup>(4,5)</sup>

Este método, desenvolvido por Wigner e Seitz<sup>(5)</sup>; consiste, basicamente, em resolver a eq. Schroedinger, dentro de uma única cela primitiva. A seguir, usando o teorema de Bloch ( $\psi_{\rm K}(\vec{r} + \vec{a}) = e^{i\vec{K}.\vec{a}}\psi_{\rm K}(r)$ ) obtém-se a resolução para todo o cristal. Observe que  $\psi(\vec{r})$  e  $\nabla\psi(\vec{r})$  devem ser fu<u>n</u> ções contínuas nas fronteiras da cela primitiva. Numa pr<u>i</u> meira aproximação, neste método, faz-se o potencial periódico  $V(\vec{r})$ , dentro das celas primitivas, esfericamente simétr<u>i</u> co. Então obtém-se como solução da eq. Schroedinger :  $\psi_{\rm em}(r) = y_{\rm mi}(\phi, 0) \chi_{l}(r)$ ; onde  $y_{\rm lm}(\phi, 0)$  são os harmônicos e<u>s</u> féricos, e  $\chi_{0}(r)$  satisfaz à equação radial:

$$\chi_{\ell}^{"}(\vec{r}) + \frac{2}{r} \chi_{\ell}^{"}(\vec{r}) + \frac{2m}{n^2} (E - V(r) - \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r} \chi_{\ell}(\vec{r}) = 0$$

Resolvendo esta equação, e usando as condições de contorno, obtém-se as bandas de energia. As dificuldades computacionais envolvidas em se satisfazer, numericamente, as condições de contorno na superfície da cela primitiva, gera<u>l</u> mente um poliedro de estrutura complexa foi um dos pr<u>o</u> blemas enfrentados por este método.

### I.c.6 - Método APW (onda plana ampliada)

Esta abordagem, desenvolvida por J.C. Slater<sup>(6)</sup>, utiliza o potencial "Mufftin-tin". Aqui, a função de onda do cristal é expandida em um conjunto de ondas planas aument<u>a</u> das ¢<sub>Ğ,E</sub>.

$$\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{c} \in \vec{G}} \vec{c} \vec{k} + \vec{c}, E(K)$$

onde  $\phi_{\vec{G},E}^{+}$  tem que satisfazer as seguintes condições: -  $\phi_{\vec{G},E}^{+}$  é uma onda plana na região intersticial na forma

$$\phi_{\overrightarrow{q},E} = e^{i\overrightarrow{q},\overrightarrow{r}}$$

- \$\overline{q},E\$ é contínua nas fronteiras da região atômica (interior das esferas centradas nos pontos da rede) e intersticial
- na região atômica,  $\phi_{q,E}^{*}$  tem que satisfazer a equação Schroedinger atômica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_{\vec{q},E}(\vec{r}) + \nabla(\vec{r}) \phi_{\vec{q},E}(\vec{r}) = E \phi_{\vec{q},E}(\vec{r})$$

Usando o método variacional, a energia E(K), bem como os coeficientes  $c_{\overline{K}}^{+}$ , são calculados.

O problema computacional que surge é a necessida de de diagonalizar matrizes de ordem elevadas (50 x 50 a 10 x 100), para se obter uma precisão aceitável nos cálculos.

### I.c.7 - Mctodos de Função de Green (KKR)

Este método, também usa um potencial "Muffin-tin" e foi desenvolvido originalmente por Korringa, Kohn e Rostoker <sup>(7)</sup>, O método utiliza a técnica das funções de Green para transformar a Eq. Schroedinger em uma equação integral equivalente. Desta forma, evitam-se os problemas relativos à imposição das condições de contorno, como oco<u>r</u> re com o método celu'ar.

A eq. Schroedinger transformada é:

$$\psi_{n\vec{K}}(\vec{r}) = \left\{ \vec{drG}_{K}(\vec{r}\cdot\vec{r}', E_{n}(\vec{K}), V(r) \psi_{n\vec{K}}(\vec{r}') \right\}$$

Expandindo as  $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$  em série de funções adequadas e usando o cálculo variacional, obtém-se um determinante de compatibilidade, cujas soluções nos fornecem os aut<u>o</u> valores de energia  $E_{n(\vec{k})}$  e os coeficientes da expansão de  $\psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$ .

Vários outros métodos foram desenvolvidas, como º OPW (Método das Ondas planas ortonormalizadas<sup>(8)</sup>.). Mas não iremos comentá-los por achar que os métodos apr<u>e</u> sentados, já são suficientes para fornecer uma visão <u>ge</u> ral da complexidade do problema, da multiplicidade de esquemas desenvolvidos para sua solução aproximada, enfim, do tipo de abordagem que os físicos, em geral, empregam no trato analítico, ou mesmo computacional, do problema de N-corpos - o problema do estado sólido.

#### CAPÍTULO II

#### EFEITO DE UM CAMPO ELETROMAGNÉTICO NUM SÓLIDO

### II-a - Considerações Gerais

A interação da radiação eletromagnética com os sólidos, é um dos desafios mais estimulantes da Física Quân tica. Em verdade, a explicação de fenômenos como reflexão, refração e absorção de luz, já causava polêmica entre os físicos, muito antes do aparecimento da Teoria Quântica. Grande parte destes fenômenos tiveram uma explicação satisfatória com a teoria eletromagnética de Maxwell. Mas fenômenos como o efeito fotoelétrico, a radiação de corpo negro, a emissão espontânea, e a emissão estimulada, exigem a quantização do campo eletromagnético.

Fatores determinantes do tipo de interação entre sólidos e radiação, são a freqüência angular ( $\omega$ ) e a intensidade da radia ção e a estrutura interna do sólido. Por exemplo a absorção pode ocorrer através de vários caminhos : absorção pela r<u>e</u> de cristalina (interação foton-fonon), absorção pelos elétrons : transições diretas, absorção pelos portadores (interação foton-elétron) e transições indiretas (interação foton-elétron-fonon).

Quando a radiação é de baixa intensidade, o tratamento perturbativo leva a um bom acordo como os dados experimentais, pois a estrutura interna do sólido modifica-se muito pouco, em face ao processo de interação<sup>(9,10)</sup>.

A construção de lasers de altissimas potências,

e focalizando-os, imensas intensidades é hoje uma realidade em qualquer laboratório de Física Moderna, razoavelmente equip<u>a</u> do. O estudo da interação da radiação intensa com a matéria torna-se assim, inevitável. Foi a experiência que nos mostrou que não só ocorrem transições intra e interbandas lineares, mas também surgem efeitos não lineares<sup>(11-17)</sup>em função dos quais as características básicas do sólido são modific<u>a</u> das fortemente. Nestas condições o tratamento perturbativo não é mais suficiente,<sup>(18)</sup>pois o campo eletromagnético introduz um termo no hamiltoniano eletrônico comparável com os termos do hamiltoniano eletrônico na ausência do campo.

O estudo da evolução da estrutura de banda em função do aumento da intensidade da radiação, é uma das questões mais desafiantes desta área. Vários pesquisado res <sup>(11,35)</sup> vem, ao Jongo dos últimos anos, contribuindo de for ma importante para elucidação desta questão. No que segue descreveremos um tratamento alternativo às formulações não perturbativas jã mencionadas.

### II-b - Hamiltoniano para um Sólido num Campo Eletromagnético

Em nosso tratamento, com o objetivo de um entend<u>i</u> mento básico, levaremos em conta apenas as interações domina<u>n</u> tes. Assim sendo, não incluiremos no hamiltoniano os termos referentes a interação foton-fonon, i.e, consideraremos o problema dentro da aproximação em que os "caroços atômicos" que compõe a rede cristalina permanecem fixos em suas posições.

Utilizando, também, a aproximação do elétron in dependente, desenvolvida no capítulo anterior, e, ainda, a

aproximação semiclássica, onde trata-se a radiação classica mente segundo as equações de Maxwell, e o cristal quanticamente. Vamos, também, considerar os efeitos da radiação eletromagnética, dentro da chamada aproximação de dipolo. Esta aproximação é boa quando o comprimento de onda da onda eletromagnética é muito maior que as dimensões da cela unitária do cristal. Então, o potencial vetor Á dependerá somen te do tempo (ignora-se a variação espacial do campo sobre uma cela unitária)

$$\vec{A}(t, \vec{r}) \xrightarrow{Aproximação} \vec{A}(t)$$
  
de dipolo

tem-se

$$\vec{E} = \frac{-1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} e \vec{H} = \nabla x \vec{A}$$

O hamiltoniano clássico para o elétron sujeito ao campo eletromagnético e ao potencial cristalino é:

$$H_{c} = \frac{1}{2m} [\vec{P}_{i} + \frac{e}{c} \vec{A}(t)]^{2} + V_{i}(r)$$

A equação de Schroedinger para este hamiltoniano, usando o tratamento semiclássico é:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = \left[\frac{1}{2m}(\vec{P} + \frac{e}{c}\vec{A}(t))^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}, t)$$
 (2.1)

onde P é o operador de momento

₽ + -in∛

Como pode se observar, este hamiltoniano é depen dente do tempo. Assim, não existem soluções estacionárias e, tampouco, auto-valores de energia. Não obstante, veremos que é possível transformar este hamiltoniano de forma a transferir a dependência temporal do termo de energia para o termo poten cial e, então separar este último em uma parte não dependente do tempo e outra dependente do tempo. Os auto-valores de incluindo apenas a parte d.c. do potencial constituem H trans as quasi-energia do sistema. A parte a.c. de V<sub>trans</sub> será tratada, quando utilizada, como perturbação.

# II.c - O uso de transformações unitárias para Resolver a Equação Schroedinger : A Transformação de Henneberger-Kramer<sup>(36)</sup>

Para resolver a eq. (2.1) exploraremos o método das transformações unitárias. No presente caso o chamado méto do de translação espacial, devido a Henneberger-Kramer. Ele consiste, essencialmente, em introduzir uma nova representação, através de uma transformação unitária, que elimina a dependência do termo de energia cinética no campo de radiação, transformando-a para o termo de energia potencial. Em outras palavras propõe-se como solução da equação de Schroedinger a função de onda (ver Apêndice A, para detalhes)

$$\psi(\mathbf{r}, t) = U \phi(\mathbf{r}, t)$$

onde ør,t) é a função de onda na nova representação,

$$U = e^{\frac{1}{\hbar} \cdot \vec{b}(t) \cdot \vec{P}} e^{in(t)}$$

com

$$\vec{\delta}(t) = \frac{-e}{mc} \int^{t} A(t')dt'$$

$$\eta(t) = \frac{-e^{2}}{2mc^{2}} \int^{t} A(t')dt'$$

$$U^{\frac{*}{2}}$$
  $(H_c - i\hbar \frac{\partial}{\partial t})U \rightarrow \frac{\dot{p}^2}{2m} + V(\dot{r} - \dot{\delta}(t)) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ 

A eq. Schroedinger, nesta nova representação, fi-

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t}(\vec{r}, t) = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r} - \vec{\delta}(t))\right] \phi(\vec{r}, t) \qquad (2.2)$$

Irradiemos o sólido com uma onda eletromagnética circularmente polarizad..,

$$\vec{A}(t) = A(\cos\omega t \ \hat{x} + \sin\omega t \ \hat{y})$$
 (2.3)

$$\vec{\delta}(t) = -\frac{eA}{mc\omega} (\operatorname{sen}\omega t \ \hat{x} - \cos\omega t \ \hat{y})$$
 (2.4)

$$\left|\vec{\delta}(t)\right| = a_{\delta} = \frac{eA}{m\omega c}$$
 (2.5)

Expandindo o potencial em série de Fourier

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\vec{c}} V_{\vec{c}} e^{i\vec{c}\cdot\vec{r}}$$

onde

$$v_{\vec{G}} = \frac{1}{|\vec{a}_{r}|} \int_{0}^{|\vec{a}_{r}|} v(\vec{r}) \vec{e}^{\vec{i}\vec{G}\cdot\vec{r}} dr$$

 $\vec{a}_r$  é vetor de rede, e  $\vec{G}$  é o vetor da rede recíproca,  $\vec{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}$ 

Assim

$$V(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\delta}(t)}$$
  
$$\vec{G}$$
  
Observe que em  $e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\delta}(\vec{t})}$ ,

$$\vec{G} \cdot \vec{\delta}(t) = \vec{G}_{1} \cdot \vec{\delta}(t) = |\vec{G}| |\vec{\delta}(t)| \cos(\vec{G}_{1}, \vec{\delta}(t))$$
 (2.6)



Então, temos:

 $\vec{G}.\vec{\delta}(t) = |\vec{G}| |\vec{\delta}(t)| \cos(\pi/2 - \omega t + \phi_K) =$ 

$$= G_{I} a_{\delta} \operatorname{sen}(\omega t + \phi_{K}^{\dagger})$$

$$+ e^{i \vec{G} \cdot \vec{\delta}(t)} = e^{-i G_{I} a_{\delta}} \operatorname{sen}(\omega t + \phi_{K}^{\dagger}) \qquad (2.7)$$

Usando a expansão 
$$e^{ixsen\theta} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im\theta} J_{m}(x)$$

onde  $J_m(x)$  é a função de Bessel de ordem 'm', obtém-se

$$e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\delta}(t)} = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} (-1)^{\nu} J_{\nu}(G_{\perp}\cdot a_{\delta}) e^{i\nu\omega t} e^{i\nu\phi_{k}^{\prime}}$$

e portanto

$$V(\vec{r}-\vec{\delta}(t)) = \sum_{\vec{G}} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} (-1)^{\nu} V_{\vec{G}} J_{\nu}(G_{1} a_{\delta}) e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} e^{i\nu(\omega t + \phi_{k}^{\dagger})}$$
(2.8)

Suponhamos que o tempo de duração do pulso do l<u>a</u> ser,  $\Delta$ , seja muito maior de que o período da onda eletromagnética e que, além disso, seja maior que o tempo de recombinação  $\tau$ , por sua vez assumido, também, como muito maior que o período da onda circularmente polarizada. Assim  $\omega \Delta \gg \omega \tau \gg 1$ . Calculando a média temporal do potencial distorcido pelo laser

$$\langle \nabla(\vec{r}-\vec{\delta}(t)) \rangle_{A} = \frac{1}{\Lambda} \int_{0}^{\Lambda} \left[ \sum_{\alpha} \sum_{\beta=-\infty}^{\infty} (-1)^{\nu} V_{\beta} J_{\nu}(G_{L}a_{\delta}) e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} x e^{i\nu\phi_{K}^{\dagger}+i\nu\omega t} \right] dt$$

$$= \sum_{\vec{G}} v_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} (-1)^{\nu} \delta_{\nu}(G_{1}a) e^{i\nu\phi_{\vec{K}}} \frac{1}{\Delta} \int_{0}^{\Delta} e^{i\nu\omega t} dt$$

Como,

$$\frac{1}{\Delta} \int_{0}^{\Delta} e^{i\nu\omega t} dt = \frac{-\sin\nu\omega t}{\nu\omega\Delta} \left| \int_{0}^{\Delta} + \frac{i\cos\nu\omega t}{\nu\omega\Delta} \right|_{0}^{\Delta}$$

tem-se, usando  $\omega \wedge >> 1$  e senv $\omega < 1$  e cosv $\omega t < 1$ , que

$$\implies \frac{1}{\Delta} \int_{0}^{\Delta} e^{i\nu\omega t} dt = 0 \qquad \text{para} \quad \nu \neq 0$$
$$\frac{1}{\Delta} \int_{0}^{\Delta} dt = 1 \qquad \text{para} \quad \nu = 0$$

Assim :

$$\langle \nabla(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) \rangle_{\Delta} = \sum_{c} \widetilde{\nabla}_{c} e^{i\vec{c}\cdot\vec{r}} = J_{o}(G_{l}a_{\delta})\nabla(\vec{r})$$
 (2.9)

onde

$$\widetilde{V}_{\vec{G}} = V_{\vec{G}} J_{o} (C_{\perp} a_{\delta})$$
(2.10)

Podemos interpretar este resultado como expressan do o fato de que durante a ação do campo de laser o elétron move-se no cristal como se estivesse sob a ação de um poten cial modificado que corresponde a média temporal do pot noial distorcido pelo laser  $V(\vec{r} - \vec{\delta}(t))$ .
#### CAPÍTULO III

### SÓLIDOS IRRADIADOS : EFEITO SOBRE A LARGURA DA BANDA PROIBIDA

#### III.a - Modelo de Kronig-Penney

#### III.a.1 - Na Ausência de Campo

É um fato largamente conhecido daqueles, que traba lham em teoria de estado sólido, que nos sólidos cristalinos o comportamento dos elétrons caracterizam-se pela existência de níveis estacionários de energia que se localizam em bandas qua se contínuas. Estas bandas tem sua origem no comportamento quân tico dos elétrons sujeitos a potenciais ligantes periódicos, como os apresentados nos cristais. Elas dependem também, das características dos átomos constituintes dos sólidos, e assim a estrutura de banda tem forte relação com a natureza dos sólidos.

O problema de se calcular o comportamento quântico de elétrons em sólidos reais (3-d); embora tenha sua proposição formal desenvolvida mesmo em textos básicos é, em si, um problema monumental. A isto deve-se acrescentar os efeitos de campos externos, quando se quer estudar as modificações que eles introduzem na estrutura de bandas do sólido. É fácil compreender, pois, que há necessidade de se introduzir hipóteses simplificadoras e aproximações para se produzir algum tipo de solução analítica que permita uma avaliação sistemática, pelo menos da tendência gerais dos efeitos de tais campos.

A redução unidimensional por Kronig e Penney<sup>(2)</sup>

do problema da descrição da rede periódica tem sido de grande utilidade através dos anos. Em nosso trabalho faremos uso, mais uma vez, desta representação, de grande valor pedagógico, para estudar a complicação adicional introduzida pelo efeito da presença do campo eletromagnético (radiação laser por exemplo). Embora constitua, em muitos aspectos, uma simplificação muito grande, a rede tipo Kronig-Penney (K-P), goza ainda hoje, mais de 50 anos após seu aparecimento, de muita popu-(39-45) laridade .Muito se pode aprender com este método simplificado do complexo problema de um elétron movendo-se num potencial periódico 3-d, que normalmente exige tratamento aproximado.

O mérito está em que como o modelo K-P é possível confrontar os resultados de uma solução exata, com os resultados de modelos aproximados<sup>(43)</sup> e assim confirmar sua valid<u>a</u> de, além de prover a possibilidade de análise física dos resu<u>l</u> tados de uma forma muito mais transparente.

O potencial K-P consiste de uma série de poços re tangulares, igualmente espaçados, onde cada poço representa o potencial "sentido" pelo elétron próximo aos pontos da rede, enquanto na região intersticial o potencial é nulo. Para melhor entendimento começaremos analizando, o elétron em um poço retangular isolado.

A solução deste problema é bem conhecida (46)



 $V < \begin{bmatrix} -V_{0} - c/2 < x < c/2 \\ 0 & |x| \le c/2 \end{bmatrix}$ (3.1)

Fazendo

e

$$\alpha^2 = \frac{-2^{\mathrm{m}\mathrm{E}}}{\hbar^2}$$
(3.2a)

$$\beta^2 = \frac{2m (E+V_0)}{\hbar^2}$$
(3.2b)

obtem-se:

$$\psi_{1}^{"} - \alpha^{2} \psi_{1} = 0 \qquad x \leq -c/2$$
  

$$\psi_{2}^{"} - \beta^{2} \psi_{2} = 0 \qquad -c/2 < x < c/2$$
  

$$\psi_{3}^{"} - \alpha^{2} \psi_{3} = 0 \qquad x > c/2$$

### Da solução destas equações vem:

 a) As auto-funções tem paridades definidas. O estado fundamen tal é par, o segundo é impar, e assim sucessivamente as fun ções de onda alternam suas paridades.

As funções de onda pares são:

$$\begin{split} \psi_{1}^{(p)} &= A_{p} e^{\alpha X} & x \leq -c/2 \\ \psi^{(p)} &= B_{p} \cos \beta x -c/2 < x < c/2 \\ \psi_{3}^{(p)} &= A_{p} e^{-\alpha X} & x \gg c/2 \\ e \text{ as impares são:} \\ \psi_{1}^{(i)} &= A_{i} e^{\alpha X} & x \leq -c/2 \\ \psi_{2}^{(i)} &= B_{i} \sin \beta x -c/2 < x < c/2 \\ \psi_{3}^{(i)} &= -A_{i} e^{-\alpha X} & x \gg c \\ Com A_{p} &= B_{p} e^{\alpha c/2} \cos (\beta c/2) \\ A_{i} &= -B_{i} e^{\alpha c/2} \sin (\beta c/2) \end{split}$$

$$(3.3b)$$

Com a normalização das funções de onda, obtem-se:

$$|B_{p}|^{-2} = \left(\frac{c}{2}\right) \left( \frac{1 + \cos \beta c}{\alpha c} + \frac{\sin \beta c}{\beta c} + 1 \right)$$
$$|B_{1}|^{-2} = \left(\frac{c}{2}\right) \left( \frac{1 - \cos \beta c}{\alpha c} - \frac{\sin \beta c}{\beta c} + 1 \right)$$

 b) Os autovalores de energia não são degenerados. O número de estado ligados e N+1 com:

$$\frac{N\pi}{2} < (\alpha^2 + \beta^2)^{1/2} \leq (N+1) - \frac{\pi}{2}$$

c) A imposição da continuidade de  $\psi \in \psi'$  em  $x = \frac{+}{c/2}$  resulta na seguinte eq transcendental:

$$tg(\beta c) = \frac{2\alpha\beta}{\beta^2 - \alpha^2}$$

Introduzindo E = -f V (3.4a) e  $\gamma = \frac{\beta c}{(1-f)^{1/2}}$  (3.4b)

onde  $0 \leq f \leq 1$  vem:

$$\alpha = \left(\begin{array}{c} \frac{2m V_{o}}{\hbar^{2}} \right)^{1/2} f^{1/2}$$
$$\beta = \left(\begin{array}{c} \frac{2m V_{o}}{\hbar^{2}} \\ \frac{-2m V_{o}}{\hbar^{2}} \end{array}\right) (1-f)^{1/2}$$

• o que nos leva a uma expressão de onde podemos obter os a<u>u</u> • tovalores de energia  $E = -f V_0$ , a saber:

$$tg(\gamma\sqrt{1-f}) = \frac{2[f(1-f)]^{1/2}}{1-2f}$$
(3.5)

Para uma largura do poço de 2<sup>A</sup>, calculamos, com auxílio do computador, os autovalores de energia para várias profundidades de poços. Os resultados estão dados na Tabela 3.1.

Vamos agora "formar" o sólido dispondo estes "áto mos" (cada poço isolado representa um átomo) num arranjo com constante de rede <u>a</u>. Para elétrons não interagentes V(x) é exatamente o potencial de Kronig-Penney.

	• F~& L.s	<u><u> - la A</u>, <u>J</u></u>		
PROFUNDIDADE DO POÇO (ev)	IL ESTADO Ligado (ev)	2º ESTADO Ligado (ev)	3º ESTADO LIGADO (av)	4º ESTADO Ligado (ov)
- 01	- 0,1 9 6 4 8	· · · · · ·		· · · · · ·
- 0 2	- 0,6 3 4 9 6		·	
0 4	- 1,85783		···· · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
- 0 6	- 3,3 1 9 5 5	······································		
- 0 8	- 4,9 1 1 4 8			
- 10	- 6,5 8 5 2 2	- 2,2 4 9 5 4		
-   2	- 8,3   4 9 7	- 0,36941		
- 1 4	- 1 0,0 8 5 3 8	- 1,0 2 7 8 3		
- 16	- 1 1,8 8 6 5 4	- 1,90675		
- 1 8	- 1 3,7 1 1 7 8	- 2,9 4 9 1 5		
- 2 0	- 1 5,5 5 6 2 8	- 4,1 1 7 1 3		
- 2 2	- 1 7,4   6 5 5	- 5,3 8 4 6 4		
- 2 4	- 1 9,2 8 9 9 4	- 6,73146		
- 2 6	- 2 1 , 1 7 4 4 1	- 8,14451		
- 2 8	- 2 3,0 6 8 3 4	- 9,6   2 5 6		
- 3 0	- 2 4,9 7 0 4 4	- 11,12718		
- 3 2	- 2 6,8 7 9 6 5	- 12,68165		
- 3 4	- 28,79511	- 14,27059		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
- 36	- 3 0,7 1 6 1 0	- 1 5 , 8 8 9 5 8	······································	······································
- 3 8	- 3 2 , 6 4 2 1 0	-   7,5 3 4 9 7	- 0,0 0 9 8 3	
- 4 0	- 34,57232	- 1 9,2 0 3 7 5	- 0,29815	
- 4 2	- 36,50660	- 2 0,8 9 3 3 3	- 0,86646	
- 4 4	- 3 8,44446	- 2 2,6 0 1 5 4	- 1,62465	
- 4 6	- 4 0, 3 8 5 5 7	- 2 4, 3 2 6 5 3	- 2,5 2 3 4 5	
- 4 8	- 4 2, 2 8 6 4 3	- 2 6, 0 6 6 6 7	- 3,5 3 2   0	
- 5 0	- 4 4 2 7 6 4 4	- 2 7 8 2 0 5 7	- 4,62974	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
- 5 2	- 4 6,2 2 5 7 2	- 29,58702	- 5,8 0 1 3 5	
- 5 4	- 4 8,1 7 7 3 0	- 3 1, 3 6 4 9 3	- 7,0 3 5 6 8	
- 5 6	- 5 0,1 3 2 4 3	- 33,15339	- 8,32401	······
- 5 8	- 5 2,0 8 6 6 6	- 34,95151	- 9,65509	
- 6 0	- 5 4, 0 4 4 1 4	- 36,75859	- 1 1,0 3 6 2 3	
- 6 2	- 5 6,0 0 3 3 1	- 38,57395	- 1 2,4 4 9 8 8	
- 6 4	- 5 7,9 6 4 0 7	- 4 0,3 9 7 0 0	- 1 3,8 9 6 4 5	
- 5 5	- 5 9,9 2 6 2 9	- 4 2,2 2 7 1 8	- 1 5, 3 7 2 6 8	······································
- 6 8	- 6 1 , 8 8 9 9 1	- 4 4,0 6 4 0 5	- 1 6, 8 7 5 7 6	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
- 7 0	- 6 3, 6 3 4 6 2	- 4 5,9 0 7 1 0	- 1 8,4 0 5 2 6	
- 7 2	- 65,204 5 5	- 4 7,7 5 5 9 9	- 19,95309	
- / 4	- 0 7,7 8 8 2 3	- 4 r, 6 1 0 3 4	- 21,52540	
- 7 6	- 6 9,7 5 6 5 8	-51,46981	- 2 5,1 1 2 5 6	······································
<u> </u>	7 7 6 9 6 7 0	- 3 3,3 3 4 1 V	2 4 ,7 1 9 1 4	
- 8 2	-7566755	- 5 7 0 7 6 0 6	- 2 0, 3 4 1 0 0	
- 0 2	7767967		- 2 7, 3 7 3 5 6	
- 8 6	-7961260	- 60 8 3 4 2 4	- 6 3,0 3 1 6 3	
- 8 A	- 8   5 8 6 3 3	- 6 2 7 1 A A 7	- 3 7 9 7 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9 9	- 0 5 4 3 2 3
- 9 0	- 8 3 5 6 0 7 9	6460695	- 3466114	- 0, 0 4 5 6 6
_ 0 7	- 95 53 50 6	66400 * 0	- 26 26 00 0	_ 1 0 0 7 7 6
- 9 4	- 87,51180	- 68.39276	- 38,06934	- 291496
		7 0 0 0 0 1 7	* 0 * 0 5 0 5	
. 9 6	- 0 7,4 6 8 2 7	- 7 2 1 9 0 1 7	- 3 9,7 8 8 0 2	<u>- 5,9 2 5 5 7</u>
		<u> </u>		

TABELA, 3.1



Em um período temos o potencial

$$V(x) = 0$$
  $0 < x \le b$   
 $V(x) = -V_0$   $b < x < a$  (3.6)

As autofunções são soluções da equação de Schroedinger:

 $\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}$  [E - V(x)]  $\psi = 0$ 

Para um potencial periódico, V(x) = V(x + na), as fun ções tem a forma de funções de Bloch:

$$\psi_{\vec{K}}(\mathbf{x}) = \mathbf{e}^{\mathbf{i}\vec{K}\mathbf{x}} \quad \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (3.7)$$

 $\begin{array}{cc} \operatorname{com} & u_{+}(x + na) = u_{+}(x) \\ k & k \end{array}$ 

Note-se que n é interno e nax é um vetor de rede unidimensional.

A energia E(K) obtem-se resolvendo a equação secular que resulta de exigir-se que  $\psi_{\perp}$   $\psi_{\perp}$  sejam continuas nos k k

pontos de descontinuidade do potencial (14).

### A equação transcendental resultante é:

 $\frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \operatorname{senh} (\alpha b) \operatorname{sen} (\beta c) + \cosh (\alpha b) \cos (\beta c) = \cos (\kappa a) \quad (3.8)$ 

onde  $\alpha \in \beta$  são, os mesmos do caso anterior e b=a-c.

Pondo E = 
$$-fV_{o}$$
 e  $\gamma = \left(\frac{2mV_{o}}{\hbar^{2}}\right)^{1/2}c$   

$$= > \left\langle \begin{array}{c} \alpha = \frac{\gamma f^{1/2}}{c} \\ \beta = \frac{\gamma(1-f)^{1/2}}{c} \end{array}\right\rangle$$

e assim: F(f)=cos Ka

$$F(f) = \left(\frac{2 f-1}{2[f(1-f)]^{1/2}}\right) \operatorname{senh} \frac{\gamma \mathrm{bf}^{1/2}}{c} \operatorname{sen} \gamma (1-f)^{1/2}$$
$$- \cosh\left(\frac{\gamma \mathrm{b} f^{1/2}}{c}\right) \cos \gamma (1-f)^{1/2}$$
(3.9)

Como já dissemos no Capítulo I, os valores fisica mente aceitáveis para K são reais, o que implica que  $|F(f)| \leq 1|$ . Como F(f) é oscilante ela pode interceptar os l<u>i</u> mites  $\pm 1$  mais de uma vez dependendo dos valores de V<sub>o</sub>, c, a. Os valores permitidos de f- e portanto de E- podem ser determinados representando graficamente F(f) e verificando os valo res de f que dão F entre  $\pm 1$ . O valor de K é dado por (arc cos F(f))/a, e assim estabelecem-se pares de valores K e E(K). Podemos, assim, obter a estrutura de bandas do sól<u>i</u>

do, e construir o gráfico E(K) vs.K, tomando, por exemplo,  $c = 2\Lambda$ ,  $V_{O} = 50 \text{ eV}$ , a/c = 1,2; 1,4; 1,6; 1,8; 2,0; 2,2; 2,4;2,6; 2,8. Os resultados estão apresentados nas Figuras 3.1.a; 3.1.b;; 3.1.c; 3.1.d. Para por em evidência o comportamento da largura da banda a medida que se faz crescer a razão a/c, entre o espaçamento na rede e a largura do poço, que significa considerar a distância interatômica grande comparada com dimensões atômicas. Apresentamos os resultados gráfico no (Fig. 3.2) dos valores extremos de energias permitidas, em cada banda em função de a/c. Note-se que a/c indo para  $\infty$  (a  $\rightarrow \infty$ ), as bandas se reduzem exatamente aos níveis eletrônicos, num poço isolado.

Х

REDE



Fig. 3.1 - Estrutura de banda para um sólido de Kronig-Penney onde V = - 50 eV, C=2,0 Å. Parâmetro de rede: a)2,4 Å; b) 3,2 Å; c) 4,0 Å; d)5,6.



39

Fig. 3.2 - Largura de banda para um sólido de Kronig-Penney

### III.a.2 - Modelo de Kronig-Penney em Presença de um Laser Intenso

Apliquemos um campo de laser na direção do vetor da rede recíproca (K<sub>x</sub>) do nosso cristal unidimensional. O hamiltoniano serã, então:

$$\hat{H}_{c} = \frac{1}{2m} \left[ \hat{P}_{i} + \frac{e}{C} \vec{A}(t) \right]^{2} + V_{i}(x)$$
 (3.10)

Suponhamos que a intensidade do laser é grande de modo que não podemos usar os métodos perturbativos. Suponhamos, ainda, que a freqüência é tal que o cristal seja transparente ao laser. Assim, usaremos a metodologia desenvolvida no Capítulo II, que consiste em remover a dependência do termo de energia cinética no campo eletromagnético e transferi-la para o termo de energia potencial <sup>(38)</sup>.

Após a transformação unitária de Henneberger-Kramer, e o cálculo da média temporal do potencial distorcido pelo laser, obtemos um novo hamiltoniano:

$$\tilde{H}_{c} = -\frac{1}{2m} \hat{P} + \tilde{V} (x)$$
 (3.11)

onde  $V(x) = J(G_a) V(x)$ , onde a notação e as aproximações en volvidas são as mesmas feitas no Capítulo II.

Podemos,agora, calcular as modificações na estrutura de banda devido a presença do laser, pois a única diferença entre o hamiltoniano do sólido em presença do laser, e do sólido na ausência de campo é o potencial  $\tilde{V}(x)$ , que corre<u>s</u> ponde a média temporal do potencial distorcido pelo laser  $\tilde{V}(x - \delta(t))$ .

### Assim, a equação transcendental modificada será:

$$F(f) = \left\{ \frac{2f - 1}{2[f(1-f)]^{1/2}} \right\} \operatorname{senh} \left[ \frac{\tilde{\gamma}b f^{1/2}}{c} \right] \operatorname{sen} \tilde{\gamma} (1-f)^{1/2} + \operatorname{cosh} \left( \frac{\tilde{\gamma} b f^{1/2}}{c} \right) \cos \tilde{\gamma} (1-f)^{1/2} = \cos \mathrm{Ka}$$
  
+  $\cosh \left[ \frac{\tilde{\gamma} b f^{1/2}}{c} \right] \cos \tilde{\gamma} (1-f)^{1/2} = \cos \mathrm{Ka}$   
onde  $\tilde{\gamma} = \left[ \frac{2m \tilde{v}_{o}}{f^{2}} \right]^{1/2}$  (3.12)

Utilizando um programa de computador que desenvo<u>l</u> vemos para resolver esta equação, obtivemos a estrutura de bandas, e a variação do gap, para diversos valores de intensidade de campo. Na Fig. 3.3 e na Fig. 3.4 estão representadas as modificações do "gap" para vários valores do parâmetro de intensidade ( $G_x a_\delta$ ) = 0,05; 0,1; 0,15 ... 1,0).

Podemos observar a diminuição do gap com o aumento da intensidade.

### III.b - Aproximação do Elétron Quase-Livre

### III.b.l - Na Ausência de Campo

Nesta aproximação, considera-se o potencial peri<u>ó</u> dico como uma perturbação do gás de elétrons livres. Nestas condições, os elétrons mais internos tem seus níveis eletrônicos pouco modificados, pois o potencial a que eles estão submetidos é essencialmente o potencial atômico. Os elétrons i<u>n</u> ternos se distribuem de maneira tal que o potencial efetivo do caroço (núcleo + elétrons internos) é pequeno. Assim o poten-





### BANDA PROIBIDA (GAP) X INTENSIDADE DO LASER ( $G_X q_y$ )

FiG. 3.4

cial a que ficam submetidos os elétrons de valência pode ser considerado fraco, ou seja a energia potencial de interação é muito pequena comparada a energia total dos elétrons de va lência. O hamiltoniano será:  $\hat{H} = -\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)$  onde V(r) é um potencial fraco.

Consideremos um cristal de dimensões:  $l_x = (M-1)a_x$ ,  $l_y = (N-1)a_y$ ,  $l_z = (R-1)a_z$  onde  $a_x$ ,  $a_y$ ,  $a_z$  são as constantes da rede (M,N e R) são números internos que representam o número de átomos nas direções x, y, z respectivamente.

Aplicaremos, agora, a teoria de perturbação para encontrar a estrutura de banda dos elétrons de valência. As autofunções não-perturbadas, já normalizadas, para os elétrons são:

$$\psi_{0, +\vec{k}} = \frac{1}{(\ell_x \ \ell_y \ \ell_z)} \mu_2 e^{i \vec{K} \cdot \vec{r}}$$
 (3.13a)

$$\psi_{0, -\vec{k}} = \frac{1}{(l_x l_y l_2)} \frac{1}{1/2} e^{-i \vec{k} \cdot \vec{r}}$$
 (3.13b)

A energia de ordem zero, é a energia do gás de elétrons livres (Modelo de Sommerfeld) :  $E_0 = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$ .

A energia de primeira ordem, é determinada pela equação secular:

$$\langle \psi_{0,+\vec{K}} | V(\mathbf{r}) | \psi_{0,+\vec{K}} \rangle - E \langle \psi_{0,+\vec{K}} | V(\mathbf{r}) | \psi_{0,-\vec{K}} \rangle = 0$$

$$\langle \psi_{0,-\vec{K}} | V(\mathbf{r}) | \psi_{0,+\vec{K}} \rangle \langle \psi_{0,\vec{K}} | V(\mathbf{r}) | \psi_{0,-\vec{K}} \rangle - E$$

Devido as estruturas das autofunções de ordem ze

ro temos imediatamente que:

$$\langle \psi_{0,+\vec{K}} | V(\mathbf{r}) | \psi_{0,+\vec{K}} \rangle = \langle \psi_{0,-\vec{K}} | V(\mathbf{r}) | \psi_{0,-\vec{K}} \rangle =$$

 $= \frac{1}{\frac{1}{x^{2}y^{2}z}} \int_{0}^{t} \int_{0}^{t} \int_{0}^{t} V(r) dr$ 

Esta é a integral do potencial periódico sobre todo o cristal. Assim temos um potencial médio devido aos caroços iônicos e como podemos colocar a referência de potencial em qualquer ponto, escolhemos de tal maneira que  $\langle \psi_{0,+\vec{K}} | V(r) | \psi_{0,+\vec{K}} \rangle = 0$ Pelo fato de V(r) ser real temos:

$$\langle \psi_{0,+\vec{K}} | V(r) | \psi_{0,-\vec{K}} \rangle = \langle \psi_{0,-\vec{K}} | V(r) | \psi_{0,+\vec{K}} \rangle = V_{+\vec{K},-\vec{K}}$$

onđe

$$\nabla_{+\vec{K}}, -\vec{K} = \iiint \frac{1}{\ell_x \ell_y \ell_z} e^{+2i\vec{K}\cdot\vec{r}} V(r) dr \qquad (3.14)$$

A equação secular se tornará:

$$E^2 - |V_{+K, -K}|^2 = 0$$
 (3.15)

Supondo que V(r) possa ser expresso como o prod<u>u</u> to de três funções periódicas independentes, V(r)=V(x)V(y)V(z). Assim a integral (3.14) pode ser escrita:

$$V_{+K,-K} = \frac{1}{\frac{1}{k_{x} + y + k_{z}}} \int_{0}^{l_{x}} \int_{0}^{l_{y}} \int_{0}^{l_{z}} v(x) \int_{0}^{i2K_{x}} v(y) e^{\frac{i2K_{y}}{y}} v(z) \int_{0}^{i2K_{z}} dx dy dz$$

Por razões de simetria para resolver esta integral basta resolver a integral:

$$I(x) = \frac{1}{\ell_x} \int_0^{\ell_x} V(x) e^{i2K_x x} dx$$

Como cada cela unitária contribuiu igualmente para a integral acima, então:



Fazendo uma transformação de coordenada  $x = X + ma_x$  obtemos:

$$T(x) = \sum_{m=0}^{m=M-1} e^{i2K_{x}ma_{x}} \frac{1}{a_{x}} \int_{0}^{a_{x}} V(x_{+}ma_{x}) dx$$

Observe-se que o termo:

é a soma da série geométrica que é dada pelo quociente.

$$S_{M} = \frac{1 - e^{i2MK_{x}a_{x}}}{1 - e^{i2K_{x}a_{x}}}$$

Note que para  $K_{X X}^{a} = n\pi$  temos que  $S_{M}=M$ . Com isto podemos mos trar que:

$$\lim_{\substack{M \to \infty \\ K_{x}a_{x} = n\pi}} \frac{1}{M} \left\{ \begin{array}{c} \frac{12 \ M \ K_{x}a_{x}}{1-e} \\ \frac{1-e}{x^{2} \ K_{x}a_{x}} \end{array} \right\} = 1 \quad (3.16a)$$

também é fácil mostrar que:

$$\lim_{\substack{M \to \infty \\ \mathbf{X} \mathbf{x}^{\mathbf{x}} \mathbf{x}^{\neq n\pi}}} \frac{1}{\mathbf{M}} \left\{ \begin{array}{c} \frac{1 - \mathbf{X} \mathbf{X} \mathbf{x}}{\mathbf{X} \mathbf{x}} \\ \frac{1 - \mathbf{X} \mathbf{X} \mathbf{x}}{\mathbf{X} \mathbf{x}} \\ 1 - \mathbf{e} \end{array} \right\} = 0 \quad (3.16b)$$

Sabendo que o número de átomos em un sólido é extremamente grande e usando as expressões (3.15a) e (3.16<sup>b</sup>) obtemos: I(x) = 0 para  $K_x a_x \neq n\pi$  e  $I(x) = \frac{1}{a_x} \int_0^{x} \frac{i2K_x}{e} V(X) dX$ para  $K_x a_x = n\pi$  e  $V(x) = V(X + ma_x)$ Então o elemento de matriz  $V_{+\vec{K}, -\vec{K}}$  pode ser expresso como:  $V_{+K_7K} = \frac{1}{a_x a_y a_z} \int_0^{a_x} \int_0^{a_z} \int_0^{a_z} e^{inG_x} e^{inG_y z} V(x)V(y)V(z) dxdydz$ 

Podemos verificar que  $V_{+\vec{K},-\vec{K}} \stackrel{\neq}{=} a$  transformada de Fourier do potencial V(r). Assim o efeito do fraco potencial cristalino  $\stackrel{\neq}{=} o$  de quebrar a degenerescência da energia dos elétrons livres em dois níveis, para os pontos com coordenadas:

$$K_{x} = \frac{+}{a_{x}} \frac{n\pi}{y}, K_{y} = \frac{+}{a_{y}} \frac{n\pi}{y} e K_{z} = \frac{+}{a_{z}} \frac{n\pi}{z}$$

Nestes pontos a energia é dada por:

$$E = E_{O} + V_{G}$$
(3.17)

onde fizemos uma mudança de notação:

$$V_{+\vec{K}}, -\vec{K} \stackrel{\Rightarrow}{=} V_{\vec{G}}$$

Como podemos observar, que existem dois valores de energia para os pontos (n  $\pi/a_x$ , n  $\pi/a_y$ , n  $\pi/a_z$ ), cujos valores são  $|V_{\vec{G}}|$ abaixo e acima da parábola que dá a energia do elétron livre. Observamos, também, o surgimento de certos intervalos de energia, os quais são proibidos para os elétrons, que são ch<u>a</u> mados de bandas proibidas de energia (gap). E<sub>g</sub> = 2 |  $V_{\vec{G}}$ |(3.18)

### III.b.2 - Aproximação do Elétron Quase livre

### - Na Presença de um Laser Intenso

Suponhamos,agora, este sólido irradiado com um laser i<u>n</u> tenso, nas mesmas circunstâncias feitas anteriormente. Utiliza<u>n</u> do os resultados obtidos no Capítulo II, o hamiltoni<u>a</u> no modificado pela presença do laser é:

$$\hat{H}_{c} = \frac{\vec{p}}{2m} + \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{K}\vec{r}}$$
(3.19)

onde

$$V_{\overrightarrow{G}} = V_{\overrightarrow{G}} J_{O}(G_{\perp}a_{\delta})$$

e o gap modificado fica:

$$\overset{\mathsf{W}}{\mathsf{E}}_{g} = 2 \left| V_{\overrightarrow{\mathsf{G}}} J_{\mathsf{O}}(\mathsf{G}_{\bot} \mathsf{a}_{\delta}) \right| = \mathsf{E}_{g} \left| J_{\mathsf{O}}(\mathsf{G}_{\bot} \mathsf{a}_{\delta}) \right|$$
 (3.20)

Como a função de Bessel de ordem zero é sempre menor que l a expressão acima prediz um estreitamento da banda proibida<sup>(36)</sup>.

#### CAPÍTULO IV

### ABSORÇÃO ÓPTICA EM SÓLIDO: EFEITO DA PRESENÇA DE UM LASER INTENSO

# IV.a - <u>Considerações Gerais sobre a Absorção de Luz por um Sólido</u> IV.a.l - <u>Introdução</u>

Como previmos nos capítulos anteriores, a prese<u>n</u> ça de um laser intenso, modifica a estrutura de banda de um sólido. Neste capítulo investigaremos como estas modificações afetam a massa efetiva e o coeficiente de absorção óptica de um sólido.

O processo básico de absorção reflete, de uma maneira direta, um dos muitos fenômenos de interação de luz COM a matéria, especificamente, interação entre fótos, elétrons e átomos num semicondutor. As complexidades de um tratamento de primeiros princípios são notáveis e logo fugimos da simpli cidade básica de um cristal perfeito a baixas temperaturas para mergulharmos em efeitos os mais complexos, causados pela presença de excitons e seus complexos, polaritons, defeitos e impurezas, etc., levando a uma diversidade de processos que mediam a absorção da luz, na interação elétron-foton, com ou sem a "assistência" de fonons.

Já do ponto de vista experimental temos a espectroscopia produzindo dados capazes de revelar enorme riqueza de informações sobre processos físicos envolvendo absorção/<u>e</u> missão de radiação. Por exemplo, a posição de um pico de emi<u>s</u> são ou absorção revela a energia que separa os níveis entre os quais se dá a interação. Já a menor energia de foton para o qual se começa a perceber estrutura espectral marca o limiar de uma classe de transições, ao passo que a distribuição de intensidades espectrais dá uma medida das probabilidades de transição envolvidas e/ou da distribuição de estados.

### IV.a.2- Absorção Ótica

Um semicondutor onde os portadores livres se orig<u>i</u> nam somente da banda de valência é um semicondutor é intrínseco.

Há várias formas de se promover a transferência de um elétron da banda de valência (BV) para a banda de condução (BC). Uma delas é irradiando com luz o material. O elétron absorve um ou mais fóton e passa para banda de condução. Este processo é conhecido como absorção ótica. No que segue consideraremos apenas processos a um fóton.

Existem quatro tipos fundamentais de absorção que podem ocorrer em um semicondutor intrínseco. São elas: absorção intrínseca, excitônica, por portadores livres e abso<u>r</u> ção de luz pela rede cristalina.

O coeficiente de proporcionalidade α, que expres sa a quantidade de energia absorvida de um feixe de intensidade unitária num intervalo dx é o coeficiente de absorção:

$$\alpha = \frac{1}{I} \frac{dI}{dx}$$
(4.1)

A dependência do coeficiente de absorção, com relação à frequência v do fóton, representa o espectro de absorção da substância.

Na interação foton-elétron duas leis têm que ser respeitadas:

- a conservação de energia:  $E_f = E_i + hv$  (4.2) onde  $E_f \in a$  energia final do elétron,  $E_i$  energia inicial, hv a energia do fóton

- a conservação do momento  $\vec{p}_f = \vec{p}_i + \frac{h}{\lambda} \hat{K}$  (4.3) onde  $\vec{p}_f$  é o momento final do elétron  $\vec{p}$  o momento inicial e  $\hat{K}h/\lambda$  é o momento do fóton ( $\hat{K}$  é o vetor de onda unitário).

Na chamada absorção intrinseca o semicondutor absorve um fóton e um elétron é excitado da banda de valência para banda de condução.

Dentre as absorções intrinsecas temos as transições diretas, onde o momento do foton  $(h/\lambda)$  é aproximadamente mil vezes menor que o momento do elétron  $\tilde{h}/a$ . Quando um el<u>é</u> tron interage apenas com o foton seu vetor de onda praticamente não varia. Falamos, neste caso, de transições diretas.

Considerando o caso em que as bandas tem simetria esférica, e que o máximo da banda de valência ocorre para o mesmo vetor de onda em que ocorre o mínimo da banda de cond<u>u</u> ção, temos:



$$E_{f} = E_{i} + \hbar\omega$$

$$E_{f} = E_{c} + \frac{(hK)^{2}}{2m_{c}}$$

$$E_{i} = E_{v} - \frac{(\hbar K)^{2}}{2m_{v}}$$

$$E_{g} = E_{c} - E_{v}$$

. IV.b.: Coeficiente de Absorção (formulado assumindo o modelo de Kronig-Penney para o sólido)

Pode-se mostrar <sup>(47)</sup> que, passando-se apropriadamente o limite, o potencial de Krönig-Penney é equivalen te ao "pente de Dirac" <sup>(48)</sup>, isto é um potencial representado por uma sucessão regular de "deltas" de Dirac. O limite é feito de forma a manter constante o produto da altura  $V_o$  (que se faz tender a  $\infty$ ) e a largura c (que se faz tender a z<u>e</u> ro) da barreira no potencial KP, isto é:

$$\lim_{O} V_{O}^{C} = D \text{ (constante)} \tag{4.4}$$
$$V_{O}^{A} \approx 0$$

Nesta representação equivalente podemos expressar matematicamente o potencial KP. Utilizando funções delta de Dirac, mantendo a área V<sub>l</sub>a, sob a barreira, como um parâmetro, como segue :

$$V(\mathbf{r}) = -V_{\mathbf{a}} \sum_{\mathbf{M},\mathbf{N},\mathbf{R}} [\delta(\mathbf{X}-\mathbf{M}\mathbf{a}) + \delta(\mathbf{y}-\mathbf{N}\mathbf{a}) + \delta(\mathbf{z}-\mathbf{R}\mathbf{a})]$$
(4.5)

Neste potencial os elétrons sentem uma força atrativa  $(V_1 > 0)$ infinita nos pontos da rede, e uma força nulafora deles. A Eq. Schroedinger neste caso, é: (cristal cúbico).

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + \left[-\nabla_{i} a \sum_{i=1,2,3} \delta_i (X_i - h_i a) - E\right] \psi(\vec{r}) = 0$$

onde fizemos uma mudança de notação:  $x + x_1, y + x_2, z + x_3$ 

$$M \rightarrow h_1$$
,  $N \rightarrow h_2$ ;  $R \rightarrow h_3$ 

O potencial é separável:

$$V(r) = V(x_1) + V(x_2) + V(x_3)$$

o que implica:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_1(\mathbf{x}_1) \psi_2(\mathbf{x}_2) \psi_3(\mathbf{x}_3)$$
 (4.6) e  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_1 + \mathbf{E}_2 + \mathbf{E}_3$  (4.7)

com

$$\frac{d^{2}}{dx_{i}^{2}} \psi_{i}(x_{i}) + \frac{2m}{\hbar^{2}} \left[ E_{i} + V_{l}a \sum_{h_{i}} \delta(x_{i} - h_{i}a) \right] \psi_{i}(x) = 0,$$

$$i = 1, 2, 3$$
(4.8)

Resolvendo esta equação obtêm-se a função de onda $\psi(x_i)$  que, nor malizada, é:<sup>(45)</sup>:

$$\psi(\mathbf{x}_{i}) = \frac{e^{iK_{i}(\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}'_{i})} e^{iK_{i}a} e^{iK_{i}(\mathbf{x}_{i} - \mathbf{x}'_{i})} e^{iK_{i}a} e^{iK_$$

onde  $x'_{i} = x_{i} - a [x/a]$ 

onde [ x/a ] significa a parte inteira de x/a. Impondo as condições de contorno apropriadas em x = x', obtemos a equação transcendental:

onde 
$$\alpha_{i}^{2} = \frac{2m}{\pi^{2}} E_{i}$$

Note-se que esta equação corresponde ao limite (4.4) da equ<u>a</u> ção 3.8 do Capítulo III, possibilita calcular-se a estrutura de bandas do sólido neste modelo, isto é, a obtenção da relação de dispersão E(K).

### IV.b.l Cálculo da Massa Efetiva

Para calcular o coeficiente de absorção precisamos primeiramente obter a massa efetiva.

Na formulação da massa efetiva o movimento do elé tron em um potencial periódico, pode ser descrito como se o elétron fosse livre porém dotado de uma massa modificada m\* dependente da energia. No caso de um potencial anisotrópico esta massa é na verdade um tensor com componentes dados por:

$$\frac{1}{\binom{m}{j}} = \frac{1}{n^2} \frac{\partial^2}{\partial \kappa_i \partial \kappa_j} (E(\vec{k}))$$
(4.11)

Pela forma como a energia depende dos K<sub>i</sub>(eq.4.7 e eq. 4.10) o tensor de massa efetiva em nosso caso é diagonal, e, pela simetria do potencial, estes elementos diagonais são idênticos. Sendo assim, a massa efetiva pode ser expressa com o escalar:

$$m^{*} = \tilde{n}^{2} \left[ \frac{d^{2}}{d\kappa^{2}} E_{i}(\kappa_{i}) \right]^{-1}$$
 (4.12)

Fazendo a mudança de variável  $v = 2 m E_i / \hbar^2$ , che-

(4.11)

gamos as seguintes relações:

$$m^* = 2m \left[\frac{d^2v}{dK^2}\right]^{-1}$$
 (4.13)

e cos K a = T(v)  
onde T(v) = cos(v<sup>1/2</sup>a) - v<sup>1/2</sup>(
$$\frac{mV_1 a}{n^2}$$
) sen (v<sup>1/2</sup>a)

Podemos agora usar o fato que em K=0 (i.e. alternadamente, no fundo da la. banda, topo da segunda, etc..)  $\frac{dE}{dK} = 0 \quad \text{implica} \quad \frac{dv}{dK} = 0.$ 

Assim:

$$\frac{d}{dK} (\cos Ka) = \frac{dv}{dK} \frac{d}{dv} (T(v))$$

$$\frac{d^{2}}{dK^{2}} (\cos Ka) \Big|_{K=0} = \left(\frac{dv}{dK}\right)^{2} \frac{d^{2}}{dv^{2}} T(v) \Big|_{K=0} + K=0$$

+ 
$$\frac{d^2 v}{d\kappa^2} - \frac{d}{d\nu} T(v) = K = 0$$

O primeiro termo do lado direito da expressão acima se anula  $\left(\frac{dv}{dK}\right) = 0$  em K=0) e assim temos:

$$-1 = \frac{d^2 v}{d\kappa^2} \frac{d}{d\nu} T(v) \longrightarrow \frac{d^2 v}{d\kappa^2} = \frac{-a^2}{\frac{dT(v)}{d\nu}}$$

logo

$$m^{\star}(K=0) = \frac{2m}{\begin{pmatrix} \frac{2}{\nu} \\ \frac{d}{\nu} \\ \frac{d}{\kappa^2} \end{pmatrix}_{K=0}} = \frac{-2m}{a^2} \frac{dT(\nu)}{d\nu}$$

ou seja:

$$\mathbf{m}^{\star}(\mathbf{K}=0) = \frac{\mathbf{m} \operatorname{sen}\alpha_{\mathbf{i}}a}{\alpha_{\mathbf{i}}a} \left[1 + \frac{\mathbf{m}\mathbf{V}_{\mathbf{i}}a}{\hbar\alpha_{\mathbf{i}}} - \frac{\mathbf{m}\mathbf{V}_{\mathbf{i}}}{\hbar\alpha_{\mathbf{i}}}\right]$$

$$(4.14)$$

## IV.b.2 - Coeficiente de Absorção no modelo de Kronig-Penney

Com a massa efetiva calculada acima podemos agora calcular o coeficiente de absorção associado a transições diretas que ocorrem perto de K=0.

Consideremos um sólido iluminado com um laser de baixa intensidade, polarizado, de frequência  $\omega_1$ , descrito pelo potencial vetor:

$$\vec{A}_{B}(\vec{r},t) = 2 \vec{A}_{OB} \cos (\vec{q}.\vec{r} - \omega_{l}t) =$$

$$= \vec{A}_{OB} \exp [i(\vec{q}.\vec{r} - \omega_{l}t)] + A_{OB}^{*} \exp [-i(\vec{q}.\vec{r} - \omega_{l}t)]$$

$$(4.15)$$

A escolha de calibre e tal que o potencial escalar é nulo e  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A}_{B} = 0$ 

Para um sistema de Nº elétrons, o hamiltoniano

de interação pode ser escrito <sup>(46)</sup>:

$$H' = \sum_{j=1}^{N} \frac{e_j}{m_j c} \vec{A}_B(\vec{r}_j, t) \cdot \hat{P}$$
(4.16)

A probabilidade de transição, por unidade de tem po, para um elétron da banda de valência (v) passar para ban da de condução (c) é dado por (46).

$$\frac{1}{t} P_{\mathbf{v},\mathbf{c}} = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 c \omega_1} I(\omega) \left| \int_{\mathbf{c},\vec{K}_c}^{\mathbf{v}} \exp(i\vec{q}.\vec{r}) \nabla U_{\mathbf{v}'\vec{K}_v} d^3 r \right|^2 x$$

$$x \quad \delta(\vec{k}_{v} - \vec{k}_{c}) \quad \delta(\hbar\omega_{1} - E_{c} + E_{v}) \qquad (4.17)$$

onde a notação é a mesma dos capítulos anteriores.

Sabendo-se que  $I(\omega_1) = \frac{A_{OB}^2 \omega_1^2}{2\pi c}$  e que, usando a aproximação de dipolo podemos fazer  $e^{i \cdot \vec{q} \cdot \vec{r}} \approx 1$ , a taxa de transição por unidade de volume, é obtida somando-se sobre todas as transições possíveis é dada por:

$$W_{v,c} = \frac{2\pi e^2}{m^2 c^2 (2\pi)^3} - \frac{2}{n} (A_{OB})^2 \int d^3 \vec{k}_v \left[ d^3 \vec{k}_c |M_{v,c}|^2 x \right]^2$$

$$\delta (\vec{k}_v - \vec{k}_c) \delta(\vec{n}\omega_1 - E_c + E_v)$$
(4.18)

onde

$$M_{v,c} = \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{3} \int_{cela} U_{c;\vec{k}_{c}}^{*} \xi.\vec{p} U_{v,\vec{k}v} d^{3}r$$

Aqui usamos o fato que a função de Bloch pode ser escrita na forma

$$\psi_{n\vec{k}} = e^{i.\vec{K}.\vec{r}}$$
  
 $\psi_{n\vec{k}} = e^{i.\vec{K}.\vec{r}}$  onde  $U_{n,\vec{k}}(\vec{r})$  tem a mesma pe-  
n, $\vec{K}$  n, $\vec{K}$  onde  $\vec{K} = 0$ ,  $E_c(\vec{K}_c) = E_v(\vec{K}_v)$  são  
ambas funções apenas  $|\vec{K}|$ , isto é, as superfícies de ener-  
gia, nesta região são essencialmente esféricas. Usando a apro

ximação da massa efetiva, podemos escrever, para K  $\stackrel{\sim}{\sim}$  0:

ambas

$$E_{c}(\vec{k}) = E_{c}(0) + \frac{\pi^{2}\kappa^{2}}{2m^{*}c}$$
$$E_{v}(\vec{k}) = E_{v}(0) + \frac{\pi^{2}k^{2}}{2m^{*}v}$$

onde m\* e m\* são as massas efetivas nas bandas de valê<u>n</u> cia e condução, respectivamente. Então:

$$E_{c}(\vec{K}) - E_{v}(\vec{K}) = E_{g} + \frac{\pi^{2}\kappa^{2}}{2\mu}$$
 (4.19)

onde E<sub>g</sub> é a largura da banda proibida de energia ("gap") para K=  $0 e \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m^* v} + \frac{1}{m^* c}$ (4.20)Usando a relação

$$\delta [f(K)] = \sum_{i} \left| \frac{df}{dK} \right|_{K_{i}}^{-1} \delta(K - K_{i}), \text{ com } f(K_{i}) = 0$$

A taxa de transição por unidade de volume ficará:

$$W_{v,c} = \frac{e^2 |\Lambda_{oB}|^2 (2\mu/\hbar^2)^{3/2} (\hbar\omega - E_q)}{\hbar\pi^2 m^2 c^2} \int |M_{v,c}|^2 d\Omega \quad \text{onde}$$

$$M_{v,c}(\vec{K}) = M_{v,c}(K_{o}, \Omega) e$$
$$K_{o} = \frac{2\mu}{\hbar} (\hbar\omega_{1} - E_{g})$$

Considerando uma rede cúbica simples e usando a função de onda dada na eq. (4.9), a expressão para a massa efetiva dada pela eq. (4.14), e, ainda o fato da onda eletromagnética ser linearmente polarizada na direção x, temos:

$$|\mathbf{M}_{\mathbf{v},\mathbf{c}}|^{2} = \frac{4\hbar^{2} \mathbf{m}^{2} \alpha_{\mathbf{v}} \alpha_{\mathbf{c}} (\cos \alpha_{\mathbf{c}} - \cos \alpha_{\mathbf{v}})^{2} \sin \kappa_{\mathbf{v}}}{\frac{4}{a} \mathbf{m}^{*} \mathbf{m}^{*}_{\mathbf{v},\mathbf{c}} (\alpha_{\mathbf{c}}^{2} - \alpha_{\mathbf{v}}^{2})^{2} \sin \alpha_{\mathbf{v}} a \sin \alpha_{\mathbf{c}} a}$$
(4.21)

Como para valores de K $\stackrel{\sim}{\sim}$ 0,

$$\operatorname{sen}^{2} \kappa_{v}^{a} \tilde{\kappa}_{v}^{2} \tilde{\kappa}_{v}^{2} = \kappa_{0}^{2} \tilde{\kappa}_{0}^{2} \cos^{2} \theta$$

Portanto

$$\left[ \begin{pmatrix} M_{v,c} \end{pmatrix}^{2} d\boldsymbol{a} = \frac{16\pi\hbar^{2} m^{2} \alpha_{v} \alpha_{c} (\cos\alpha_{c}a - \cos\alpha_{v}a)^{2} (2\mu/\hbar^{2}) (\hbar\omega_{c}-E_{q})}{3a^{2} m_{v} m_{c} (\alpha_{c}^{2} - \alpha_{v}^{2})^{2} \sin\alpha_{v} a \sin\alpha_{c} a} \right]$$

O coeficiente de absorção é dado por:

$$\alpha = P_{av} / I(\omega_1)$$

onde  $P_{av}$  é a potência absorvida por unidade de volume e  $I(\omega_1)$  é a potência incidente por unidade área deste volume.

Temos que:

 $P_{av} = \hbar \omega_1 W_{vc} e I(\omega_1) = \frac{\eta \omega_1^2 |A_{ob}|^2}{2\pi c}, \text{ onde } \eta \notin o$ indice de refração do cristal, e onde se toma a permeabil<u>i</u> dade magnética do semicondutor igual a l. Assim o coeficien te de absorção para K ~ 0, em função  $E_g, \alpha_v, \alpha_c, m_v^*, m_c^*;$ que só dependem de V<sub>1</sub> e a,  $\tilde{e}: (45)$ :

$$\alpha_{abs}(\omega_{1}) = \frac{32e^{2}\hbar^{2}\alpha_{v}\alpha_{c}(\cos\alpha_{c}a - \cos\alpha_{v}a)^{2}(2\mu/\hbar^{2})^{2}(h\omega_{1} - E_{q})^{3/2}}{3\omega_{1}m_{v}c} (\alpha_{c}^{2} - \alpha_{v}^{2})^{2} sen\alpha_{c}a sen\alpha_{v}a}$$

$$(4.22)$$

### IV.b.3-Efeitos de um Campo de Laser Intenso sobre a Massa Efetiva e o Coeficiente de Absorção

Consideremos, agora, este sólido sendo irradi<u>a</u> do com um laser intenso, circularmente polarizado com freqüência u tal que, como nos capítulos anteriores, podemos fazer uso da aproximação de dipolo.

Com base nos resultados obtidos no Capítulo II,os efeitos do laser sobre o sólido implicam na substituição do potencial cristalino V(r) por um potencial efetivo ( $\tilde{V}(r)$ ). De acordo com a eq. (2.9) tem-se

$$\tilde{V}(r) = - \tilde{V}_{1}a \sum_{\substack{h_{1}, h_{2}, h_{3}}} [\delta(x_{1}-h_{1}a)+\delta(x_{2}-h_{2}a)+\delta(x_{3}-h_{3}a)]$$
(4.23)

onde  $\tilde{v}_1 = J_0(G_1a_\delta)v_1$ .

Portanto, com base neste resultado e na Eq.(4.14) a massa efetiva modificada pelo laser, para ( K ~ 0), fica expressa por:

$$m^{*} = \frac{m \operatorname{sen\tilde{\alpha}a}}{\tilde{\alpha}a} \left[1 + \frac{mV_{1}a \operatorname{cot}\tilde{\alpha}a}{\hbar^{2}\tilde{\alpha}} - \frac{mV_{1}}{\hbar^{2}\tilde{\alpha}^{2}}\right] \qquad (4.24)$$

Na Fig. 4.1 esta representada m\*(K=0) em função da intensidade do laser.

Analogamente, temos para o coeficiente de absorção modificado pelo laser intenso:

$$\tilde{\alpha}_{abs}(W_{1}) = \frac{32e^{2}\hbar^{2}\tilde{\alpha}_{v}\tilde{\alpha}_{c}(\cos\tilde{\alpha}_{c}a - \cos\tilde{\alpha}_{v}a)^{2}(2\tilde{\mu}/\hbar^{2})^{5/2}(h\omega_{1}-\tilde{E}_{g})^{3/2}}{3\omega_{1}\tilde{m}_{v}^{*}\tilde{m}_{c}^{*} - \eta\pi a^{2}(\tilde{\alpha}_{c}^{2}-\tilde{\alpha}_{v}^{2})^{2}sen\tilde{\alpha}_{v}a sen\tilde{\alpha}_{c}a}$$

$$(4.25)$$

Podemos,agora, separar a Eq. 4.25 em uma parte que depende (B(Ga $_{\delta}$ )) da intensidade do laser, e outra que independe ( $_{\alpha_{ref}}$ ). Assim:

$$\alpha_{abs}(\omega_1) = \alpha_{ref} B(Ga_{\delta})$$
 (4.26)

onde

$$\alpha_{\text{ref}} = \frac{32e^{2}h^{3}E_{q}^{1/2}}{3c^{\eta\pi}m^{2}} \times (\frac{2m}{h^{2}})^{5/2}$$

е

$$B(Ga_{\delta}) = \frac{\tilde{\alpha}_{v}\tilde{\alpha}_{c}}{\tilde{M}_{1}\tilde{M}_{2}} \frac{(\cos\tilde{\alpha}_{c}a - \cos\tilde{\alpha}_{v}a)^{2} \tilde{E}M^{5/2} \tilde{E}_{g}^{1/2} (D-1)^{3/2}}{\tilde{M}_{1}\tilde{M}_{2}a^{2} (\tilde{\alpha}_{c}^{2} - \alpha_{v}^{2})^{2} \operatorname{sen}\tilde{\alpha}_{v}a \operatorname{sen}\tilde{\alpha}_{c}a \frac{E_{g}^{1/2}}{E_{g}}D}$$

onde 
$$\tilde{M}_1 = \frac{\tilde{m}_1^*}{m}$$
,  $\tilde{M}_2 = \frac{\tilde{m}_2^*}{m}$ 

$$\tilde{EM} = \frac{M_1 M_2}{\tilde{M}_1 + \tilde{M}_2}$$
 e  $D = \frac{K\omega}{\tilde{E}}$ 



Fig.4.1 - Massa efetiva eletrônica em K=0 nas quatro primeiras ban das de energia para um sólido de Kronig-Penney (3-d) onde V<sub>1</sub>=8ev, a=2,0 Å. (a) la. banda, (b) 2a. banda, (c) 3a. banda, (d) 4a. banda.

Finalmente, pudemos calcular o coeficiente de absorção devido a absorção de um fóton, numa transição direta, de um sólido tri-dimensional de Kronig-Penney, quando este é irradiado por dois lasers, um intenso que modifica a estrutura de banda do sólido e outro de baixa intensidade, com fótons de energias próximas da largura da banda proibida.

Na Fig. 4.2 estão os resultados da modificação causada pelo efeito do laser intenso sobre o coeficiente de a<u>b</u> sorção para três diferentes intensidades.

Podemos, verificar o deslocamento do limiar de ab sorção para energias cada vez menores a medida que aumenta a intensidade do laser forte. Note, também, que nas imediações do limiar de absorção, e em regiões onde ocorra absorção tanto em presença como na ausência de campo um eletromagnético, a absorção de um fóton cresce com a intensidade do laser forte.



FIG. 4.2
## CAPÍTULO V

# CONCLUSÕES

Nesta Tese procuramos por em evidência as modifica ções na estrutura de banda e suas consequências para o comportamento óptico e eletrônico de um sólido de Kronig-Penney quando submetido à ação de um campo de radiação intenso <sup>(49)</sup>.

Embora passível de crítica como uma descrição sem muita conexão com sólidos reais, a formulação unidimensional ou a generalização tri-dimensional do modelo de Kronig-Penney tem conquistado reconhecido valor pedagógico e científico em problemas envolvendo sólidos cristalinos, que vão além da mera obtenção das bandas de energia. Esta constatação<sup>(39-45)</sup>tornou-se mais uma vez evidente em nosso trabalho onde pudemos tirar van tagem do conhecimento da solução exata para este modelo, a fim de avaliar os efeitos da presença de um campo de laser intenso sobre a estrutura de bandas de um sólido de Kronig-Penney e suas implicações sobre a massa efetiva eletrônica neste sólido e sobre o seu coeficiente de absorção óptico, associado ao processo de absorção de um foton, numa transição direta.

Estes efeitos foram tratados dentro de uma formulação relativamente simples. Nossa metodologia consistiu, basicamente, na exploração de uma transformação unitária, através da qual a dependência, no campo de laser, do termo de ener gia cinética é transferida para o termo de energia potencial. Trabalhando, em seguida, com a média temporal deste potencial modificado pelo laser, conseguimos parametrizar o potencial cristalino em função da intensidade do laser. Pudemos, assim, prever deslocamentos nas bandas de energia (Fig. 3.3), e, ainda, a diminuição do"gap" (Figs. 3.3 e 3.4)em função aumento da intensi dade do campo de laser. Estes resultados foram aplicados ao cálculo da massa efetiva, nas proximidades do fundo da banda. Resultou que, com o aumento da intensidade do laser, e a massa eefetiva diminue (fig. (41))o que se compreende uma vez que o campo intenso determina uma redução do potencial cristalino efetivo  $(\tilde{V}_0)$ , tanto maior quanto mais intenso for o laser. Desta forma, o elétron "sente" uma força de interação menor, devido a rede cristalina, tornando-se em conseqüência, mais fácil acelerã-lo dentro da banda.

No cálculo da absorção óptica fica claramente evi denciado o desvio do limiar de absorção para energias cada vez menores a medida que a intensidade do campo cresce (Fig.4.2)co mo se esperava, à luz das modificações, já referidas, que a pre sença do laser intenso introduz na estrutura de bandas do sólido. Observa-se, também, que nas imediações do limiar dę absorção, em regiões onde se nota absorção, em presença e na ausência de campo, a absorção de um foton cresce com a intensidade do campo. Não podemos, no entanto, estender esta tendência para energias de foton muito acima do limiar devido as limitações presentes em nosso esquema de cálculo do coeficiente de absorção, com o modelo de Kronig-Penney.

Aplicamos a mesma metodologia no caso do elétron quase-livre, onde novamente comprovamos a presença do estreit<u>a</u> mento do "gap" com aumento da intensidade do laser.

Como já dissemos acima, o modelo de Kronig-Penney foi escolhido, entre outras razões, pelo fato de possuir uma solução analítica exata, permitindo, assim uma maior transparência dos resultados físicos com ele obtidos. Não obstante,

66

sua simplicidade impõe restrições interpretativas de certas previsões com ele obtidas, só podendo ser estendidas à um sólido real com as devidas cautelas de interpretação. Para citar um exemplo neste modelo o"gap"entre a primeira e a segunda ban revela-se menor que o "gap" entre a segunda e a tercei da ra banda. Uma outra previsão que devemos considerar com a devi da restrição, face a simplicidade do modelo, é o fato que as modificações relativas na forma e posição das bandas de energia (relação de dispersão) em função da intensidade do laser demonstram-se menos contundentes, para todas as bandas, do que se esperaria num sólido real, pelas presumíveis diferenças de acoplamento, com o campo eletromagnético, de elétrons da banda mais externa em relação aqueles numa banda mais interna. De fa to, esperar-se-ia que os elétrons nas bandas mais externas sen tissem mais a presença do campo eletromagnético. Assim, as ban das mais externas modificar-se-iam mais que as bandas internas. Não obstante, mesmo com estas restrições o uso do modelo de Kronig-Penney revelou-se mais uma vez de grande utilidade para nos permitir entender o comportamento de um sólido real, desta vez submetido à ação de um laser intenso.

67

### APÉNDICE A

# MÉTODO DE TRANSLAÇÃO ESPACIAL

Apresentaremos a seguir a transformação unitária, desenvolvida por Henneberger e Kramer, na qual se elimina a dependência do termo de energia cinética no campo de radiação, transformando-a para o termo de energia potencial.

A Eq. de Schroedinger para um sólido irradiado por um laser, na aproximação semiclássica e usando também a aproximação de dipolo:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}(\mathbf{\hat{P}} + \frac{\mathbf{e}}{c}\vec{A}(t))^2 + V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r},t) \qquad A.1$$

Propõe-se como solução da equação acima a função de onda:

$$\psi(\vec{r},t) = U\phi(\vec{r},t) \qquad A.2$$

com

$$U = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\delta}(t)\cdot \hat{P}} e^{i\eta(t)}$$
 A.3

onde

$$n(t) = \frac{-e^2}{2mc^2} \int^{T} A^2(t')dt'$$
 A.4

$$\vec{\delta}(t) = -\frac{e}{mc} \int_{-\infty}^{\tau} \vec{A}(t') dt'$$
 A.5

Note que  $U_i = e^{\pm i\vec{\delta}(t)\cdot\vec{P}/\hbar}$  é um operador de translação espacial :  $U_i f(\vec{r}) = f(\vec{r} - \vec{\delta}(t))$ , e ainda que :

$$\vec{\delta} = \frac{\partial \vec{\delta}}{\partial t} = -\frac{e}{mc} \vec{A}(t)$$
 A.6

$$\frac{\partial^2 \vec{\delta}}{\partial t^2} = - \frac{e}{mc} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \frac{e}{m} \vec{E}(t)$$
 A.7

Observe que  $\vec{\delta}(t)$   $\vec{\epsilon}$  o deslocamento clássico do centro de oscil<u>a</u> ção de um elétron livre em um campo de radiação  $\vec{E}(t)$ .

Substituindo  $\psi$  por U  $\phi$  na Eq. A.1, obtem-se:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[ U\phi(\vec{r},t) \right] = \left[ \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 + \frac{e}{2mc} \hat{P} \cdot \vec{A} + \frac{e}{2mc} \vec{A} \cdot \hat{P} + V(\vec{r}) \right] U\phi(r,t) \quad A.8$$

Desenvolvendo o lado esquerdo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U\phi(\vec{r},t) = i\hbar \left[U \frac{\partial\phi(\vec{r},t)}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial t}\phi(\vec{r},t)\right] =$$

$$= i\hbar \{ U \frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} + (e^{i\vec{\delta}(t)} \cdot \hat{P}/\hbar e^{i\eta(t)} (i\vec{\delta}(t) \frac{\hat{P}}{\hbar} + i\eta(t)) \phi(\vec{r},t) \}$$

Utilizando a Eq. A.6 e que:

$$\dot{\eta}(t) = \frac{\partial \eta(t)}{\partial t} = -\frac{e^2}{2mc^2 \pi} A^2(t)$$
 A.9

Assim obtemos:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[ U \phi(\vec{r}, t) \right] = i\hbar \left\{ U \frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} + U \right\} \left[ - \frac{ie\vec{A}(t)\vec{P}}{mch} - \frac{ie\vec{A}(t)\vec{P}}{mch} \right] = i\hbar \left\{ U \frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} + U \right\} \left[ - \frac{ie\vec{A}(t)\vec{P}}{mch} \right] = i\hbar \left\{ U \frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} + U \right\} \left[ - \frac{ie\vec{A}(t)\vec{P}}{mch} \right] = i\hbar \left\{ U \frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} + U \right\} \left[ - \frac{ie\vec{A}(t)\vec{P}}{mch} \right] = i\hbar \left\{ U \frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} + U \right\} \left[ - \frac{ie\vec{A}(t)\vec{P}}{mch} \right] = i\hbar \left\{ U \frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} + U \right\} \left[ - \frac{ie\vec{A}(t)\vec{P}}{mch} \right] = i\hbar \left\{ U \frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} + U \right\} \left[ - \frac{ie\vec{A}(t)\vec{P}}{mch} \right] = i\hbar \left\{ U \frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} + U \frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{mch} \right]$$

$$-\frac{ie^2}{2mc^2} \frac{\Lambda^2(t)}{\pi} ]\phi(\vec{r},t) \} \qquad A.10$$

69

Como U é função de  $\hat{P}$  e  $\vec{A}$ , ele comuta com  $\hat{P}$ , daí:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \{U\phi(\vec{r},t)\} = Ui\hbar \frac{\partial\phi(r,t)}{\partial t} + \left[\frac{e}{mc}\vec{A}(t)\cdot\vec{P} + \frac{e^2}{2mc^2}(A^2(t))\right] \cdot U\phi(\vec{r},t) \qquad A.11$$

Agora, desenvolvendo o lado direito da Eq. A.8, que pode ser simplificado notando que:

$$\hat{\mathbf{P}}.\vec{\mathbf{A}}\phi(\vec{\mathbf{r}},t) = -i\vec{\mathbf{n}}\vec{\mathbf{\nabla}}.(\vec{\mathbf{A}}\phi(\vec{\mathbf{r}},t)) = -i\vec{\mathbf{n}}(\vec{\mathbf{\nabla}}.\vec{\mathbf{A}})\phi(\vec{\mathbf{r}},t)$$

 $-\operatorname{Ain} \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, t) = -\operatorname{in} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \phi(\vec{r}, t) + \vec{A} \cdot \hat{P} \phi(\vec{r}, t)$ 

Escolhendo-se  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$  (calibre de Coulomb);

$$\hat{P}_{\cdot}\vec{A}\phi(\vec{r},t) = +\vec{A}_{\cdot}\hat{P}\phi(\vec{r},t) \qquad A.12$$

Assim o lado direito de Eq. A.8 se escreve:

$$\left[\frac{\hat{P}^{2}}{2m} + \frac{e}{mc}\vec{A}(t)\cdot\vec{P} + \frac{e^{2}}{2mc^{2}}\vec{A}^{2} + V(\vec{r})\right] U\phi \qquad A.13$$

Assim, a Eq. A.8 pode ser escrita como:

$$\operatorname{Uih} \frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \left[\frac{e}{mc} \vec{A}(t) \cdot \hat{P} + \frac{e^2}{2mc} A^2(t)\right] U \phi(\vec{r},t)$$

$$= \left[\frac{\hat{P}^{2}}{2m} + \frac{e}{mc}\vec{A}(t)\cdot\vec{P} + \frac{e^{2}}{2mc^{2}}\vec{A}^{2} + V(\vec{r})\right]U\phi(\vec{r},t) \qquad A.15$$

Assim temos:

$$U \{ih \ \frac{\partial \phi(\vec{r},t)}{\partial t}\} = \frac{\hat{p}^2}{2m} (U \ \phi(\vec{r},t)) + V(\vec{r})U \ \phi(\vec{r},t)$$
A.16

Multiplicando a Eq. A.16 por  $U^*$ , usando que  $U^* \in$  unitária  $(U^* U = 1 = UU^*)$ , obtem-se:

$$i\hbar \frac{\partial \phi(\vec{r},t)}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \phi(\vec{r},t) + \{\vec{U} \ \forall (\vec{r})U\} \phi(\vec{r},t) \qquad A.17$$

Calcularemos a seguir, o segundo termo do lado direito da Eq. A.17.

$$\mathbf{U}^{\dagger} \mathbf{V}(\vec{\mathbf{r}})\mathbf{U}^{\dagger}\phi(\vec{\mathbf{r}},t) = e^{-i\vec{\delta}(t)\hat{\mathbf{P}}}\mathbf{V}(\vec{\mathbf{r}})e^{i\vec{\delta}(t)\hat{\mathbf{P}}}e^{i\eta(t)}e^{-i\eta(t)}\phi(\vec{\mathbf{r}},t)$$

 $como e^{i\eta}e^{-i\eta} = 1$ 

$$\mathbf{U}^{*} \mathbf{V}(\vec{\mathbf{r}}) \mathbf{U} \boldsymbol{\phi}(\vec{\mathbf{r}}, t) = \mathbf{U}_{1}^{*} \mathbf{V}(\vec{\mathbf{r}}) \mathbf{U}_{1} \boldsymbol{\phi}(\vec{\mathbf{r}}, t)$$

Dada

$$g(\vec{r},t) = V(\vec{r})\phi(\vec{r},t)$$

$$U_{1}^{*}g(\dot{r},t) = g(\dot{r}-\dot{\delta}(t),t)$$

Assim

$$U_{1}^{*} \{V(\vec{r})\phi(\vec{r},t)\} = V(\vec{r}-\vec{\delta}(t))\phi(\vec{r}-\vec{\delta}(t), t)$$

e como

$$\begin{array}{l} U_{1}^{*} V(\vec{r}) U_{1} U_{1}^{*} \phi(\vec{r},t) &= U_{1}^{*} V(\vec{r}) U_{1} \phi(\vec{r}-\vec{\delta}(t),t) \\ \\ \rightarrow & U_{1}^{*} V(\vec{r}) U_{1} &= V(\vec{r}-\vec{\delta}(t)) \end{array}$$

- 72

Portanto

$$U^{*}V(\vec{r})U\phi(\vec{r},t) = V(\vec{r}-\vec{\delta}(t))\phi(\vec{r},t)$$

logo

$$i\hbar \frac{\partial \phi \mathbf{r}, t}{\partial t} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \phi(\vec{\mathbf{r}}, t) + V(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\delta}(t)) \phi(\vec{\mathbf{r}}, t)$$

que é a equação transformada, em que a dependência em  $\vec{A}(t)$  passou do termo de energia cinética para o termo de energia potencial.

#### REFERENCES

- 1 F. Bloch, Z. Physik <u>52</u>, 555 (1928).
- 2 R. de L. Kronig, W.G. Penney, Proc. Royal Soc. <u>A130</u>, 499 (1931).
- 3 J.D. Patterson, "Int. to the Theory of Solid State Physics", Cap. III, Addison Wesley Publ. Co. (1971).
- 4 E.I. Blount, Sol. St. Physics 13, 305 (1962).
- 5 E.P. Wigner e F. Seitz, Phys.Rev. <u>43</u>, 804 (1933).
- 6 J.C. Slater, Phys. Rev. <u>51</u>, 846 (1937).
- 7 J. Korringa, Physica <u>13</u>, 392 (1947); W. Kohn e N. Rostokev, Phys. Rev. <u>94</u>, 1111 (1954).
- 8 C. Herring, Phys.Rev. <u>57</u>, 1169 (1940).
- 9 J.I. Pankove, "Optical Processes in Semiconductors", Cap.III Dover Publ. Inc. (1971).
- 10 R. London, Proc. Phys. Soc. (London) 80, 952 (1962).
- 11 P.K. Sen., Phys. Stat. Sol. <u>b124</u>, 117 (1984).
- 12 V.G. Abashkin, A.M. Andriesh e V.V. Panomar, Sov. J.Q.EL. <u>12</u>, 1343 (1982).
- 13 S.A. Sapogov e V. P. Seminozhenko, Sol. St. Comm. <u>41</u>, 399 (1982).
- 14 G.N. Burlak e N. Ya. Kotsarenko, Sov. Phys Sol. St. <u>23</u> 1880 (1981).
- 15 A. Vaidyanathan, T. Walker, A.H. Guenther, S. Mitra e L. M. Narducci, Phys. Rev. B <u>21</u>, 743 (1980).
- 16 Λ. Vaidyanathan, Λ. Η. Guenter, S.S. Mitra, Phys. Rev. B <u>22</u> 6480 (1980).

- 17 S.L. Pyshkin, N.A. Ferdinan, S. I. Radautsan, V.A. Kovarsky, e E.V. V. tiu, Opto-Electronics, <u>2</u>, 245 (1970)
- 18 L.V. Keldish, Sov. Phys. JETP 20, 1307 (1965).
- 19 L.I. Glazman e D. Ya. Bunter, Sov. Phys. Semicond. <u>17</u>, 1239 (1983).
- 20 M.P. Lisitsa, N.R. Kulish e A.F. Maznichenko, Sov. Phys. Semicond. <u>17</u>, 45 (1983).
- 21 A. Vaidyanathan e A. H. Guenther, Phys. Stat. Sol. (b)<u>112</u>, K73 (1982).
- 22 Ya. G. Girshberg e N.N. Trunov, Sov. Phys. Solid State, 24, 1646 (1982).
- 23 L.I. Glazman, Sov. J. Low Temp. Phys 8, 307 (1982).
- 24 V.A. Pazdzerskil, Sov. Phys. Semicond. 16, 1222 (1982).
- 25 G.H. Sherman, Electro-opt. Syst. Des. 14, 50 (1982)
- 26 G.M. Shmelev, N. Q. Bau e R.N.H. Shon , Sov. Phys. J. 24, 674 (1981).
- 27 M.P. Lisitsa, N.R. Kulish e A.F. Maznicheko Sov. Phys. Semicond <u>15</u>, 857, (1981).
- 28 S.K. Avetisyan, É.M. Kazaryan, A.O. Melikyan, e R.Minasyan. Sov. Phys. Semicond. 15, 865 (1981).
- 29 É. M. Epshtein, Sov. Phys. Semicond. 15, 182 (1981)
- 30 V.A. Pazdzerskil e B.L. Revzin, Sov. Phys. Semicond <u>15</u>, 1048 (1981).
- 31 M. Wautelet e L. D. Laude, J. Phys. C: Solid State Phys. 12, 3149 (1979).
- 32 M. Wautelet e L. D. Laude, Phys. Stat. Solid (b) <u>89</u>, 275 (1978).

33 - N.V. Quang, Phys. Stat. Sol. (b) 90, 597 (1978).
34 - H. D. Jones, H. R. Reiss, Phys. Rev. (b) 16, 2466 (1977).
35 - N. Tzoar e J.I. Gersten, Phys. Rev. (b) 12, 1132 (1975).
36 - L.C. M.Miranda Sol. St. Comm. <u>45</u>, 783 (1983).

- 37 R.M.O. Galvão e L.C. M. Miranda, Phys. Rev. 28, 3593 (1983).
- 38 W.C. Henneberger, Phys. Rev. Lett. <u>21</u>, 838 (1969); H.A. Kramers, in Les Particules Elementaires. Proc. 8th Solvay Conference (ed. R. Stoops), Wiley, N. York (1950).
- 39 M. Avetic J. Phys (A) 14, 379 (1981).
- 40 B.A. Vogok , J. Appl. Phys, 52, 621 (1981).
- 41 P.D. Loly e A.A. Bahurmuz Physica 100B, 29,1980.
- 42 B. Sutherland, Phys. Rev. Letters <u>42</u>, 915, (1979).
- 43 C. Grover e Wetsel Jr.; Am. J. Phys, 46, 714 (1978).
- 44 W.L. Schaich e N.W. Ashacroft, Phys. Rev. B, <u>3</u>, 2453 (1970).
- 45 N.D. Wilsey e R.R. Goodman, Am. J. Phys. 35,35 (1969).
- 46 L.I. Schiff "Quantum mechanics 3a. edição (1968)
   Hc Graw Hill Kogakushka, LTD.
- 47 D.S. Saxon e R. A. Hutson, Phylips. Res. Rep. <u>4</u>, 81 (1949).
- 48 S. Flugge, "Practical Quantum Mechanics", "Berlin-Springer, (1971).
- 49 O.O. Diniz Neto e C.A.S. Lima "Behavior of a Kronig-Penney solid under strong laser field : band gap absorption edge and effective mass changes". - a ser publicado.