

Este exemplar corresponde à redação
final da Tese defendida pelo
aluno Valder Nogueira, aprovada pela Comissão
Julgadora.

For 24/02/88

TRANSIENTES ULTRA-RÁPIDOS DE TRANSPORTE EM PLASMAS
SEMICONDUCTORES SUBMETIDOS A CAMPOS ELÉTRICOS INTENSOS

Valder Nogueira Freire

Orientador: Prof.Dr. Roberto Luzzi

Tese apresentada ao Instituto de
Física "Gleb Wataghin" da Univer-
sidade Estadual de Campinas como
parte dos requisitos para obten-
ção do grau de Doutor em Ciências.

Janeiro de 1988

Classif.

Autor

V. **Ex.**

Folha BC/

9307

I. FÍSICA - UNICAMP

n.º c.....

+ UNICAMP/P

n.º autor.....

F 883 t

..... ed.

v.....

ex.....

n.º tombo.....

TD 1699

CM 000 305 845

Ao Florentino (Seu Nozinho) e Juraci, por todas as condições que me proporcionaram.

À Rosaneiva, Deborah Louise, Carlos Renato e Guilherme, pela compreensão e dedicação a mim voltadas.

AGRADECIMENTOS

- Aos Profs. Roberto Luzzi e Áurea Rosa Vasconcellos pela orientação ao presente trabalho e, pela compreensão e apoio constantes, o meu reconhecimento;
- Ao A.S.C. Esperidião, Tânia T. Castro, Ana Maria Rodrigues e M. Gibson Pereira pelo rico convívio estabelecido, útil nas dificuldades que se foram;
- Aos membros do Instituto de Física "Gleb Wataghin", em particular aos Profs. A.C.S. Algarte e J.G.P. Ramos.
- Aos membros do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará pela hospitalidade demonstrada, em particular aos Profs. A.J.C. Sampaio, J. Mendes Filho e F. Alcides Germano.
- Aos órgãos CNPq e FAPESP, pelo auxílio financeiro.

*Vanitas vanitatum
et omnia vanitas.*

RESUMO

Utilizando uma Teoria Não-linear de Transporte obtida do operador estatístico de não-equilíbrio de Zubarev, obtêm-se as equações que governam a evolução do estado de não-equilíbrio de semicondutores polares de gap direto altamente fotoexcitados submetidos a intensos campos elétricos contínuos. É demonstrada a possibilidade de existência de três diferentes tipos de comportamento dos transientes ultra-rápidos da mobilidade: (i) estrutura (i.e. existência de máximos e mínimos) sem overshoot em campos baixos, (ii) estrutura com overshoot em campos intermediários, (iii) evolução normal (nenhuma estrutura) em campos intensos. Um critério para a existência destes transientes ultra-rápidos é deduzido e cálculos numéricos apropriados ao problema de transporte dos portadores no vale central do GaAs são efetuados, indicando condições para a sua confirmação experimental.

ABSTRACT

Using a Nonlinear Transport Theory derived from the nonequilibrium statistical operator in Zubarev's approach, the equations that govern the evolution of the nonequilibrium state of a highly photoexcited direct-gap polar semiconductor submitted to high electric DC fields is obtained. It is demonstrated the possibility of the existence of three differentiated types of behaviour of the ultrafast mobility transient: (i) structure (i.e. existence of maxima and minima) without overshoot at low fields, (ii) structure with overshoot at intermediate fields, (iii) normal evolution (no structure) at high fields. A criterion for the occurrence of this structured ultrafast mobility transient is established, and numerical calculations appropriated for carriers transport in the central valley of GaAs are performed, showing conditions for its realization.

ÍNDICE

Capítulo 1	- Introdução	1
Capítulo 2	- Teoria de Transporte Não-Linear . . .	15
2.1	O Método do Operador Estatístico de Não-Equilíbrio	16
2.2	Equações de Transporte Não-Lineares Generalizadas	24
Capítulo 3	- PSAE Submetidos a Campos Elétricos Intensos	28
3.1	Introdução	29
3.2	O Modelo Considerado	31
3.3	Máximos e Mínimos na Mobilidade do PSAE	38
Capítulo 4	- Transientes Ultra-Rápidos de Transporte	46
4.1	Equações de Transporte	47
4.2	Propriedades dos Transientes	60
4.3	Transientes Ultra-Rápidos de Transporte do PSAE em GaAs	65
Capítulo 5	- Conclusões e Comentários	93
Apêndice A		101
Apêndice B		110
Apêndice C		116
Apêndice D		124
Bibliografia		130

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Os fenômenos de transporte⁺ em sistemas fora do equilíbrio termodinâmico constituem um tema relevante em áreas tão distintas quanto a Física da Matéria Condensada, Físico-Química, Biologia, Engenharia e outras. Todos os sistemas de muitos-corpos destas diferentes áreas exibem comportamentos que, a nível macroscópico, acredita-se poderem ser descritos por equações de movimento de algumas variáveis macroscópicas, mesmo aqueles que apresentam comportamentos caóticos ou que exibam auto-organização^(1,2). Esta descrição através de uma contração do número de variáveis é consequência tanto da impossibilidade de acesso a um conhecimento completo do estado dinâmico a nível microscópico dos sistemas de muitos-corpos (aspecto experimental), quanto da inviabilidade de resolução das N equações de movimento ($\sim 10^{23}$), que podem ser formalmente estabelecidas para as partículas constituintes dos mesmos (aspecto teórico). Consequentemente, o tratamento de sistemas de muitos-corpos a nível microscópico e que estejam fora de equilíbrio termodinâmico requer a introdução de uma Mecânica Estatística de Não-Equilíbrio.

Entre os problemas fundamentais da Mecânica Estatística de Não-Equilíbrio pode-se incluir tanto a escolha desse conjunto contraído de quantidades dinâmicas, digamos P_j , com $j = 1, 2, \dots, n$ ($n \ll N$), como também a dedução das equações de

⁺ Utilizado em sentido mais amplo que o usual somente nas páginas 1 e 2.

transporte para o conjunto de macrovariáveis $Q_j(t)$ - que são algum tipo de média dos P_j ao tempo t , $\langle P_j | t \rangle$, a ser comparada com as medições obtidas de experimentos. A abordagem destes problemas e a formulação de novas teorias da Mecânica Estatística de Não-Equilíbrio é feita tendo-se em vista, necessariamente, o problema da compatibilidade das leis físicas microscópicas (reversíveis no tempo) com a irreversibilidade dos fenômenos macroscópicos.

Para a escolha das quantidades dinâmicas P_j não existe, até o momento, nenhuma teoria totalmente satisfatória que permita uma decisão única. Esta escolha depende, principalmente, do tipo de sistema que se está estudando e do nível de descrição dos fenômenos que ocorrem no mesmo. Em geral sempre se pode relacioná-la àquelas variáveis que podem ser medidas, direta ou indiretamente, por algum tipo de experimento.

Quanto às equações de transporte para as macrovariáveis $Q_j(t)$, o desenvolvimento inicial esteve ligado principalmente a fenômenos de irreversibilidade macroscópica através de equações lineares de transporte^(3.a); um importante resultado desta fase foi a derivação do Teorema da Flutuação-dissipação, que mostra, para sistemas levemente afastados do equilíbrio termodinâmico, como expressões para funções resposta e coeficientes de transporte podem ser obtidos em termos de funções de correlação de equilíbrio^(3.b).

Nas duas últimas décadas ênfase tem sido dada à descrição dos processos irreversíveis em sistemas longe do equilíbrio através de equações não-lineares de transporte. Embora um número sempre crescente de diferentes métodos tenham sido

utilizados na dedução das mesmas, alguns são generalizações de idéias originárias da teoria do movimento Browniano⁽⁴⁾, enquanto outros são extensões do algoritmo de ensembles de Gibbs a situações fora-de-equilíbrio⁽⁵⁾, suplementadas com a técnica de operadores de projeção⁽⁶⁾, ou por raciocínios intuitivos^(7,8), ou pelo uso de um princípio variacional^(5,9,10).

Tanto a escolha das variáveis dinâmicas como a utilidade das equações de transporte estão, naturalmente, ligadas à sua funcionabilidade e, principalmente, ao seu sucesso na explicação de resultados experimentais. Dentro deste contexto, o estudo dos fenômenos de transporte em semicondutores tem se constituído uma excelente área de testes para os mais diferentes métodos da Mecânica Estatística de Não-Equilíbrio, graças ao constante e praticamente contínuo interesse devotado ao tema há mais de cinco décadas.

Nos primórdios do estudo dos fenômenos de transporte em semicondutores, utilizou-se principalmente a honrável equação de Boltzmann, uma das pedras fundamentais da Mecânica Estatística de Não-Equilíbrio. Ela foi proposta originalmente em 1872 para a descrição das propriedades macroscópicas de um gás diluído, sendo utilizada posteriormente na Física da Matéria Condensada em conjunto com representações de quasi-partículas (excitações elementares)⁽¹¹⁾. Em sua forma mais geral, ela pode ser expressa como

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial \vec{r}} + (\vec{F}/m) \cdot \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial \vec{v}} = J(f, f) \quad (1.1)$$

onde a posição $\vec{r}$ e a velocidade $\vec{v}$ determinam a localização da partícula (moléculas, portadores, fônons, etc) no espaço de fase; $\vec{F}$ é a força externa aplicada à partícula de massa m ; $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ é a função de distribuição para as partículas; $J(f, f)$ é o termo de colisão dado por

$$J(f, f) = \int d\vec{v} \int d\vec{v}' \int d\vec{v}_1 W^{(d)}(\vec{v}, \vec{v}_1 | \vec{v}', \vec{v}'_1) \cdot [f' \cdot f'_1 - f \cdot f_1] \quad (1.2)$$

Na equação 1.2 $f' = f(\vec{r}, \vec{v}', t)$, etc, e $W^{(d)}(\vec{v}, \vec{v}_1 | \vec{v}', \vec{v}'_1)$ é interpretada como uma probabilidade de transição por unidade de tempo dada no espaço de d -dimensões por

$$W^{(d)}(\vec{v}, \vec{v}_1 | \vec{v}', \vec{v}'_1) = 2^d \cdot g^{3-d} \cdot I(g, \theta) \cdot \delta^{(d)}(\vec{v} + \vec{v}_1 - \vec{v}' - \vec{v}'_1) \cdot \delta^{(1)}(v^2 + v_1^2 - v'^2 - v_1'^2) \quad (1.3)$$

onde $g = |\vec{v} - \vec{v}_1|$ e $I(g, \theta)$ é a seção de choque diferencial para uma colisão binária em um ângulo θ ⁽¹²⁾.

A equação de Boltzmann 1.1 é uma equação integro-diferencial não-linear que descreve a evolução temporal de $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ a partir de um estado inicial $f(\vec{r}, \vec{v}, 0)$ em função das diferentes perturbações (espalhamentos e campos aplicados). Ela é Markoviana (não apresenta nenhum efeito de retardação ou memória); nela os espalhamentos são tratados independentes dos campos aplicados, sendo instantâneos e contribuindo linearmente

para a integral de colisão; ela descreve processos irreversíveis de relaxação (Stosszahlansatz).

No caso específico do problema de transporte em se micondutores, a solução da equação de Boltzmann foi obtida inicialmente através de restrições nas características dos processos de espalhamento e forças atuantes, todos supostos fracos para ser possível a utilização de aproximações lineares⁽¹³⁾. Entretanto cedo se reconheceu que os semicondutores apresentam fenômenos de transporte não-lineares quando submetidos a campos elétricos intensos ($\sim$ kV/cm) como, por exemplo, relação não-ôhmica entre a corrente e o campo aplicado, resistividade diferencial negativa, etc^(13,14).

Inicialmente estudou-se o estado estacionário das propriedades de transporte de semicondutores submetidos a campos elétricos intensos⁽¹⁵⁾. Os transientes ultra-rápidos (psec) receberam menos atenção devido a falta de resultados experimentais e problemas associados com a solução analítica da equação de Boltzmann; somente o advento de lasers pulsados e computadores de grande porte veio permitir a obtenção de resultados experimentais⁽¹⁶⁾ e a implementação de técnicas numéricas^(17,18) para a investigação teórica do regime transiente.

Os resultados iniciais mostraram que, para campos da ordem de kV/cm, a energia média dos portadores aumenta pela ação do campo e pode ser caracterizada através de uma quasi-temperatura T_c acima daquela temperatura da rede T_b - portadores quentes, e seu valor estacionário final é determi-

nado pelos processos de espalhamento com fônons, impurezas, defeitos, etc⁽¹⁹⁾. A troca de energia entre os subsistemas de portadores e o de fônons aquece estes últimos, levando-os a quasitemperaturas T_{AC} , T_{LO} e T_{TO} para os fônons acústicos e óticos, longitudinais e transversais, respectivamente, acima daquela do banho, ou mesmo perturba-os de tal forma que seu estado somente pode ser caracterizado através de uma função de distribuição de não-equilíbrio para cada um dos diferentes tipos de fônons-quentes⁽²⁰⁾.

Um importante resultado também demonstrado foi que a aceleração inicial dos portadores imposta pela atuação de campos elétricos intensos pode levar a velocidade transiente dos mesmos a valores superiores àqueles do estado estacionário final-overshoot⁺ na velocidade (Figura 1.1).

Desde cedo sugeriu-se que este efeito de overshoot dominaria os processos de transporte em transistores de efeito de campo (FET), feitos de semicondutores de gap direto como GaAs, InAs, InP, etc, aumentando sua rapidez de operação⁽²¹⁾. Devido a esta importante aplicação tecnológica, considerável esforço foi dispendido para a obtenção de uma melhor compreensão do overshoot na velocidade.

A maioria dos resultados teóricos obtidos põem a causa do efeito de overshoot principalmente na diferença entre os tempos de relaxação de momentum e energia-caso de semicondutores de gap¹ direto como Si e Ge, e/ou no resultado da transferên-

⁺ Termo universalmente consagrado, sem equivalente em português.

cia de elétrons entre os vales (espalhamento intervalle) - caso de semicondutores de gap direto como GaAs, InP, etc, isto quer se esteja utilizando a equação semiclássica de Boltzmann, equações de balanceamento de energia-momentum⁽²¹⁾, ou mesmo o famoso Método de Monte Carlo - no qual o movimento de um elétron no espaço dos momenta é simulado no computador^(17,20).

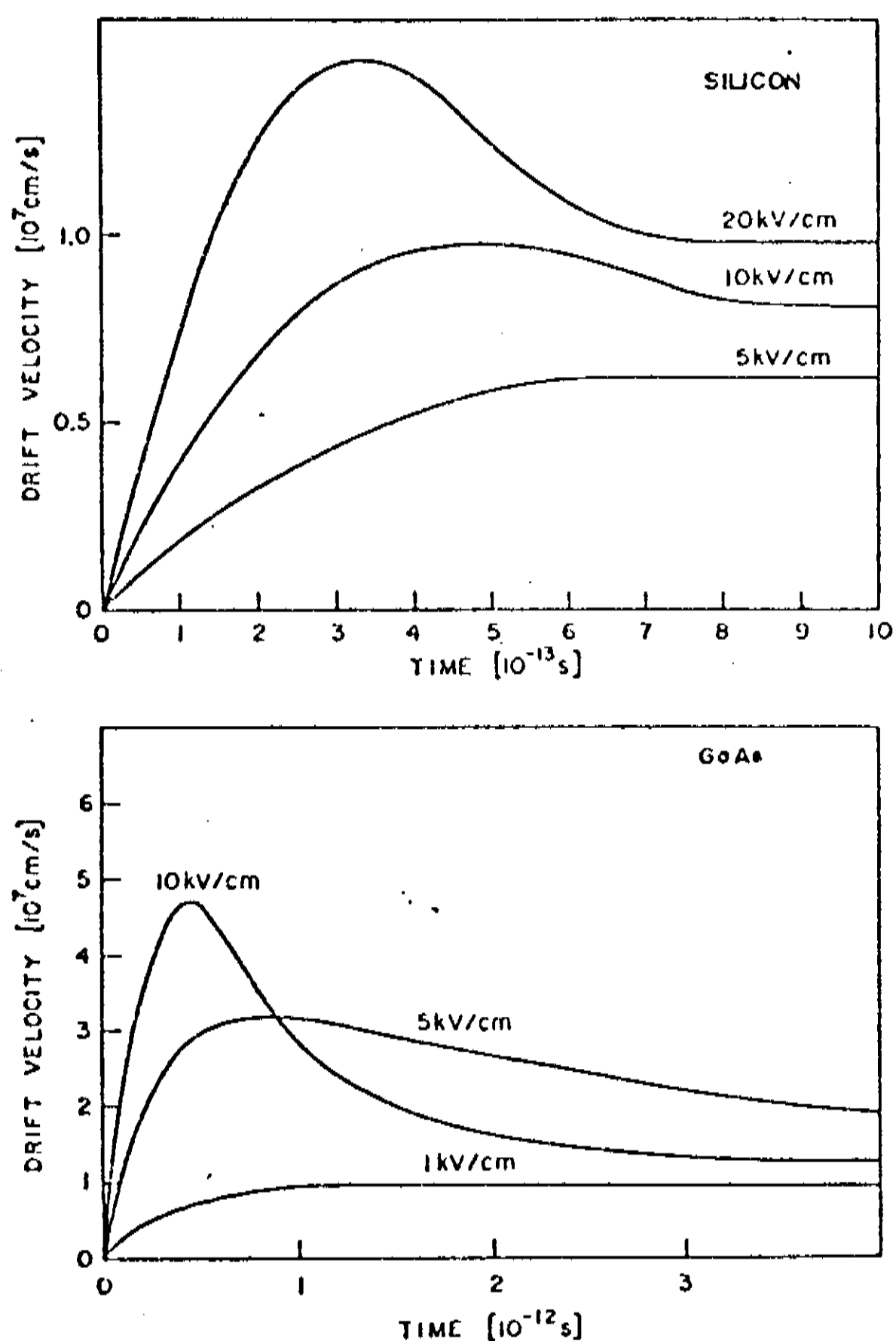


FIGURA 1.1. - Evolução temporal da velocidade dos elétrons em Si e GaAs para diferentes campos aplicados, obtidas pelo Método de Monte Carlo^(21.a).

Em relação ao aspecto experimental, embora considerável esforço tenha sido e continue sendo feito para a obtenção de medidas experimentais dos transientes ultra-rápidos de transporte em semicondutores submetidos a campos elétricos intensos⁽¹⁶⁾, o fenômeno de overshoot ainda é um desafio para uma verificação experimental direta!

Através do crescente desenvolvimento da tecnologia dos semicondutores em busca da integração de circuitos em escala muito larga⁽²²⁾, chegou-se à construção de dispositivos semicondutores cujas dimensões dos canais chegam a sub-micra, o suficiente para que novos fenômenos sejam esperados nas regiões de campos elétricos intensos ($\sim \text{kV/cm}$) que facilmente ocorrem nos mesmos⁽²³⁾.

Nestas condições, simples argumentos baseados no princípio de incerteza mostram que a equação de Boltzmann está no limite de sua aplicabilidade, tornando-se necessário implementar uma Teoria Quântica de Transporte capaz de fornecer uma melhor compreensão e previsão dos novos fenômenos, fundamental para o sucesso da modelagem de novos dispositivos semicondutores ultra-pequenos e ultra-rápidos. Além disto, a Teoria Quântica de Transporte deve ser capaz de explicar e fundamentar mais profundamente os resultados obtidos com a equação de Boltzmann, descobrindo os limites de sua aplicação.

Na Teoria Quântica de Transporte (TQT) impõe-se que o princípio de incerteza de Heisenberg deve ser obedecido, o que impede a especificação simultânea da posição e momentum das partículas. A descrição do sistema na TQT foi inicialmente

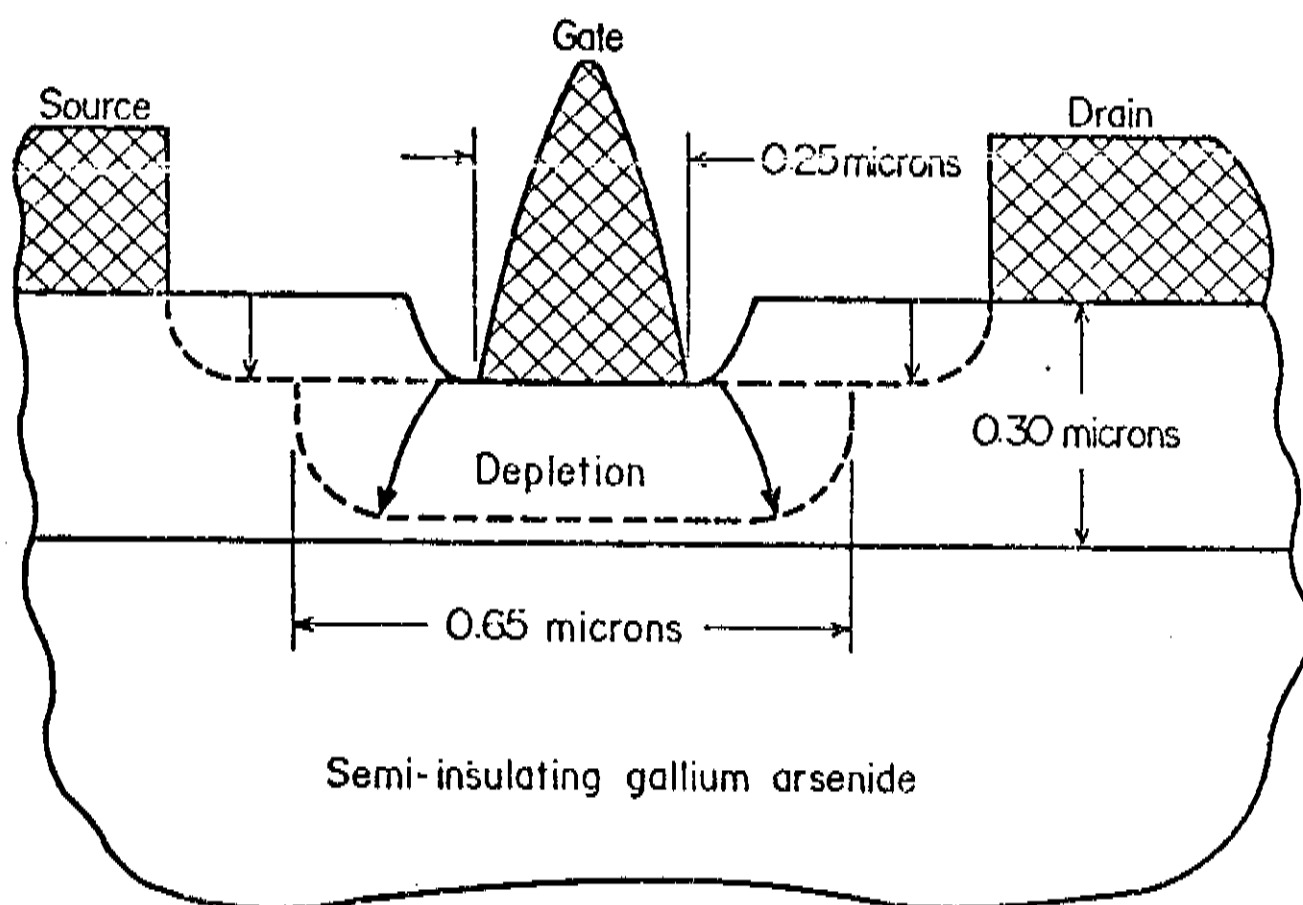


FIGURA 1.2. - Este corte de um MESFET mostra dimensões características de modernos dispositivos semicondutores⁽²²⁾.

te baseada na equação de Liouville-Von Neumann para a matriz densidade $\rho(t)$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + i L \rho = 0 \quad (1.4)$$

$$i L \rho \equiv \frac{1}{\hbar} [H_F, \rho] \equiv \frac{1}{\hbar} (H_F \rho - \rho H_F) \quad (1.5)$$

onde $H_F = H + F$, e o Hamiltoniano H descreve todo o sistema na ausência do termo de acoplamento F às forças externas⁽²⁴⁾. A condição de contorno mais comum é que $\rho = \rho_0(H)$ para $t > 0$, onde ρ_0 é a solução para o equilíbrio térmico, sendo o campo externo aplicado em $t = 0$. Todas as quantidades observáveis P_i são então obtidas como valores esperados determinados por $\rho(t)$,

$$\langle P_i(t) \rangle = \text{Tr} \{ P_i \rho(t) \} = \sum_{\lambda, \lambda'} \langle \lambda | P_i | \lambda' \rangle \langle \lambda' | \rho | \lambda \rangle = \sum_{\lambda, \lambda'} P_i^{\lambda \lambda'} \rho_{\lambda' \lambda} \quad (1.6)$$

onde $\{|\lambda\rangle\}$ é um conjunto completo de estados, cuja escolha determina a característica e subsequente interpretação da teoria de transporte. No caso específico do problema dos portadores quentes, outras linhas de desenvolvimento foram utilizadas para o estabelecimento de diferentes equações cinéticas quânticas, entre as quais podemos citar equações master generalizadas⁽²⁵⁾, equações de Langevin generalizadas⁽²⁶⁾, o método da função Green⁽²⁷⁾, e aquelas baseadas em representações de Wigner⁽²⁸⁾ e Stark⁽²⁹⁾.

Uma outra área de testes para a Mecânica Estatística de Não-Equilíbrio tem sido o estudo da evolução temporal das excitações elementares de plasmas em semicondutores altamente excitados (PSAE)⁽³⁰⁾. Um plasma em um semicondutor é um fluido de elétrons e buracos gerados por iluminação ou dopagem, sofrendo influência direta da rede, que introduz notáveis diferenças em comparação com o plasma gasoso.

Em experimentos típicos em semicondutores de gap direto, uma concentração de $n(\geq 10^{16} \text{ cm}^{-3})$ pares de elétrons e buracos é gerada por um pulso intenso de laser, quer através da absorção direta de um fóton (se $\hbar\omega_L > E_g$, onde ω_L é a frequência do laser e E_g a energia de gap do semicondutor), ou por efeitos não-lineares com absorção simultânea de dois fótons ($\hbar\omega_L < E_g$ mas $2\hbar\omega_L > E_g$). A relaxação dos elétrons e buracos (via interação com fônons) e os efeitos de muitos-corpos são investigados através de experimentos com luminescência, absorção ótica, etc que, com o auxílio da espectroscopia ultra-rápida em escalas temporais de pico e femto-segundos, permitem o estudo dos processos dinâmicos ultra-rápidos no PSAE.

Com a aplicação de campos elétricos intensos ao PSAE, surge uma nova área de estudos que torna clara a existência de duas situações distintas:

(a) uma, de acentuado interesse tecnológico atual e discutida anteriormente, em que os portadores são acelerados pelo campo elétrico, mas partem de uma condição inicial de equilíbrio termodinâmico;

(b) outra, uma nova e desafiante área de testes para a Mecânica Estatística de Não-Equilíbrio, e à qual os experimentos atuais sobre os transientes de transporte de portadores submetidos a campos elétricos intensos estão mais próximos. Nela os portadores são levados inicialmente para longe do equilíbrio termodinâmico-através de fotoexcitação, por exemplo⁽¹⁶⁾, sendo a seguir acelerados pelo campo elétrico.

Neste trabalho considerar-se-á como a evolução de um estado inicial altamente fora de equilíbrio termodinâmico de um PSAE afeta os parâmetros de transporte dos elétrons e buracos foto-injetados, quando submetido a campos elétricos intensos ($\sim \text{kV/cm}$). Para esta finalidade fez-se uso do Método do Operador Estatístico de Não-Equilíbrio^(8,30) que permite a construção de uma Teoria de Transporte Quântica e Não-Linear, apropriada à descrição do estado macroscópico de sistemas físicos arbitrariamente fora de equilíbrio termodinâmico.

No Capítulo 2 será apresentado o Método do Operador Estatístico de Não-Equilíbrio, que é baseado na construção de um ensemble de réplicas representativas do estado de não-equilíbrio do sistema. A este ensemble associa-se o operador estatístico de não-equilíbrio, $\rho(t)$, funcional de um conjunto reduzido de quantidades dinâmicas $P_1, \dots, P_n$, onde n é muito menor do que o número de graus de liberdade do sistema; os valores médios de cada um dos P_j em relação ao ensemble de não-equilíbrio, $Q_j(t) = T_R\{P_j \rho(t)\}$ formam o conjunto de variáveis termodinâmicas de não-equilíbrio que descrevem o estado macroscópico do sistema. O capítulo é encerrado com a dedução de um conjunto de equações de transporte não-lineares para as diferentes variáveis termodinâmicas de não-equilíbrio $Q_j(t)$, obtidas a partir do operador estatístico de não-equilíbrio.

No Capítulo 3 a teoria é aplicada ao estudo dos transientes ultra-rápidos de transporte em PSAE submetidos a campos elétricos intensos. Demonstra-se que a evolução irreversível do estado macroscópico inicial de não-equilíbrio de plasmas fotoexcitados em semicondutores de gap direto torna

possível a existência de regimes diferenciados nos transientes ultra-rápidos de transporte, caracterizados pela existência ou não de máximos e mínimos na velocidade e mobilidade dos portadores⁽³¹⁾. Um critério para a ocorrência dos mesmos é estabelecido analiticamente⁽³²⁾.

No Capítulo 4 a validade do critério é comprovada através da solução numérica do conjunto de equações de transporte integro-diferenciais, não-lineares e acopladas, para o caso específico do GaAs submetido a determinadas condições experimentais. Todos os transientes ultra-rápidos da velocidade, quasi-temperatura e mobilidade dos portadores são apresentados, bem como a evolução temporal da quasi-temperatura dos fônons LO.

Finalmente, o Capítulo 5 é dedicado a comentários gerais, conclusões e à descrição de possíveis extensões do presente trabalho.

CAPÍTULO 2

TEORIA DE TRANSPORTE NÃO-LINEAR GENERALIZADA*

2.1. O Método do Operador Estatístico de Não-Equilíbrio

Entre os vários métodos existentes atualmente para o estudo da evolução macroscópica temporal de sistemas fora de equilíbrio⁽³⁾, o Método do Operador Estatístico de Não-Equilíbrio (OENE) tem demonstrado ser uma técnica muito efetiva para o tratamento de uma ampla classe de problemas físicos^(8,30) para cuja descrição é necessário a inclusão de efeitos não-lineares, não-locais e de retardação (memória). Este formalismo baseia-se nas idéias de Boltzmann e Gibbs, que permitem a obtenção de OENE's através da utilização de técnicas intuitivas⁽⁷⁾ ou uso de operadores de projeção^(5,6), como aqueles elegantes tratamentos de Zubarev e Robertson, respectivamente.

Para a obtenção formal dos diferentes OENE, deve-se inicialmente reconhecer que ao passar de uma descrição microscópica para uma descrição macroscópica de um sistema de muitos-corpos, uma contração da informação necessária para a descrição de seus estados tem que ser feita. Esta contração é baseada na hipótese de existência de um tempo de relaxação para micro-informação de Bogoliubov⁽³⁰⁾, após o qual o sistema de N corpos perde a memória de todos os detalhes iniciais, tornando suficiente a utilização de um reduzido número de variáveis, $n \ll N$, para a descrição macroscópica do estado de não-

* Este Capítulo abordará o tema de forma muito sucinta. Para maiores detalhes o leitor deve consultar as referências.

equilíbrio do mesmo. Nesta descrição contraída, o OENE é um funcional do conjunto de quantidades dinâmicas $P_1, P_2, \dots, P_n$, cujos valores esperados obtidos através do ensemble de não-equilíbrio são as macrovariáveis

$$Q_j(t) = \text{Tr}\{P_j \rho(t)\} \quad (2.1)$$

com $j = 1, 2, \dots, n$. Para qualquer quantidade dinâmica A , a média estatística $\langle A|t \rangle = \text{Tr}\{A \rho(t)\}$ é um valor a ser colocado em correspondência com os resultados das medições experimentais de A efetuadas no sistema físico.

A escolha das macrovariáveis ou, equivalentemente, a escolha do conjunto base de quantidades dinâmicas P_j , não é universal mas depende de cada problema concreto, não existindo ainda nenhuma teoria capaz de tornar única a decisão. Uma possibilidade bastante utilizada tem sido a de incluir somente aquelas variáveis que se relacionam, direta ou indiretamente, com medições experimentais efetuadas no sistema⁽³⁰⁾.

Para todos os OENE's obtidos por diversos autores, a idéia central é a de que o OENE, $\rho(t)$ possa ser separado em duas partes,

$$\rho(t) = \bar{\rho}(t) + \rho'(t) \quad (2.2)$$

consistindo de: um termo não-dissipativo, $\bar{\rho}(t)$, o operador estatístico de grão-grosso, que define os valores médios instantâneos das variáveis dinâmicas P_j ,

$$Q_j(\vec{r}, t) = \text{Tr}\{P_j(\vec{r}) \rho(t)\} = \text{Tr}\{P_j(\vec{r}) \bar{\rho}(t)\} \quad ; \quad (2.3)$$

um outro termo, $\rho'(t)$, que possui toda a informação dinâmica relevante necessária à descrição da evolução irreversível do sistema.

A obtenção dos diferentes CENE's pode ser feita através de uma descrição unificada baseada em um princípio variacional, o Formalismo de Maximização da Entropia Estatística de Jaynes⁽⁹⁾. Trata-se de se fazer máxima a entropia de Gibbs

$$S_G(t) = -\text{Tr} \{ \rho(t) \ln \rho(t) \} \quad (2.4)$$

com $\rho(t)$ definido no intervalo (t_0, t) , e normalizado em qualquer instante de tempo, i.e.

$$\text{Tr} \{ \rho(t') \} = 1 \quad (2.5)$$

para $t_0 \leq t' \leq t$ e sujeito aos vínculos da equação (2.3). Isto corresponde a tornar extremo o funcional

$$\begin{aligned} I\{\rho\} = & -\text{Tr}\{\rho(t) \ln \rho(t)\} + [\psi(t) - 1] \cdot \text{Tr}\{\rho(t)\} + \\ & + \sum_{j=1}^n \int d^3\vec{r} \int_{t_0}^t dt' \varphi_j(\vec{r}, t, t'; t_0) \text{Tr}\{P_j(\vec{r}, t' - t) \rho(t)\} \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde $\psi-1$ e φ_j são multiplicadores de Lagrange. Obtêm-se que

$$\rho(t) = \exp\left\{-\psi(t) - \sum_{j=1}^n \int d^3r \int_{t_0}^t dt' \varphi_j(\vec{r}, t, t'; t_0) P_j(\vec{r}, t' - t)\right\} \quad (2.7)$$

onde

$$\psi(t) = \ln \text{Tr}\left\{\exp\left[-\sum_{j=1}^n \int d^3r \int_{t_0}^t dt' \varphi_j(\vec{r}, t, t'; t_0) \cdot P_j(\vec{r}, t' - t)\right]\right\} \quad (2.8)$$

assegura a condição de normalização (2.5). Para os multiplicadores de Lagrange φ_j é proposta a forma

$$\varphi_j(\vec{r}, t, t'; t_0) = w(t, t'; t_0) F_j(\vec{r}, t') \quad (2.9)$$

onde w é função auxiliar. Isto é feito para que

- (i) seja introduzido o conjunto de funções $F_j(\vec{r}, t')$ como variáveis intensiva (campos) termodinamicamente conjugadas às variáveis extensivas ou macrovariáveis $Q_j(\vec{r}, t)$;
- (ii) seja definida a função w , que permite a introdução da condição dinâmica para dissipatividade de Prigogine⁽²⁾ no formalismo e fixa a condição inicial $\rho(t_0) = \rho_w(t_0) = \rho_{cg}(t_0)$, a partir da qual o estado macroscópico do sistema evolui irreversivelmente.

Substituindo (2.9) em (2.7) obtêm-se

$$\rho(t) \equiv \rho_w(t) = \exp\left\{-\int_{t_0}^t dt' w(t, t'; t_0) \ln \rho_{cg}(t', t' - t)\right\}, \quad (2.10)$$

onde foi introduzido o operador

$$\rho_{cg}(t_1, t_2) = \exp\left\{-\phi(t_1) - \sum_{j=1}^n \int d^3\vec{r} F_j(\vec{r}, t_1) P_j(\vec{r}, t_2)\right\} \quad (2.11)$$

e a função $\phi(t)$,

$$\psi(t) = \int_{t_0}^t dt' w(t, t'; t_0) \phi(t') \quad (2.12)$$

O operador ρ_{cg} da equação (2.11) tem o mesmo papel do operador estatístico de grão-grosso da equação (2.2). Definindo $w(r, t'; t_0) = dW(t, t'; t_0)/dt'$, as seguintes propriedades são necessárias para que (i) e (ii) sejam verificadas:

$$\lim_{t' \rightarrow t_0} W(t, t'; t_0) = 0 \quad (2.13.1)$$

$$\lim_{t' \rightarrow t} W(t, t'; t_0) = 1 \quad (2.13.2)$$

$$\lim_{w \rightarrow 0} \text{Tr} \{A \rho_w(t)\} = \langle A | t \rangle \quad (2.13.3)$$

onde a equação (2.13.3) impõe que $w \rightarrow 0$ depois que o traço é efetuado nos cálculos de valores médios de qualquer quantidade dinâmica A . Com isto o OENE generalizado, $\rho_w(t)$, é escrito como

$$\ln \rho_w(t) = \int_{t_0}^t dt' w(t, t'; t_0) \cdot \ln \rho_{cg}(t', t' - t) \quad (2.14)$$

que após integração por partes e a utilização de (2.13), transforma-se em

$$\ln \rho_w(t) = \ln \rho_{cg}(t, 0) - \int_{t_0}^t dt' W(t, t'; t_0) \cdot \frac{d \ln \rho_{cg}(t', t' - t)}{dt'} \quad (2.15)$$

onde ρ_{cg} está dado pela Eq. (2.11) e

$$\phi(t) = \text{Tr} \left\{ \exp \left[- \sum_{j=1}^n \int d^3r F_j(\vec{r}, t) P_j(\vec{r}) \right] \right\} \quad (2.16)$$

assegura a normalização de ρ_{cg} .

O tempo t_1 no argumento de ρ_{cg} refere-se à dependência temporal das variáveis F_j , enquanto t_2 refere-se à dependência temporal dos operadores P_j na representação de Heisenberg.

Os variáveis F_j são na verdade termodinamicamente conjugados às macrovariáveis $Q_j(\vec{r}, t)$, o que pode ser visto facilmente da relação

$$Q_j(\vec{r}, t) = \langle P_j(\vec{r}) | t \rangle = \langle P_j(\vec{r}) | t \rangle_{cg} = - \frac{\partial \phi(t)}{\partial F_j(\vec{r}, t)} \quad (2.17)$$

resultado da condição imposta pela Eq. (2.3) e da condição (i) na escolha da função auxiliar $W(t, t'; t_0)$.

Por uma escolha própria de W , o OENE $\rho_w(t)$ gera operadores estatísticos de não-equilíbrio anteriormente propostos na literatura sobre o tema⁽³⁰⁾. O OENE de Green-Mori⁽⁷⁾ é obtido fazendo-se

$$W(t, t'; t_0) = 1 - \frac{t-t'}{\tau} \quad (2.18.1)$$

com $t_0 = t - \tau$ e $\tau \rightarrow \infty$, enquanto o OENE de Zubarev⁽⁸⁾ é obtido fazendo-se

$$W(t, t'; t_0) = \exp \epsilon \{ (t' - t) \} \quad (2.18.2)$$

com $t_0 \rightarrow -\infty$ e $\epsilon \rightarrow +0$.

Pode-se demonstrar que o OENE da equação (2.14) satisfaz a equação de Liouville com fontes infinitesimais^(30.f),

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} + iL \right] \ln \rho_w(t) = & \int_{t_0}^t dt' \frac{\partial w(t, t'; t_0)}{\partial t} \cdot \ln \rho_{cg}(t', t' - t) + \\ & + w(t, t; t_0) \cdot \ln \rho_{cg}(t, 0) \end{aligned} \quad (2.19.1)$$

o que quebra a simetria de reversão temporal e introduz a condição para dissipatividade dinâmica de Prigogine⁽²⁾. Para o método de Green-Mori tem-se

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + iL \right] \ln \rho_\tau(t) = \frac{1}{\tau} \cdot \ln \rho_{cg}(t, 0) \quad (2.19.2)$$

enquanto no método de Zubarev,

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + iL \right] \ln \rho_\epsilon(t) = -\epsilon \{ \ln \rho_\epsilon(t) - \ln \rho_{cg}(t, 0) \} \quad (2.19.3)$$

Finalmente, utilizando a identidade de operadores⁽⁸⁾

$$e^{-A+B} = Y(B|1) \cdot e^{-A} \quad (2.20.1)$$

$$Y(B|x) = 1 + \int_0^x du \, Y(B|u) e^{-uA} e^{uA} \quad (2.20.2)$$

o OENE da equação (2.14) pode ser escrito na forma da equação (2.2) como

$$\rho_w(t) = \exp\{-\ln \rho_{cg}(t,0) + \zeta_w(t)\} = \rho_{cg}(t,0) + \rho'(t) \quad , \quad (2.21.1)$$

onde ρ_{cg} é dado pela equação (2.16.1) e

$$\zeta_w(t) = - \int_{t_0}^t dt' \, W(t,t';t_0) \cdot \frac{d}{dt'} \ln \rho_{cg}(t',t'-t) \quad , \quad (2.22.1)$$

$$\rho'(t) = D_w(t) \cdot \rho_{cg}(t,0) \quad , \quad (2.22.2)$$

$$D_w(t) = \int_0^1 du \, Y(\zeta_w|u) [\rho_{cg}(t,0)]^u \cdot \zeta_w(t) \cdot [\rho_{cg}(t,0)]^{-u} \quad (2.22.3)$$

$$Y(\zeta_w|x) = 1 + \int_0^x du \, Y(\zeta_w|u) [\rho_{cg}(t,0)]^u \cdot \zeta_w(t) \cdot [\rho_{cg}(t,0)]^{-u} \quad (2.22.4)$$

2.2. Equações de Transporte Não-Lineares Generalizadas

Para o cálculo das funções termodinâmicas, faz-se necessário obter as equações de evolução para as macrovariáveis $Q_j(\vec{r}, t)$, i.e. desenvolver uma Teoria de Transporte Não-Linear Generalizada, que irá ser aplicada no próximo capítulo ao estudo da mobilidade de plasmas semicondutores submetidos a campos elétricos intensos. Esta teoria é obtida do formalismo do OENE através da construção de equações de transporte generalizadas (equações de evolução para as macrovariáveis Q_j),

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_j(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \text{Tr}\{P_j(\vec{r})\rho_w(t)\} = \text{Tr}\left\{\frac{1}{i\hbar} [P_j(\vec{r}), H]\rho_w(t)\right\} = \\ &= \text{Tr}\left\{\frac{1}{i\hbar} [P_j(\vec{r}), H]\rho_{cg}(t, 0)\right\} + \text{Tr}\left\{\frac{1}{i\hbar} [P_j(\vec{r}), H]D_w(t)\rho_{cg}(t, 0)\right\} = \\ &= \langle \dot{P}_j(\vec{r}) | t \rangle_{cg} + \{ \dot{P}_j(\vec{r}); \zeta_w(t) | t \} \end{aligned} \quad (2.23)$$

onde H é o hamiltoniano total do sistema, $\dot{P}_j = (1/i\hbar)[P_j, H]$, $\langle \dots | t \rangle_{cg} = \text{Tr}\{\dots \rho_{cg}(t, 0)\}$, tendo-se definido a função de correlação de não-equilíbrio generalizada para os operadores A e B como

$$\{A; B | t\} = \text{Tr}\left\{A \int_0^1 du \gamma(\zeta_w | u) [\rho_{cg}(t, 0)]^u \Delta B [\rho_{cg}(t, 0)]^{-u+1}\right\} \quad (2.24)$$

com $\Delta B = B - \langle B | t \rangle_{cg}$.

Utilizando a Equação (2.22.1) e a relação

$$\sum_{\ell=1}^n \text{Tr}\{F_{\ell}(\vec{r}, t)[H, P_{\ell}(\vec{r})]\rho_{cg}(t, 0)\} = 0 \quad (2.25)$$

A equação (2.23) pode ser colocada na forma explícita

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} Q(\vec{r}, t) = & \sum_{k=1}^n \int d^3\vec{r}' \{ \dot{P}_j(\vec{r}); P_k(\vec{r}') | t \}_{y=1} F_k(\vec{r}', t) + \\ & + \sum_{k=1}^n \int_{t_0}^t dt' W(t, t'; t_0) \cdot \int d^3\vec{r}' \{ \dot{P}_j(\vec{r}); \dot{P}_k(\vec{r}', t'-t) | t \} F_k(\vec{r}', t') + \\ & + \sum_{k=1}^n \int_{t_0}^t dt' W(t, t'; t_0) \int d^3\vec{r}' \{ \dot{P}_j(\vec{r}); P_k(\vec{r}'; t'-t) | t \} \frac{\partial}{\partial t'} F_k(\vec{r}', t') \end{aligned} \quad (2.26)$$

onde $\dot{P} = (1/i\hbar) [P, H]$.

Luzzi et al⁽⁴³⁾ demonstraram que no regime linear próximo ao equilíbrio, as equações de Mori⁽⁴⁴⁾ são reobtidas. Isto sugere que a equação (2.26) pode ser considerada uma generalização do formalismo de Mori para sistemas arbitrariamente fora de equilíbrio, e que os dois últimos termos combinam-se para produzir um operador de colisão que depende, na terminologia de Mori, somente das correlações entre as forças generalizadas que sofrem rápidas flutuações⁽⁴³⁾.

A chamada Aproximação Quasi-Linear na Teoria de Relaxação (LTR) consiste num processo de expansão do membro da direita na Eq. (2.26), no qual este toma a forma de superposição de três operadores de colisão expressos em termos de fun-

ções de correlação definidas no ensemble de grão-grosso. Ela é aplicável no caso em que o Hamiltoniano total do sistema po de ser separado em duas partes

$$H = H_0 + H' \quad (2.27)$$

de maneira que

$$[P_j, H_0] = \sum_k \hbar \alpha_{jk} P_k \quad (2.28)$$

Em continuação usa-se a separação de ρ dada pela Eq. (2.21.1), retendo os efeitos da interação H' até segunda ordem: isto segue-se de tomar $Y = 1$ na Eq. (2.22.4) e expressar os operadores na representação de Heisenberg com H_0 , i.e. desprezando H' .

Seguindo o caminho indicado por Zubarev (omitimos aqui os detalhes; vide em referência (8) no Capítulo IV, Secção 25), obtêm-se

$$\frac{\partial}{\partial t} Q_j(\vec{r}, t) \approx J_j^{(0)}(\vec{r}, t) + J_j^{(1)}(\vec{r}, t) + J_j^{(2)}(\vec{r}, t) \quad (2.29)$$

onde

$$J_j^{(0)}(\vec{r}, t) = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}\{[P_j(\vec{r}), H_0] \rho_{cg}(t)\} = -i \sum_k \alpha_{jk} Q_k(\vec{r}, t) \quad , \quad (2.30.1)$$

$$J_j^{(1)}(\vec{r}, t) = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr}\{[P_j(\vec{r}), H'] \rho_{cg}(t)\} \quad , \quad (2.30.2)$$

$$\begin{aligned}
J_j^{(2)}(\vec{r}, t) = & \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' W(t, t'; t_0) \text{Tr}\{[H'(t'), [H', P_j(\vec{r})]] \rho_{cg}\} + \\
& + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' W(t, t'; t_0) \cdot \sum_k \frac{\delta J_j^{(1)}(\vec{r}, t)}{\delta Q_k(\vec{r}, t)} \cdot \text{Tr}\{[P_k(\vec{r}), H'] \rho_{cg}(t)\}
\end{aligned}
\tag{2.30.3}$$

com δ indicando derivações funcionais.

Assim, o Método do Operador Estatístico de Não-Equilibrium permitiu a obtenção de Equações de Transporte Não-Lineares Generalizadas na forma de uma expansão feita em termos de desvios do estado macroscópico de referência descrito por $\rho_{cg}(t, 0)$, sendo por isto considerada uma generalização do Método da Teoria Cinética dos Gases de Hilbert-Chapman-Enskog⁽⁴⁶⁾.

Nas aplicações ao estudo dos transientes ultra-rápidos será utilizado o OENE na forma dada por Zubarev, i.e. na Equação (2.30.3) far-se-á a substituição

$$\int_{t_0}^t dt' W(t, t'; t_0) \dots \rightarrow \int_{-\infty}^t dt' e^{\epsilon(t'-t)} \dots$$

CAPÍTULO 3

PSAE SUBMETIDOS A CAMPOS ELÉTRICOS INTENSOS

3.1. Introdução

Os transientes ultra-rápidos de transporte em plasmas semicondutores altamente excitados (PSAE) submetidos a campos elétricos intensos são fenômenos relevantes na física dos semicondutores, e cujo estudo teórico constitui uma aplicação nova e particularmente interessante da Mecânica Estatística de Não-Equilíbrio. Diferente do problema dos portadores quentes - no qual elétrons, buracos e fônons estão inicialmente em um estado de equilíbrio termodinâmico quando o campo elétrico começa a atuar, o PSAE está desde o início em um estado altamente fora de equilíbrio termodinâmico, onde o nível de energia dos subsistemas (principalmente o dos portadores) é superior aquele da rede. Disto decorre uma interessante competição entre a relaxação do excesso de energia inicial dos diferentes subsistemas, e a manutenção ou mesmo elevação deste nível por parte do intenso campo elétrico aplicado, o que influencia os transientes ultra-rápidos de transporte do PSAE.

Neste capítulo será descrita a situação física a ser tratada e demonstrar-se-á a possibilidade de existência de máximos e mínimos nos transientes da velocidade e mobilidade de PSAE submetidos a campos elétricos intensos. Isto será feito através da forma integral da equação generalizada de transporte para a velocidade dos portadores, obtida utilizan-

do-se o Método do Operador Estatístico de Não-Equilíbrio de Zubarev descrito no capítulo anterior.

3.2. 0 Modelo Considerado

A situação física a ser tratada é aquela esquematizada na Figura 3.2.1. Um PSAE é foto-gerado em semicondutores polares intrínsecos de gap direto através de um pulso intenso de radiação (laser). Uma concentração, suposta homogênea, de

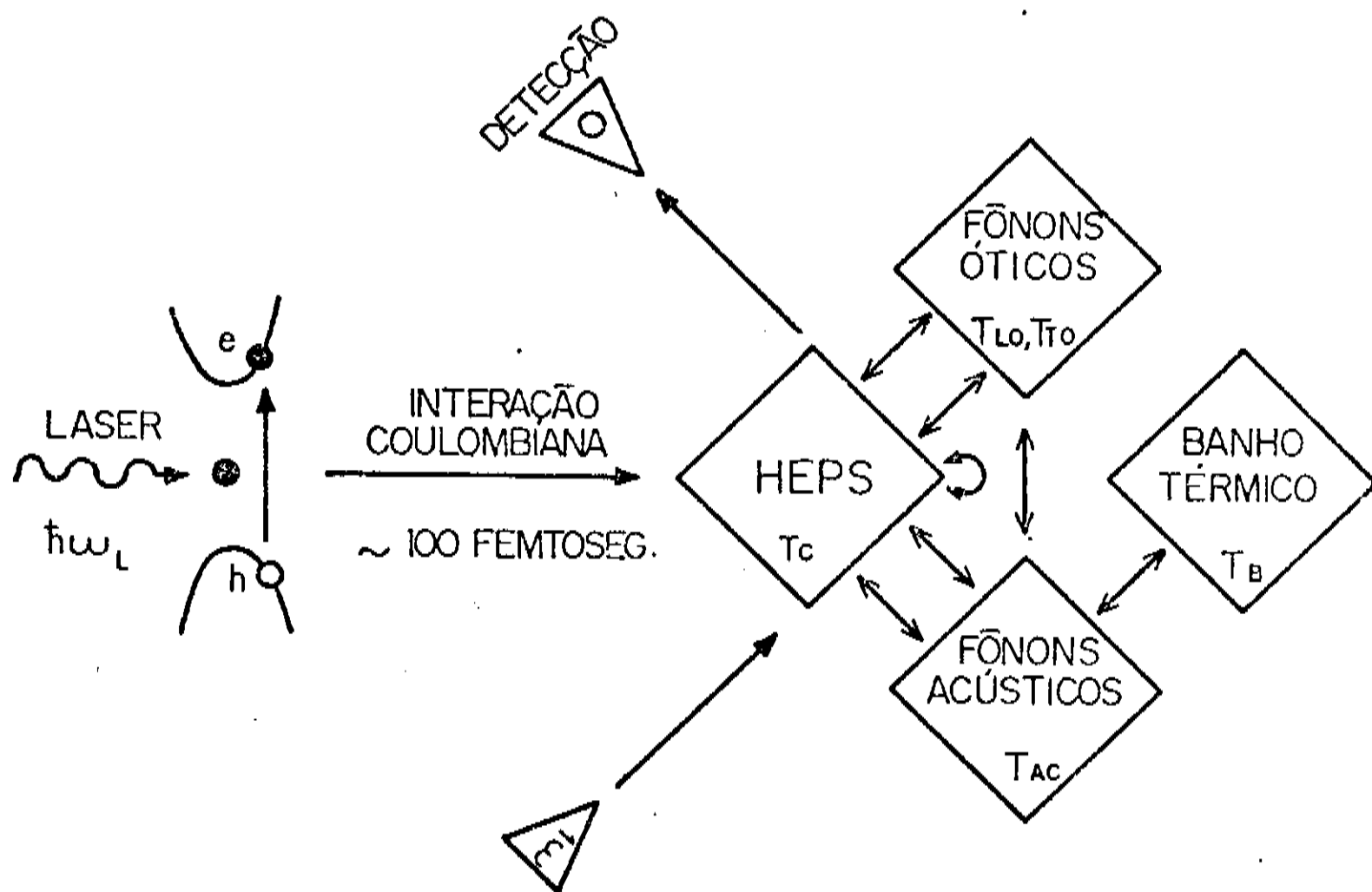


FIGURA 3.2.1 - Descrição esquemática dos processos físicos que se desenvolvem em PSAE submetidos a campos elétricos intensos. Os parâmetros termodinâmicos de não-equilíbrio que caracterizam cada subsistema estão indicados.

n pares de elétrons e buracos é criada⁽³³⁾, possuindo um excesso de energia $\hbar\Omega_L - E_G$ por par, onde E_G é o gap de energia do semicondutor e Ω_L é igual a uma ou duas vezes a frequência ω_L do laser aplicado, dependendo do processo de absorção de um ou dois fótons, respectivamente.

No primeiro estágio de relaxação, os portadores quentes estão em um estado altamente fora de equilíbrio, cuja evolução dinâmica é descrita através de distribuições de não-equilíbrio muito diferentes das bem conhecidas funções de Fermi-Dirac⁽³⁴⁾. Sua duração temporal depende principalmente da concentração de portadores foto-injetados e do tipo de semicondutor⁽³⁵⁾; num exemplo típico, para concentrações iniciais $n_0 \geq 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, a distribuição dos portadores quentes em GaAs não poderá ser caracterizada por uma única temperatura em tempos inferiores a 100 fseg (1 fseg $\equiv$ 1 femto-segundo $\equiv 10^{-15}$ segundos).

Através principalmente da interação coulombiana e do espalhamento com fônons LO^(35,36), os portadores quentes chegam ao início do segundo estágio de relaxação, no qual podem ser caracterizados por uma quasi-temperatura T_C^i acima daquela temperatura T_B do banho térmico que está em contato com o semicondutor. A interação dos portadores com os diferentes subsistemas de fônons pode gerar populações não equilibradas dos mesmos, aqui caracterizadas inicialmente por temperaturas efetivas T_{LO}^i , T_{TO}^i e T_{AC}^i , para os fônons óticos longitudinais, fônons óticos transversais e fônons acústicos, respectivamente. Neste instante, um campo elétrico intenso $\vec{E}$ é aplicado ao PSAE,

forneendo energia e momentum aos portadores, que por sua vez ao interagirem com os fônons, determinam a evolução dinâmica temporal das diferentes quasi-temperaturas (T_C , T_{LO} , T_{TO} e T_{AC}) e momenta ($\vec{p}_e$ e $\vec{p}_h$) dos sub-sistemas. O estado estacionário final é alcançado através do balanceamento das taxas de transferência de energia e momentum entre o campo elétrico, portadores, fônons e banho térmico (este último somente para a energia).

O hamiltoniano representativo do sistema acima descrito é escrito como

$$H = H_0 + H_I \quad . \quad (3.1)$$

H_0 se refere aos subsistemas livres de portadores e fônons, sendo constituido de dois termos,

$$H_0 = H_C + H_P \quad (3.2.1)$$

relacionados aos portadores, H_C , e fônons, H_P , respectivamente; H_I se refere às interações,

$$H_I = H_{CE} + H_{CP} + H_{AN} \quad (3.2.2)$$

onde H_{CE} é o hamiltoniano da interação dos portadores com o campo elétrico, H_{CP} é o hamiltoniano da interação dos portadores com os fônons, e H_{AN} é o hamiltoniano da interação anarmônica entre os modos de fônons. Limitando-se a períodos de tempo em que os processos de recombinação sejam desprezíveis (ti

picamente menores que nanosegundos), omitiu-se em (3.2.2) o hamiltoniano associado à recombinação dos portadores.

Como o interesse principal é a influência do estado inicial de não-equilíbrio do PSAE nos transientes ultrarrápidos de transporte de semicondutores de gap direto, não será levado em conta a estrutura de multivales da banda de condução dos semicondutores (Figura 3.2.2), limitando-se somente a um vale central cujo mínimo está localizado no ponto Γ em vários compostos III-V; na banda de valência, limitar-se-á somente aos buracos mais pesados.

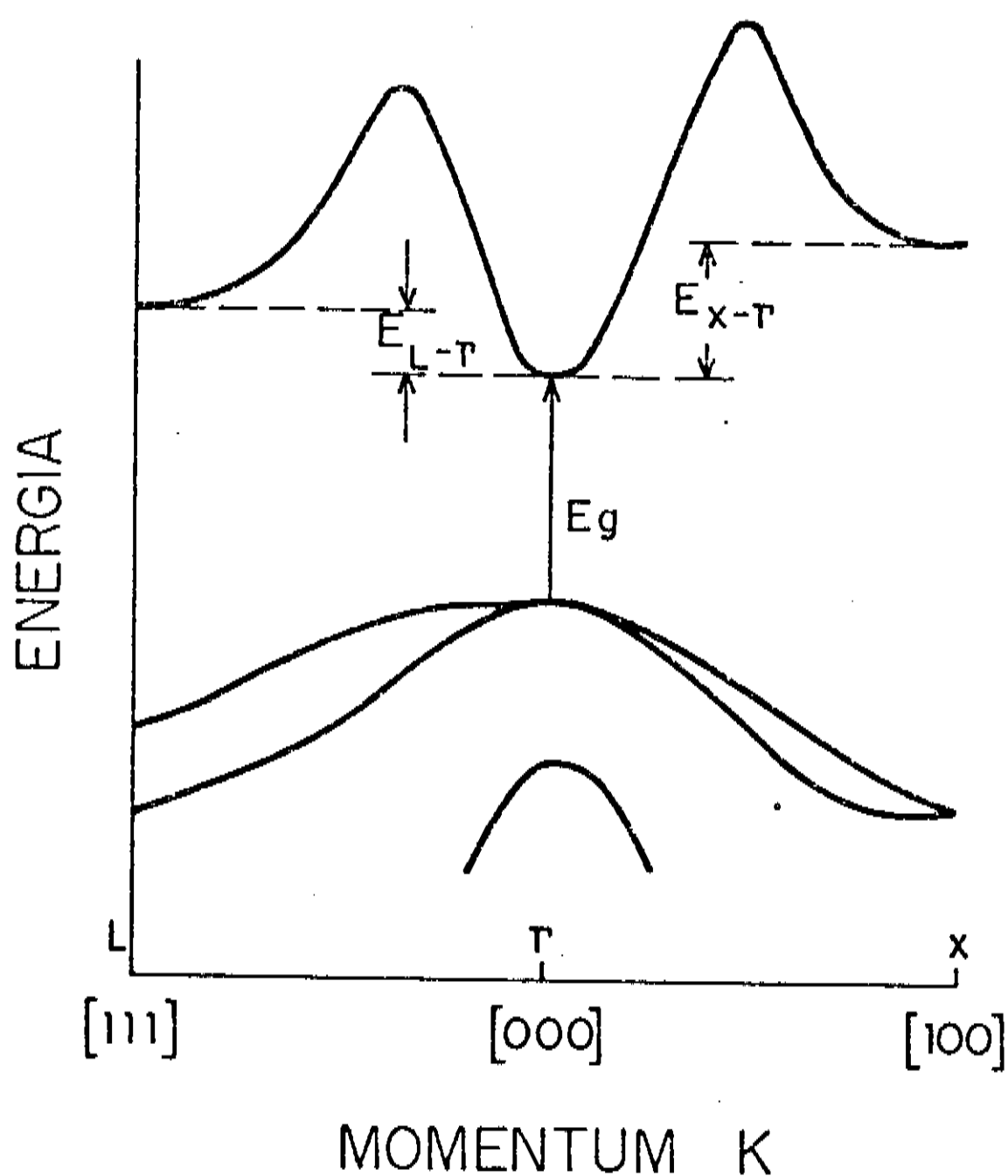


FIGURA 3.2.2. - Estrutura de bandas típica de muitos compostos III - V^(33.d). $E_{L-\Gamma}$ ($E_{X-\Gamma}$) é a diferença de energia entre o fundo da banda de condução no ponto Γ e no ponto $L(X)$.

Desprezando-se qualquer anisotropia na massa dos portadores, o hamiltoniano para o subsistema livre dos mesmos é

$$H_C = \sum_{\vec{k}, \alpha} \epsilon_{\vec{k}, \alpha} c_{\vec{k}, \alpha}^+ c_{\vec{k}, \alpha} \quad , \quad (3.3)$$

onde $c_{\vec{k}, \alpha}^+$ ($c_{\vec{k}, \alpha}$) são operadores de criação (aniquilação) de portadores em estados de Bloch caracterizados pelo vetor de onda $\vec{k}$, com o índice α referindo-se a elétrons ($\alpha = e$) ou buracos ($\alpha = h$); na aproximação de massa efetiva, $\epsilon_{\vec{k}, e} = \hbar^2 k^2 / 2m_e + E_G$ e $\epsilon_{\vec{k}, h} = \hbar^2 k^2 / 2m_h$, onde $\hbar$ é a constante de Dirac, m_e (m_h) é a massa efetiva do elétron (buraco) e E_G é o gap de energia do material (suposto constante).

No hamiltoniano dos fônons livres, não se levará em conta a diferença entre fônons acústicos longitudinais e transversais, escrevendo-se que

$$H_P = \sum_{\vec{q}, n} \theta_n \hbar \omega_{\vec{q}, n} b_{\vec{q}, n}^+ b_{\vec{q}, n} \quad , \quad (3.4)$$

onde $b_{\vec{q}, n}^+$ ($b_{\vec{q}, n}$) são operadores de criação (aniquilação) de fônons do tipo n ($n = LO$, fônons óticos longitudinais; $n = TO$, fônons óticos transversais; $n = AC$, fônons acústicos) com vetor de onda $\vec{q}$; $\hbar \omega_{\vec{q}, n}$ é a energia associada ao tipo de fônon n , e θ_n o seu fator de degenerescência ($\theta_{LO} = 1$, $\theta_{TO} = 2$, $\theta_{AC} = 3$).

O hamiltoniano H_{CE} associado à interação entre o campo elétrico $\vec{E}$ aplicado e os portadores é dado por

$$H_{CE} = - \sum_{i,\alpha} e_{\alpha} \vec{\epsilon} \cdot \vec{r}_{i\alpha} = -i \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \alpha} e_{\alpha} \vec{\epsilon} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}_1} \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) c_{\vec{k}_1, \alpha}^+ c_{\vec{k}_2, \alpha}^+ \quad (3.5)$$

onde $e_e = -e$, $e_h = e$, sendo e o valor da carga do elétron no vácuo, enquanto $\vec{r}_{i,e(h)}$ determina a posição do elétron (buraço).

O hamiltoniano H_{CP} associado à interação entre os portadores e os fônons é dado por

$$H_{CP} = \sum_{\alpha, \eta, i} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} M_{\alpha, \eta}^i(\vec{q}) (b_{\vec{q}, \eta} - b_{-\vec{q}, \eta}^+) c_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha}^+ c_{\vec{k}, \alpha} \quad (3.6)$$

onde $M_{\alpha, \eta}^i(\vec{q})$ é a matriz de interação entre o tipo α de portador e o tipo η de fônons para o i -ésimo tipo de espalhamento.

Embora a interação coulombiana não esteja explícita na equação (3.3) ou através da blindagem da interação portador-fônons na equação (3.6), dela decorre a hipótese de uma temperatura única para as distribuições dos portadores. Por outro lado, embora o termo de interação entre os fônons, H_{AN} , possa ser tratado explicitamente⁽³⁸⁾, a ausência de expressões simples para as matrizes de interação torna inviável seu tratamento analítico a posteriori e por isto as interações fônons óticos (longitudinais e transversais) - fônons acústicos serão introduzidas fenomenologicamente nas EGT na forma de tempos de relaxação associados a cada tipo de fônons, assim como a interação dos fônons acústicos com o banho térmico resultan

te da difusão de calor da amostra semicondutora para o reservatório.

3.3. Máximos e Mínimos na Mobilidade do PSAE

Para a descrição do estado macroscópico do sistema caracterizado na seção anterior, far-se-á uso do Método do Operador Estatístico de Não-Equilíbrio descrito no Capítulo 2. O primeiro passo para sua utilização é a escolha do conjunto de variáveis dinâmicas $\{P_j\}$ cujos valores médios tomados em relação ao ensemble de não-equilíbrio, $Q_j(t) = \text{Tr}\{P_j \rho(t)\}$, são as macrovariáveis extensivas capazes de descrever o estado do sistema.

Fazendo-se a hipótese de que o tempo de micro-relaxação de informação é menor, ou pelo menos da ordem da duração temporal do primeiro estágio de relaxação do PSAE, o conjunto de variáveis dinâmicas $\{P_j\}$ mais apropriadas para a descrição do sistema em questão consiste da energia dos portadores, H_C ; da energia dos fônons óticos longitudinais, óticos transversais e acústicos, H_{LO} , H_{TO} e H_{AC} ; e dos momentos dos portadores na direção do campo elétrico $\vec{E}$ aplicado, P_e e P_h . O número de elétrons, N_e , e o número de buracos, N_h , irão ser tomados como constantes e iguais a n , a densidade de portadores foto-injetados, já que os processos de recombinação dos portadores são relevantes na escala de nanosegundos, enquanto irá se considerar fenômenos ultra-rápidos de transporte com duração temporal em picosegundos⁽³⁷⁾.

O conjunto de variáveis intensivas $\{F_j(t)\}$ termodi

namicamente conjugadas ao conjunto de variáveis dinâmicas $\{P_j\}$ acima escolhido consiste do recíproco da temperatura efetiva dos portadores, $\beta_c(t) = 1/k_B T_c(t)$; do recíproco da temperatura dos fônons óticos (LO e TO) e acústicos, $\beta_{LO}(t) = 1/k_B T_{LO}(t)$, $\beta_{TO}(t) = 1/k_B T_{TO}(t)$ e $\beta_{AC}(t) = 1/k_B T_{AC}(t)$; e das variáveis $-\beta_c(t)v_e(t)$ e $-\beta_c(t)v_h(t)$, onde $v_e(t)$ e $v_h(t)$ são as componentes das velocidades dos elétrons e buracos na direção do campo elétrico aplicado. (tomadas em módulo).

Antes de proceder a dedução do conjunto completo das Equações Generalizadas de Transporte (EGT) para as macrovariáveis extensivas (a ser feito no capítulo subsequente), far-se-á aqui uma análise daquelas para os momenta lineares. As equações para as taxas de variação dos mesmos são obtidas através das equações (2.23), e no modelo de bandas parabólicas invertidas considerado têm a forma

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{d}{dt} \langle P_\alpha | t \rangle = nm_\alpha \frac{dv_\alpha(t)}{dt} = \langle \dot{P}_\alpha | t \rangle_{CG} + \{ \dot{P}_\alpha; \zeta_\omega(t) | t \}, \quad (3.3.1)$$

onde V é o volume ativo da amostra e

$$\langle \dot{P}_\alpha | t \rangle_{CG} = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \{ [P_\alpha, H_0 + H_I] \rho_{CG}(t) \} = n.e.\epsilon, \quad (3.3.2)$$

$$\{ \dot{P}_\alpha; \zeta_\omega(t) | t \} \equiv -v_\alpha(t) \cdot \gamma_\alpha(t), \quad (3.3.3)$$

de modo que

$$\frac{d v_{\alpha}(t)}{dt} = \frac{e \epsilon}{m_{\alpha}} - v_{\alpha}(t) \cdot \gamma_{\alpha}(t) \quad (3.3.4)$$

$\gamma_{\alpha}(t)$ pode ser interpretada como o recíproco do tempo de relaxação instantâneo de momentum dos portadores α , resultante das colisões com os diferentes tipos de fônons e dependente de todas as macrovariáveis de interesse,

$$\gamma_{\alpha}(t) \equiv \gamma_{\alpha} [\beta_c(t), \beta_{LO}(t), \beta_{TO}(t), \beta_{AC}(t), -\beta_c v_e(t), -\beta_c v_h(t)] \quad (3.3.5)$$

A equação integro-diferencial (3.3.4) ' pode ser transformada na equação integral equivalente

$$v_{\alpha}(t) = \frac{e \epsilon}{m_{\alpha}} \cdot \tau_{\alpha}(t) , \quad (3.3.6)$$

onde $\tau_{\alpha}(t)$, denominado de tempo de relaxação de transporte, é dado por

$$\tau_{\alpha}(t) = \exp\{-\psi_{\alpha}(t)\} \cdot \int_0^t dt' \exp\{\psi_{\alpha}(t')\}, \quad (3.3.7)$$

com

$$\psi_{\alpha}(t) = \int_0^t dt' \gamma_{\alpha}(t') \quad (3.3.8)$$

A equação (3.3.6) permite que se defina a condutividade $\sigma_{\alpha}(t)$ que tem uma forma típica de Drude⁽³⁹⁾, mas com tempo de relaxação $\tau_{\alpha}(t)$ dependente do tempo,

$$\sigma_{\alpha}(t) = \frac{ne^2}{m_{\alpha}} \cdot \tau_{\alpha}(t) \quad (3.3.9)$$

A mobilidade instantânea, $\mu_{\alpha}(t)$, é então

$$\mu_{\alpha}(t) = e \cdot \tau_{\alpha}(t)/m_{\alpha} \quad (3.3.10)$$

sendo diretamente proporcional à velocidade $v_{\alpha}(t)$ dos portadores.

As equações (3.3.6-10) possibilitam a dedução de propriedades gerais para os transientes ultra-rápidos dos parâmetros de transporte dos portadores quentes. Pode-se demonstrar que a velocidade $v_{\alpha}(t)$ dos portadores (e, consequentemente, também a sua mobilidade) pode apresentar uma estrutura - *máximos e mínimos* - no seu regime transiente como um resultado da evolução do estado inicial altamente fora de equilíbrio termodinâmico do PSAE.

De fato, se em um certo tempo t_{ex} , $v_{\alpha}(t)$ tem valores extremos, então a aceleração é nula, i.e.

$$\left. \frac{dv_{\alpha}(t)}{dt} \right|_{t_{ex}} = \frac{e \epsilon}{m_{\alpha}} \cdot \left. \frac{d \tau_{\alpha}(t)}{dt} \right|_{t_{ex}} \quad (3.3.11)$$

$$= \frac{e \epsilon}{m_{\alpha}} \cdot [1 - \tau_{\alpha}(t) \cdot \gamma_{\alpha}(t)]_{t_{ex}} = 0 \quad (3.3.12)$$

ou

$$\tau_{\alpha}(t_{ex}) = \gamma_{\alpha}^{-1}(t_{ex}) \quad (3.3.13)$$

Assim, o seguinte critério fica analiticamente estabelecido:

(i) Para PSAE arbitrariamente fora do equilíbrio termodinâmico e submetidos a campos elétricos de qualquer intensidade, ocorrem valores extremos nos transientes ultra-rápidos da velocidade e da mobilidade dos portadores quando existe uma interseção entre as curvas de evolução temporal dos tempos de relaxação de transporte, $\tau_{\alpha}(t)$, e de momentum, $\gamma_{\alpha}^{-1}(t)$.

Evidentemente, os extremos correspondem a máximos ou mínimos se

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{d^2 v_\alpha(t)}{dt^2} \right|_{t_{ex}} &= - \frac{e \varepsilon}{m_\alpha} \cdot \tau_\alpha(t_{ex}) \cdot \left. \frac{d\gamma_\alpha(t)}{dt} \right|_{t_{ex}} \\
 &= v_\alpha(t_{ex}) \cdot \gamma_\alpha^2(t_{ex}) \cdot \left. \frac{d\gamma_\alpha^{-1}}{dt} \right|_{t_{ex}} \quad (3.3.14)
 \end{aligned}$$

é negativa ou positiva, respectivamente. Em experimentos típicos de bombeamento e prova⁽³⁾, pode-se escrever

$$\left. \frac{d\gamma_\alpha(t)}{dt} \right|_{t_{ex}} \approx - \gamma_\alpha^2(t) \cdot \frac{\partial \gamma_\alpha^{-1}(t)}{\partial T_C(t)} \cdot \left. \frac{dT_C(t)}{dt} \right|_{t_{ex}} \quad (3.3.15)$$

ou

$$\left. \frac{d\gamma_\alpha^{-1}(t)}{dt} \right|_{t_{ex}} \approx \frac{\partial \gamma_\alpha^{-1}(t)}{\partial T_C(t)} \cdot \left. \frac{dT_C(t)}{dt} \right|_{t_{ex}} \quad (3.3.16)$$

desde que nos extremos $\dot{v}_\alpha = 0$, e a taxa de variação de T_C é muito maior do que aquela das quasi-temperaturas de fônons. Disto conclui-se que

(ii.1) O máximo (mínimo) da velocidade [ou da mobilidade] ocorre quando, na interseção entre os tempos de transporte $\tau_\alpha(t)$ e $\gamma_\alpha^{-1}(t)$, enquanto o sistema de portadores está esfriando, $\gamma_\alpha^{-1}(t)$ está crescendo (diminuindo) com T_c , i.e. $d\gamma_\alpha^{-1}(t)/dt > 0$ (< 0).

(ii.2) O máximo (mínimo) da velocidade [ou da mobilidade] ocorre quando, na interseção entre os tempos de transporte $\tau_\alpha(t)$ e $\gamma_\alpha^{-1}(t)$, enquanto o sistema de portadores está esquentando, $\gamma_\alpha^{-1}(t)$ está decrescendo (aumentando) com T_c , i.e. $d\gamma_\alpha^{-1}(t)/dt < 0$ (> 0).

Fica então demonstrado analiticamente a possibilidade de existência de máximos e mínimos nos transientes da velocidade e mobilidade dos portadores do PSAE submetido a campo elétrico. Deve-se salientar que, embora a demonstração tenha sido feita através da equação (3.3.4) obtida pelo Método do Operador Estatístico de Não-Equilíbrio, ela é válida para qualquer teoria de transporte que permita escrever a equação para a velocidade dos portadores na forma

$$\frac{dv_\alpha(t)}{dt} = \frac{e\epsilon}{m_\alpha} - \phi_\alpha(t) \cdot v_\alpha(t) \quad (3.3.17)$$

onde $\phi_\alpha(t)$ é um funcional dos parâmetros de transporte cuja forma depende da Teoria de Transporte em questão.

Para comprovar a existência dos máximos e mínimos, utilizar-se-á o Método do Operador Estatístico de Não-Equilíbrio na formulação de Zubarev para a construção das EGT pa

ra as macrovariáveis $Q_j(t)$ no próximo capítulo, solucionando-as para o caso específico do GaAs submetido a determinadas condições experimentais.

CAPÍTULO 4

TRANSIENTES ULTRA-RÁPIDOS DE TRANSPORTE

4.1. Equações de Transporte

Para testar os resultados analíticos já demonstrados, o conjunto integro-diferencial, acoplado e não-linear, das EGT que governam a evolução das seis variáveis termodinâmicas de não-equilíbrio $Q_j(t) = \langle P_j | t \rangle = \text{Tr} \{ \rho P_j \}$ escolhidas na seção 3.3 do capítulo anterior são obtidas a partir das equações (2.29) e (2.31). Sua solução para dadas condições iniciais determinará a evolução temporal dos parâmetros de transporte do PSAE submetido ao campo elétrico ϵ .

Fazendo-se uso da aproximação quasi-linear, tem-se

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{d\langle H_C | t \rangle}{dt} = \sum_{\alpha} \frac{e \cdot \epsilon}{m_{\alpha}} \cdot \langle P_{\alpha} | t \rangle - \sum_{\alpha, \eta, i} \dot{E}_{\alpha, \eta}^i(t) \quad , \quad (4.1.1)$$

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{d\langle H_{LO} | t \rangle}{dt} = \sum_{\alpha, i} \dot{E}_{\alpha, LO}^i(t) - \dot{E}_{LO, AN}(t) \quad , \quad (4.1.2)$$

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{d\langle H_{TO} | t \rangle}{dt} = \sum_{\alpha, i} \dot{E}_{\alpha, TO}^i(t) - \dot{E}_{TO, AN}(t) \quad , \quad (4.1.3)$$

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{d\langle H_{AC} | t \rangle}{dt} = \sum_{\alpha, i} \dot{E}_{\alpha, AC}^i(t) + \dot{E}_{LO, AN}(t) + \dot{E}_{TO, AN}(t) - \dot{E}_{AC, DIF}(t) \quad , \quad (4.1.4)$$

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{d\langle P_\alpha | t \rangle}{dt} = n \cdot e \cdot \epsilon - \sum_{n,i} \pi_{\alpha,n}^i(t) \quad (4.1.5,6)$$

Na equação (4.1.1) para a evolução temporal da energia dos portadores, o primeiro termo do lado direito é a taxa de variação de energia dos portadores devido ao campo elétrico ϵ aplicado (termo de Joule). O segundo termo é a taxa de variação de energia dos portadores devido à sua interação com os fônons, sendo as três diferentes contribuições dadas por

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha,n}^i(t) = & \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q},n} \cdot |M_{\alpha,n}^i(\vec{q})|^2 \cdot \{v_{\vec{q},n}(t) \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot [1 - f_{\vec{k}+\vec{q},\alpha}(t)] - \\ & - [1 + v_{\vec{q},n}(t)] \cdot f_{\vec{k}+\vec{q},\alpha}(t) \cdot [1 - f_{\vec{k},\alpha}(t)]\} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar \omega_{\vec{q},n}) \quad , \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

onde a soma em i é feita sobre todos os diferentes tipos de espalhamento dos fônons;

$$v_{\vec{q},n}(t) = 1 / \{ \exp[\beta_n(t) \cdot \hbar \omega_{\vec{q},n}] - 1 \} \quad (4.2.2)$$

são as funções de distribuição para fônons do tipo n , sendo $\omega_{\vec{q},n}$ as frequências correspondentes a cada tipo de relação de dispersão;

$$f_{\vec{k},\alpha}(t) = [4\pi^3 \hbar^3 n / (2\pi m_\alpha)^{3/2}] \cdot \beta_c^{3/2}(t) \cdot \exp\{ -\beta_c(t) \cdot [\hbar \vec{k} - m_\alpha \vec{v}_\alpha(t)]^2 / 2m_\alpha \} \quad (4.2.3)$$

são as funções de distribuição para os portadores do tipo Maxwell-Boltzmann deslocada, obtidas no limite clássico, esperado para as elevadas temperaturas e condições de excitação que irão ser tratadas⁽¹⁴⁾.

Nas equações (4.1.2-4) para a evolução temporal da energia do tipo η de fônon, o primeiro termo do lado direito é sempre a taxa de variação da energia do tipo η de fônon devido à sua interação com os portadores, sendo dado pela expressão (4.2.1). O segundo termo em (4.1.2(3)) é a taxa de transferência de energia dos fônons $LO(T0)$ para os fônons acústicos, introduzida fenomenologicamente através da aproximação do tempo de relaxação, sendo dada por

$$\dot{E}_{LO(T0),AN}(t) = \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q}, LO(T0)} \cdot \frac{v_{\vec{q}, LO(T0)}(t) - v_{\vec{q}, LO(T0)}(t, \beta_{AC})}{\tau_{LO(T0)}} \quad (4.3.1)$$

onde

$$v_{\vec{q}, LO(T0)}(t, \beta_{AC}) = 1 / \{ \exp[\beta_{AC}(t) \cdot \hbar \omega_{\vec{q}, LO(T0)}] - 1 \} \quad (4.3.2)$$

e $\tau_{LO(T0)}$ é um tempo de relaxação fenomenológico associado ao fônon $LO(T0)$, que são parâmetros ajustáveis nas equações de evolução, mas cuja ordem de grandeza pode ser obtida através de espalhamento Raman⁽⁴⁰⁾.

O último termo do lado direito da equação (4.1.4) é a taxa de variação da energia dos fônons acústicos devido ao processo de difusão de calor dos mesmos para o banho térmico,

sendo dada por

$$\dot{E}_{AC,DIF}(t) = \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q},AC} \cdot \frac{v_{\vec{q},AC}(t) - v_{\vec{q},AC}(\beta_B)}{\tau_{AC}} \quad (4.4.1)$$

onde

$$\beta_B = 1/k_B T_B, \quad (4.4.2)$$

$$v_{\vec{q},AC}(\beta_B) = 1/\{\exp[\beta_B \cdot \hbar \omega_{\vec{q},AC}] - 1\}, \quad (4.4.3)$$

e τ_{AC} é um tempo de relaxação fenomenológico para a difusão de calor do sistema de fônons acústicos para o banho térmico, que depende do coeficiente de difusão e das dimensões da superfície do volume ativo V do cristal semiconductor utilizado no experimento (11a,40).

Finalmente, nas equações (4.1.5,6) para a evolução temporal do momento dos portadores na direção do campo elétrico $\vec{E}$ aplicado, o primeiro termo do lado direito é a taxa de variação de momentum dos portadores devido ao campo elétrico. O segundo termo é a taxa de variação de momentum dos portadores devido aos processos de espalhamento com os fônons, sendo dada por

$$\begin{aligned} \dot{\pi}_{\alpha,\eta}^i(t) = & \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k},\vec{q}} \hbar q_{\epsilon,\alpha} \cdot |M_{\alpha,\eta}^i(\vec{q})|^2 \cdot \{v_{\vec{q},\eta}(t) \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot [1 - f_{\vec{k}+\vec{q},\alpha}(t)] - \\ & - [1 + v_{\vec{q},\eta}(t)] \cdot f_{\vec{k}+\vec{q},\alpha}(t) \cdot [1 - f_{\vec{k},\alpha}(t)]\} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar \omega_{\vec{q},\eta}) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \hbar q_{\epsilon, \alpha} \cdot |M_{\alpha, n}^i(\vec{q})|^2 \cdot \{ [v_{\vec{q}, n}(t) + 1] \cdot f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot [1 - f_{\vec{k} - \vec{q}, \alpha}(t)] - \\
& - v_{\vec{q}, n}(t) \cdot f_{\vec{k} - \vec{q}, \alpha}(t) \cdot [1 - f_{\vec{k}, \alpha}(t)] \} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k} - \vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar \omega_{\vec{q}, n})
\end{aligned}
\tag{4.5.1}$$

onde $\hbar q_{\epsilon, \alpha}$ é o momentum do portador α na direção do campo elétrico ϵ .

As integrações no espaço recíproco presentes nas equações (4.2.1), (4.3.1), (4.4.1) e (4.5.1) podem ser feitas analiticamente ao se tomar o modelo de Einstein e de Debye para os fônons óticos e acústicos, respectivamente.

Para as diferentes interações entre os portadores e fônons esquematizadas na figura 4.1.1, obtêm-se

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{d\langle H_C | t \rangle}{dt} = \sum_{\alpha} \left\{ \frac{e \cdot \epsilon}{m_{\alpha}} \cdot \langle P_{\alpha} | t \rangle - \dot{E}_{\alpha, AC}^{PD}(t) - \dot{E}_{\alpha, AC}^{PZ}(t) - \dot{E}_{\alpha, LO}^{FR}(t) - \dot{E}_{\alpha, LO}^{PD}(t) - \dot{E}_{\alpha, TO}^{PD}(t) \right\},
\tag{4.6.1}$$

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{d\langle H_{LO} | t \rangle}{dt} = \sum_{\alpha} \{ \dot{E}_{\alpha, LO}^{FR}(t) + \dot{E}_{\alpha, LO}^{PD}(t) \} - \dot{E}_{LO, AN}'(t),
\tag{4.6.2}$$

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{d\langle H_{TO} | t \rangle}{dt} = \sum_{\alpha} \dot{E}_{\alpha, TO}^{PD}(t) - \dot{E}_{TO, AN}'(t),
\tag{4.6.3}$$

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{d\langle H_{AC} | t \rangle}{dt} = \sum_{\alpha} \{ \dot{E}_{\alpha, AC}^{PD}(t) + \dot{E}_{\alpha, AC}^{PZ}(t) \} + \dot{E}_{LO, AN}'(t) + \dot{E}_{TO, AN}'(t) - \dot{E}_{AC, DIF}'(t),
\tag{4.6.4}$$

$$\frac{1}{V} \cdot \frac{d\langle P_{\alpha} \rangle}{dt} = n \cdot e \cdot \epsilon - \dot{\pi}_{\alpha,AC}^{PD}(t) - \dot{\pi}_{\alpha,AC}^{PZ}(t) - \dot{\pi}_{\alpha,LO}^{FR}(t) - \dot{\pi}_{\alpha,LO}^{PD}(t) - \dot{\pi}_{\alpha,TO}^{PD}(t)$$

(4.6.5,6)

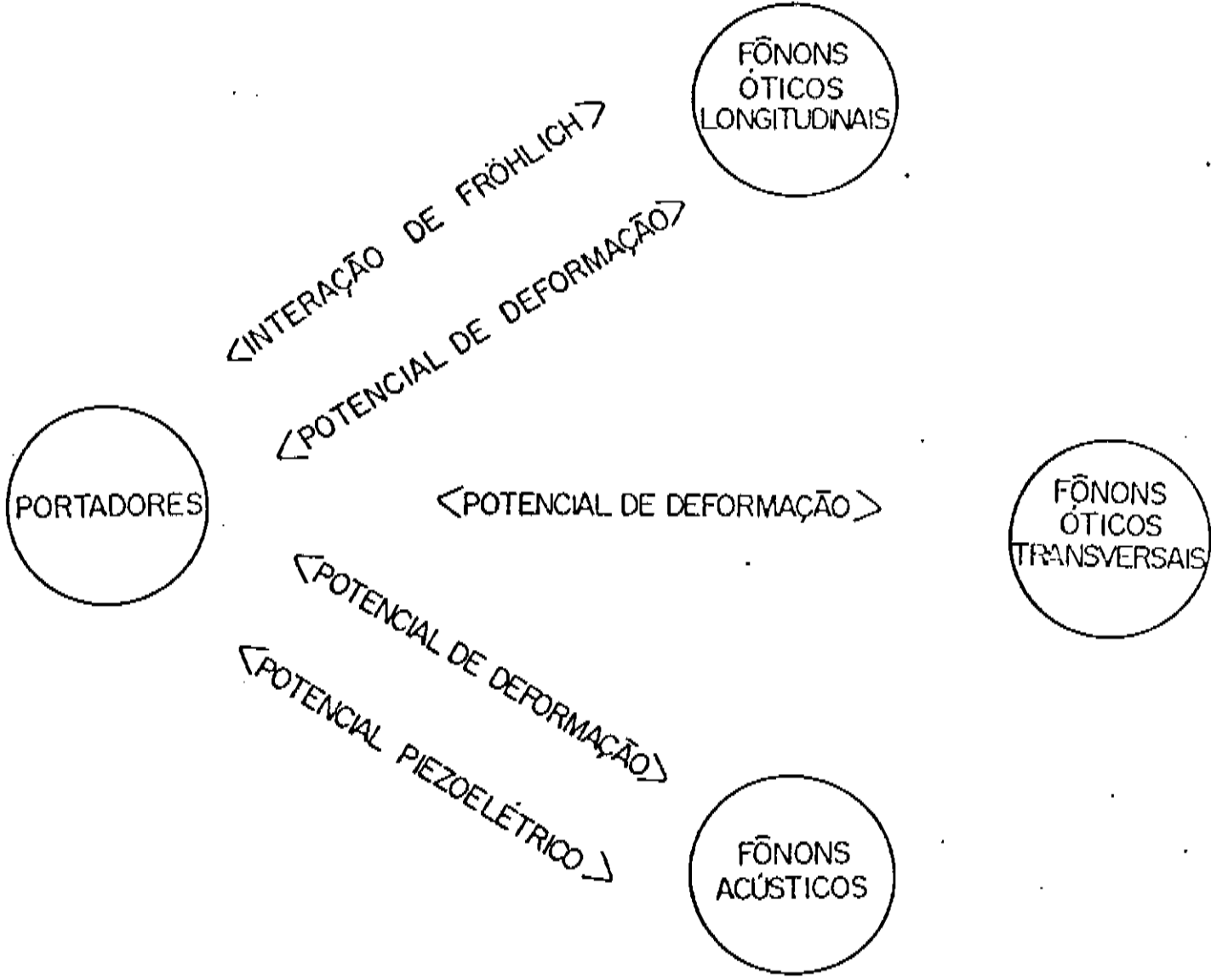


FIGURA 4.1.1 - Tipos de interação entre portadores e fônons (11.a, 13, 15).

Enquanto o primeiro termo da equação (4.6.1) é o mesmo que o da equação (4.1.1), o segundo e terceiro termos são as taxas de variação da energia dos portadores devido à sua

interação com os fônons acústicos via potencial de deformação e potencial piezoelétrico, sendo dadas respectivamente por (vide Apêndices A e B)

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha,AC}^{PD}(t) = & A_{\alpha,AC}^{PD}(t) \cdot \exp[-x_{\alpha}(t)] \cdot \{M(3,3/2,x_{\alpha}(t)) + [3 \cdot y_{\alpha}(t) - \frac{\beta_C(t)}{\beta_{AC}(t)}] \cdot M(2,3/2,x_{\alpha}(t)) - \\ & - \frac{3\pi^{1/2}}{2} \cdot y_{\alpha}^{1/2}(t) \cdot M(5/2,3/2,x_{\alpha}(t)) - \pi^{1/2} \cdot y_{\alpha}^{3/2}(t) \cdot \exp(x_{\alpha}(t)) - \\ & - \frac{1}{3} \cdot y_{\alpha}(t) \cdot [1 - 3 \cdot 2^{1/2} \cdot y_{\alpha}(t)] \cdot M(1,3/2,x_{\alpha}(t))\} \end{aligned} \quad (4.7.1)$$

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha,AC}^{PZ}(t) = & A_{\alpha,AC}^{PZ}(t) \cdot \exp[-x_{\alpha}(t)] \cdot \{M(2,3/2,x_{\alpha}(t)) + [y_{\alpha}(t) - \frac{\beta_C(t)}{\beta_{AC}(t)}] \cdot M(1,3/2,x_{\alpha}(t)) - \\ & - \pi^{1/2} \cdot y_{\alpha}^{1/2}(t) \cdot \exp[x_{\alpha}(t)]\} \end{aligned} \quad (4.7.2)$$

onde

$$A_{\alpha,AC}^{PD}(t) = \theta_{AC} \cdot n \cdot \left(\frac{2^3 \cdot 2^{1/2} \cdot m_{\alpha}^{5/2} \cdot E_{1\alpha}^2}{\pi^{3/2} \cdot \hbar^4 \cdot \rho} \right) \cdot \beta_C^{-3/2}(t) \quad , \quad (4.7.3)$$

$$A_{\alpha,AC}^{PZ}(t) = \theta_{AC} \cdot n \cdot \left(\frac{2^{1/2} \cdot m_{\alpha}^{3/2} \cdot e^2 \cdot H_{PZ}^2}{\pi^{3/2} \cdot \hbar^2 \cdot \rho \cdot \epsilon^2} \right) \cdot \beta_C^{-1/2}(t) \quad , \quad (4.7.4)$$

$$x_{\alpha}(t) = \beta_C(t) \cdot \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2(t) \quad , \quad (4.7.5)$$

$$y_{\alpha}(t) = \beta_C(t) \cdot \frac{1}{2} m_{\alpha} s^2 \quad (4.7.6)$$

$E_{1\alpha}$ é a constante de acoplamento ao potencial de deformação, H_{pZ} é a constante de acoplamento ao potencial piezoelétrico, ϵ é a permissividade, s é a velocidade do som, ρ é a densidade de material semiconductor⁽¹⁵⁾ e $M(a,b,c)$ são funções de Kummer⁽⁴¹⁾.

O quarto e quinto termos da equação (4.6.1) são as taxas de variações da energia dos portadores devido à sua interação com os fônons óticos longitudinais via interação de Fröhlich (também denominada de interação ótica polar) e potencial de deformação (no caso dos fônons óticos, denominada também de interação não-polar), sendo dadas respectivamente por (vide Apêndices C e D)

$$\dot{E}_{\alpha,LO}^{FR}(t) = A_{\alpha,LO}^{FR}(t) \cdot \exp[-z_{LO}(t) - x_{\alpha}(t)] \cdot$$

$$\cdot \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{\ell'=0}^{\infty} \frac{1}{(2\ell'+1)!} \cdot \frac{[2^3 \cdot z_{LO}(t) \cdot x_{\alpha}(t)]^{\ell'}}{2\ell-1} \cdot \{ [1+v_{LO}(t)] \cdot$$

$$\cdot \exp[-z_{LO}(t)] \cdot \Gamma(\ell+1/2) \cdot$$

$$\cdot U(\ell+1/2, \ell'+2; 2z_{LO}(t)) \cdot v_{LO}(t) \cdot \exp[z_{LO}(t)] \cdot \Gamma(\ell'+\ell+1/2) \cdot$$

$$\cdot U(\ell'+\ell+1/2, \ell'+2; 2z_{LO}(t)) \} \quad (4.8.1)$$

$$\dot{E}_{\alpha, LO}^{PD}(t) = A_{\alpha, LO}^{PD}(t) \cdot \exp[-z_{LO}(t) - x_{\alpha}(t)] \cdot$$

$$\cdot \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{[2^3 \cdot z_{LO}(t) \cdot x_{\alpha}(t)]^{\ell}}{(2\ell+1)!} \cdot \{ [1 + v_{LO}(t)] \cdot \exp[-z_{LO}(t)] \cdot \Gamma(3/2) \cdot$$

$$\cdot U(3/2, \ell+3; 2 \cdot z_{LO}(t)) - v_{LO}(t) \cdot \exp[z_{LO}(t)] \cdot \Gamma(\ell+3/2) \cdot$$

$$\cdot U(\ell+3/2, \ell+3; 2z_{LO}(t)) \} \quad (4.8.2)$$

onde

$$v_{LO}(t) = 1 / \{ \exp[\beta_{LO}(t) \cdot \hbar \omega_{LO}] - 1 \} \quad , \quad (4.8.3)$$

$$A_{\alpha, LO}^{FR}(t) = \theta_{LO} \cdot n \cdot \left(\frac{2 \cdot 2^{1/2} \cdot e^{E_{0\alpha}}}{\pi^{1/2} \cdot m_{\alpha}^{1/2}} \right) \cdot (\hbar \omega_{LO})^2 \cdot \beta_C^{3/2}(t) \quad , \quad (4.8.4)$$

$$A_{\alpha, LO}^{PD}(t) = \theta_{LO} \cdot n \cdot \left(\frac{m_{\alpha}^{3/2} \cdot D_0^2}{\pi^{3/2} \cdot \hbar^2 \rho} \right) \cdot (\hbar \omega_{LO})^2 \cdot \beta_C^{3/2}(t) \quad , \quad (4.8.5)$$

$$z_{LO}(t) = \beta_C(t) \cdot \hbar \omega_{LO} / 2 \quad , \quad (4.8.6)$$

$E_{0\alpha}$ é o campo de Fröhlich, D_0 é a constante de acoplamento ao potencial de deformação dos fônons ôticos longitudinais, ω_{LO} é a frequência dos fônons ôticos longitudinais⁽¹⁵⁾, $\Gamma(a)$ são funções gama e $U(a, b; c)$ são funções hipergeométricas confluentes⁽⁴¹⁾.

O sexto termo da equação (4.6.1) é a taxa de variação da energia dos portadores devido à sua interação com os fônons óticos transversais via potencial de deformação, sendo obtido de (4.8.2) ao se fazer a substituição do índice LO pelo índice TO.

O último termo presente na equação (4.6.2(3)) é a taxa de transferência de energia dos fônons LO(TO) para os fônons acústicos, sendo dada por

$$\dot{E}'_{LO(TO),AN}(t) = \frac{1}{V_{cell}} \cdot \hbar \omega_{LO} \cdot \tau_{LO}^{-1} \cdot [\nu_{LO(TO)}(t) - \nu_{LO(TO)}(t, \beta_{AC})] \quad (4.9.1,2)$$

onde V_{cell} é o volume da célula unitária.

O último termo da equação (4.6.4) é a taxa de transferência de energia dos fônons acústicos para o banho térmico, sendo dada por

$$\dot{E}'_{AC,AN}(t) = \frac{1}{V_{cell}} \cdot \tau_{AC}^{-1} \cdot \left[\frac{1}{\beta_{AC}(t)} - \frac{1}{\beta_B} \right] \quad (4.10.1)$$

Enquanto o primeiro termo do lado direito das equações (4.6.5,6) é o mesmo que o das equações (4.1.5,6), o segundo e terceiro termos são as taxas de variação de momentum dos portadores devido ao processo de espalhamento com os fônons acústicos via potencial de deformação e potencial piezoelétrico, sendo dados respectivamente por (vide Apêndices A e B)

$$\begin{aligned} \pi_{\alpha,AC}^{PD}(t) = & B_{\alpha,AC}^{PD}(t) \cdot v_{\alpha}(t) \cdot \exp[-x_{\alpha}(t)] \cdot \{ [1 - 6 \cdot y_{AC,\alpha}(t)] \cdot M(3, 5/2, x_{\alpha}(t)) + \\ & + 2 \cdot \pi^{1/2} \cdot y_{AC,\alpha}^{1/2}(t) \cdot [\beta_{AC}(t)/\beta_C(t)]^{1/2} \cdot M(7/2, 5/2, x_{\alpha}(t)) + \dots \} \end{aligned} \quad (4.11.1)$$

$$\begin{aligned} \pi_{AC,PZ}^{\alpha}(t) = & B_{\alpha,AC}^{PZ}(t) \cdot v_{\alpha}(t) \cdot \exp[-x_C(t)] \cdot [1 - 2y_{AC,\alpha}(t)] \cdot M(2, 5/2; x_{\alpha}(t)) + \\ & + y_{AC,\alpha}^{1/2}(t) \cdot [\beta_{AC}(t)/\beta_C(t)] \cdot \exp[x_C(t)] \} \end{aligned} \quad (4.11.2)$$

onde

$$B_{\alpha,AC}^{PD}(t) = \theta_{AC} \cdot n \cdot \left(\frac{2^{3/2} \cdot m_{\alpha}^{5/2} \cdot E_{l\alpha}^2}{\pi^{3/2} \cdot \hbar^4 \cdot s^2 \cdot \rho} \right) \cdot \frac{\beta_C^{-1/2}(t)}{\beta_{AC}(t)} \quad , \quad (4.11.3)$$

$$B_{\alpha,AC}^{PZ}(t) = \theta_{AC} \cdot n \cdot \left(\frac{2^{1/2} \cdot m_{\alpha}^{3/2} \cdot e^2 H_{PZ}^2}{3\pi \cdot \hbar^2 \cdot s^2 \cdot \epsilon^2 \cdot \rho} \right) \cdot \frac{\beta^{1/2}(t)}{\beta_{AC}(t)} \quad , \quad (4.11.4)$$

$$y_{AC,\alpha}(t) = \beta_{AC}(t) \cdot \frac{1}{2} m_{\alpha} \cdot s^2 \quad . \quad (4.11.5)$$

O quarto e quinto termos das equações (4.6.5,6) são a taxa de variação de momentum dos portadores devido ao processo de espalhamento com os fônons óticos longitudinais via interação de Fröhlich e potencial de deformação, sendo dadas respectivamente por

$$\pi_{\alpha, L0}^{FR}(t) = B_{\alpha, L0}^{FR}(t) \cdot x_{\alpha}^{-1/2}(t) \cdot \exp[-2 \cdot z_{L0}(t) - x_{\alpha}(t)].$$

$$\cdot \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{2^{3\ell}}{(2\ell+1)!} - \frac{2^{3\ell}}{(2\ell)!} \right] \cdot [x_{\alpha}(t) \cdot z_{L0}(t)]^{\ell}.$$

$$\cdot \{ \Gamma(\ell+1/2) \cdot [(1+v_{L0}(t)) \cdot U(3/2, \ell+2; 2z_{L0}(t)) + v_{L0}(t) \cdot U(\ell+1/2, \ell+2; 2z_{L0}(t))] +$$

$$+ \sum_{\ell'=1}^{\infty} \frac{1}{(2\ell'-1)!} \cdot [(1+v_{L0}(t)) \cdot \Gamma(\ell'+1/2) \cdot U(\ell'+1/2, \ell+1; 2z_{L0}(t)) -$$

$$- v_{L0}(t) \cdot \Gamma(\ell+\ell'-1/2) \cdot U(\ell+\ell'-1/2, \ell+1; 2z_{L0}(t))] \} > \quad (4.12.1)$$

$$\pi_{\alpha, L0}^{PD}(t) = B_{\alpha, L0}^{PD}(t) \cdot x_{\alpha}^{-1/2}(t) \cdot \exp[-x_{\alpha}(t)] \cdot \left\{ \left[1 + \frac{v(t)}{v_{L0}(t)} \right] + \exp[-2z_{L0}(t)] \cdot \left[1 - \frac{v(t)}{v_{L0}(t)} \right] \right\}$$

$$\cdot \left\{ \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{2^{3\ell}}{(2\ell+1)!} - \frac{2^{3\ell}}{(2\ell)!} \right] \cdot \frac{1}{2\ell+1} \cdot x_{\alpha}(t) \cdot z_{L0}(t) \right]^{\ell} \cdot \frac{6 \cdot z_{L0}(t)}{2\ell+1} \cdot U(5/2, \ell+4; 2z_{L0}(t)) \} +$$

$$+ \left\{ \left[1 - \frac{v(t)}{v_{L0}(t)} \right] + \exp[-2 \cdot z_{L0}(t)] \cdot \left[1 - \frac{v(t)}{v_{L0}(t)} \right] \right\}.$$

$$\cdot \left\{ \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{2^{3\ell}}{(2\ell+1)!} - \frac{2^{3\ell}}{(2\ell)!} \right] \cdot [x_{\alpha}(t) \cdot z_{L0}(t)]^{\ell} \cdot [U(3/2, \ell+2; 2z_{L0}(t)) +$$

$$+ (1 - \frac{3}{2\ell+1}) \cdot U(3/2, \ell+3; 2z_{L0}(t))] \} > \quad (4.12.2)$$

onde

$$B_{\alpha, L0}^{FR}(t) = \theta_{L0} \cdot n \cdot \left(\frac{e^{E_{0\alpha}}}{\pi^{1/2}} \right) \cdot \hbar \omega_{L0} \cdot \beta_C(t) \quad , \quad (4.12.3)$$

$$B_{\alpha, L0}^{PD}(t) = \theta_{L0} \cdot n \cdot \left(\frac{m_{\alpha}^2 \cdot E_{10\alpha}^2}{2^2 \cdot \pi \cdot \hbar^4 \cdot s^2 \cdot \rho} \right) \cdot (\hbar \omega_{L0})^{5/2} \cdot v_{L0}(t) \cdot \beta_C(t) \quad , \quad (4.12.4)$$

$$v(t) = 1 / \{ \exp[\beta_C(t) \cdot \hbar \omega_{L0}] - 1 \} \quad . \quad (4.12.5)$$

Finalmente, os últimos termos das equações (4.6.5,6) são a taxa de variação de momentum dos portadores devido ao processo de espalhamento com os fônons óticos transversais via potencial de deformação, sendo obtido de (4.12.2) ao se fazer a substituição do índice L0 pelo índice T0.

4.2. Propriedades dos Transientes

Importantes propriedades dos transientes ultra-rápidos de transporte podem ser obtidas ainda sem se fazer necessário a resolução do conjunto de equações diferenciais (4.6.1-6), utilizando-se para isto dos tempos de relaxação de momentum e transporte introduzidos na seção (3.3). Fazendo-se a hipótese de que a interação de Fröhlich é a mais importante entre todas, como é normalmente o caso^(14,15), obtêm-se de (4.6.5,6) e (4.12.1) que

$$\gamma_{\alpha}(t) = \pi_{\alpha, L0}^{FR}(t) / [n \cdot m_{\alpha} \cdot v_{\alpha}(t)] \quad , \quad (4.13.1)$$

No limite $\beta_C(t) \cdot m_{\alpha} v_{\alpha}^2(t) / 2 \ll 1$, consegue-se somar a série em (4.12.1) e obter

$$\gamma_{\alpha}(t) = \gamma_{\alpha 0} \cdot x_{L0}^{3/2}(t) \cdot \exp[z_{L0}(t)] \cdot v_{L0}(t).$$

$$z_{L0} = \frac{\hbar v_{L0}}{2 k T_c} \quad (4.8.6)$$

$$\chi_{L0} \equiv z_{L0}$$

$$\{ [(1 + \frac{v(t)}{v_{L0}(t)}) + \exp(-2 \cdot z_{L0}(t)) \cdot (1 - \frac{v(t)}{v_{L0}(t)})] \cdot K_1(z_{L0}(t)) -$$

$$- [(1 - \frac{v(t)}{v_{L0}(t)}) - \exp(-2 \cdot z_{L0}(t)) \cdot (1 - \frac{v(t)}{v_{L0}(t)})] \cdot K_0(z_{L0}(t)) \}$$

(4.13.2)

onde

$$v(t) = 1 / [\exp(\beta_C(t) \cdot \hbar \omega_{L0}) - 1] \quad , \quad (4.13.3)$$

$$\gamma_{\alpha 0} = (2^{5/2} \cdot e E_{0\alpha} / 3) \cdot (1 / (2 \pi m_{\alpha} \hbar \omega_{L0}))^{1/2} \quad (4.13.4)$$

Na Figura (4.2.1) é mostrado a dependência de $\gamma_{\alpha} / \gamma_{\alpha 0}$ em T_C / θ_0 e T_{L0} / θ_0 , onde θ_0 é a temperatura de Einstein, $k_B \theta_0 = \hbar \omega_{L0}$. Nela é claramente discernível um mínimo em $\gamma_{\alpha}^{-1} / \gamma_{\alpha 0}^{-1}$ (máximo em $\gamma_{\alpha} / \gamma_{\alpha 0}$) localizado em torno de $T_C / \theta_0 \sim 1.5$ e que $\partial \gamma_{\alpha}^{-1} / \partial T_C$ é maior do que $\partial \gamma_{\alpha}^{-1} / \partial T_{L0}$, resultados válidos para qualquer semicondutor polar de bandas invertidas pois para a confecção do gráfico foram utilizadas variáveis reduzidas.

Deste comportamento pode-se antecipar várias outras propriedades dos transientes, além daquelas (i) e (ii) enunciadas no Capítulo 3, Secção 3.3.

(iii) O máximo da velocidade $v_{\alpha}(t)$ é um overshoot se $\gamma^{-1}(t_{ex}^+) > \gamma_{\alpha, ST}^{-1}$.

Demonstração: Consequência direta de que $v_{\alpha}(t_{ex}^+) = (e/m_{\alpha}) \cdot \epsilon$. $\gamma^{-1}(t_{ex}^+)$ e $v_{\alpha, ST} = (e/m_{\alpha}) \cdot \epsilon \cdot \gamma_{ST}^{-1}$, onde t_{ex}^+ é o tempo em que o máximo ocorre.

(iv) O máximo de $v_{\alpha}(t)$ ocorre quando $t_{ex} \geq \gamma^{-1}(t_{ex}) = \tau(t_{ex})$.

Demonstração: Desde que no máximo

$$1 = \gamma(t_{ex}) \cdot \tau(t_{ex}) = \gamma(t_{ex}) \cdot e^{-\psi(t_{ex})} \int_0^{t_{ex}} dt' e^{\psi(t')} \leq t_{ex} \cdot \gamma(t_{ex})$$

pois $\psi(t)$ é função monotônica e crescente de t .

(v) Existem limites para a intensidade do campo elétrico e que, para uma dada condição inicial, determinam a existência de regimes com:

- (a) Evolução normal - inexistência de máximos e mínimos;
- (b) Máximos (sem overshoot) e mínimos;
- (c) Máximos (com overshoot) e mínimos.

Demonstração: Ela é consequência do fato da condição inicial do sistema (principalmente a temperatura inicial dos portadores) e a intensidade do campo elétrico aplicado determinarem, na sua evolução temporal, a passagem (casos b,c) ou não (caso a) do tempo de relaxação de momentum $\gamma_\alpha(t)$ pelo ponto de inflexão.

A existência ou não da passagem acima mencionada é determinada pela competição entre a taxa de aquecimento dos portadores pelo campo elétrico aplicado e a taxa de relaxação de energia para os fônons (ver equação (4.1.1)),

$$\frac{d\langle H_C | t \rangle}{dt} = e \cdot \sum_{\alpha} I_{\alpha}(t) - \sum_{\alpha, \eta} \dot{E}_{C, \eta}^{\alpha}(t) \quad (4.14.1)$$

onde foram introduzidas as densidades de corrente

$$I_{\alpha}(t) = n \cdot e \cdot v_{\alpha}(t) \quad (4.14.2)$$

que satisfazem às equações (ver equação (3.3.4))

RECÍPROCO DO TEMPO DE RELAXAÇÃO DE MOMENTUM

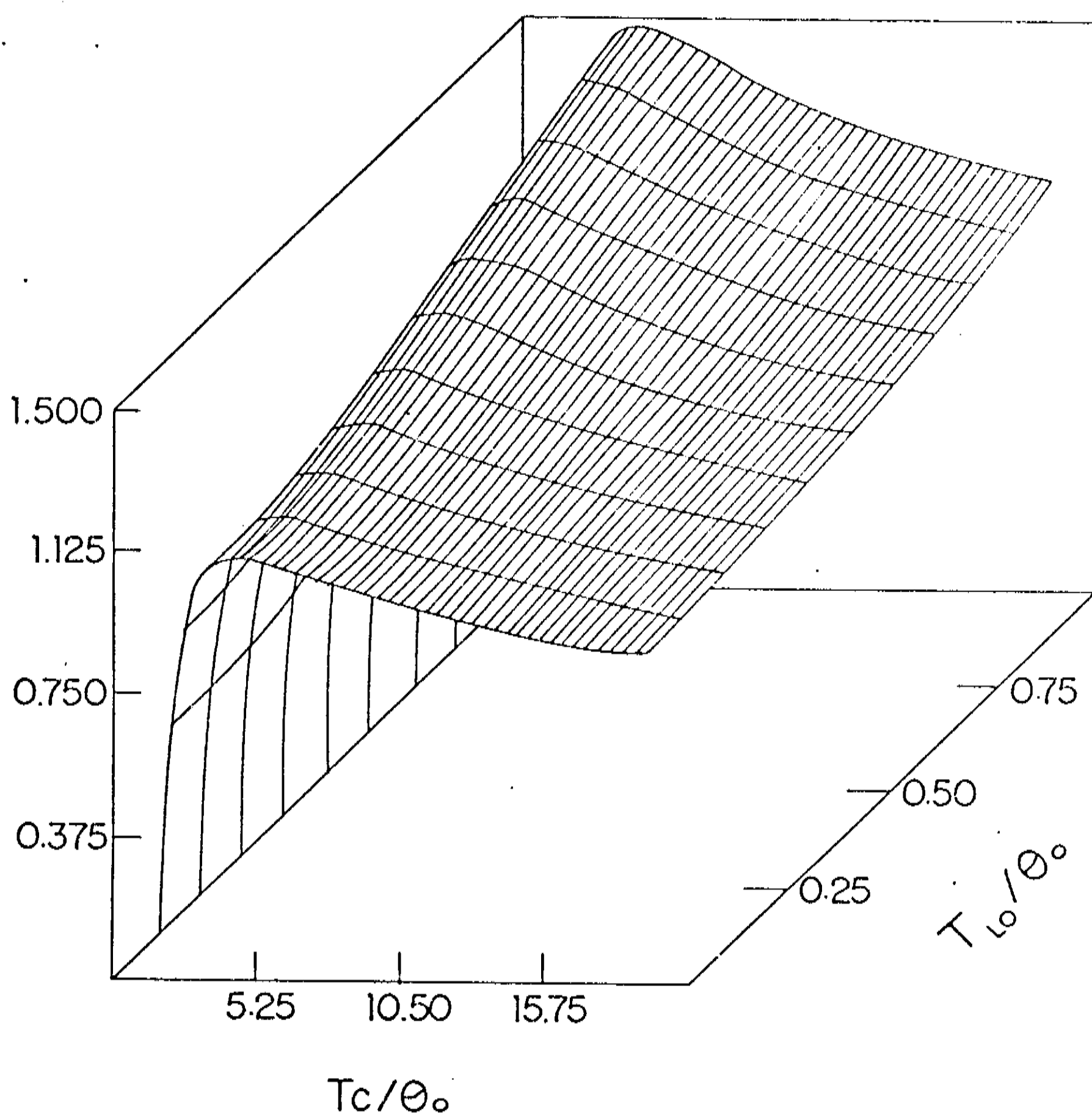


FIGURA 4.2.1 - Dependência do recíproco do tempo de relaxação de momentum renormalizado, $(\gamma_\alpha / \gamma_{0\alpha})$, na quasi-temperatura dos portadores para vários valores da quasi-temperatura dos fônons T_0 (as quasi-temperaturas são normalizadas na forma indicada no texto).

$$\frac{dI_{\alpha}(t)}{dt} = (ne^2/m_{\alpha}) \cdot \epsilon - \gamma_{\alpha}(t) \cdot I_{\alpha}(t) \quad (4.14.3)$$

obtendo-se para o estado estacionário que

$$I_{\alpha,ST} = (n e^2/m_{\alpha}) \cdot \epsilon \cdot \gamma_{\alpha,ST}^{-1} \quad (4.14.4)$$

A condutividade diferencial $\bar{\sigma}$

$$\sigma_{\alpha,DIF} = \frac{dI_{\alpha,ST}}{d\epsilon} = (ne^2/m_{\alpha}) \cdot \gamma_{\alpha,ST}^{-1} + (ne^2/m_{\alpha}) \cdot \epsilon \cdot \frac{d\gamma_{\alpha,ST}^{-1}}{d\epsilon} \quad (4.15.1)$$

e portanto o sistema $\bar{\sigma}$ não-ôhmico. No entanto, como $d\gamma_{\alpha,ST}^{-1}/d\epsilon \approx (\partial \gamma_{\alpha,ST}^{-1}/\partial T_{C,ST}) \cdot (dT_{C,ST}/d\epsilon)$ $\bar{\sigma}$ é pequeno e $\gamma_{\alpha,ST}^{-1}$ $\bar{\sigma}$ é aproximadamente constante para campos elétricos baixos e intensos, prevê-se comportamento ôhmico nestes limites⁺.

⁺ Deve-se lembrar que no modelo considerado não se está levando em conta transições intervalas, e portanto a não-ohmicidade em campos elétricos intensos devido à resistência diferencial negativa não deveria existir.

4.3. Transientes Ultra-Rápidos de Transporte do PSAE em GaAs

Para verificação dos resultados obtidos analiticamente nas seções anteriores, irá se considerar agora o caso específico do plasma fotocriado no semicondutor polar de gap direto GaAs nas condições iniciais da Tabela 4.3.1.

Duração do Pulso de Excitação	0.25 psec
Energia dos Fôtons	4 eV
Excesso de Energia dos Portadores (Por Par)	2.57 eV
Temperatura Inicial dos Portadores	6700 K
Temperatura Inicial dos Fônons Ôticos	303 K
Temperatura Inicial dos Fônons Acústicos	300 K
Temperatura do Banho Térmico	300 K
Densidade dos Portadores Fotoinjetados	$2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Tempo de Relaxação dos Fônons LO e TO	10 psec
Tempo de Relaxação dos Fônons Acústicos	10^3 psec

TABELA 4.3.1 - *Condições iniciais correspondentes a uma situação experimental típica da espectroscopia ôtica de resolução temporal ultra-rápida^(30, 33).*

Devido ao tratamento numérico das equações (4.6.1-6) ser muito difícil-uma consequência da complexidade das expressões (4.7.1-4.12.5), a solução do sistema de equações diferenciais acopladas ficará restrita ao limite $\beta_C(t) \cdot \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2(t) \ll 1$ (sempre válido em altas temperaturas),

quando então os termos associados à dissipação da energia dos portadores através da interação com os fônons ficam na forma

$$\dot{E}_{\alpha,AC}^{PD}(t) = A_{\alpha,AC}^{PD}(t) \cdot \left[1 - \frac{\beta_C(t)}{\beta_{AC}(t)} \right] \quad , \quad (4.17.1)$$

4.17.1

$$\dot{E}_{\alpha,AC}^{PZ}(t) = A_{\alpha,AC}^{PZ}(t) \cdot \left[1 - \frac{\beta_C(t)}{\beta_{AC}(t)} \right] \quad , \quad (4.17.2)$$

$$\dot{E}_{\alpha,LO}^{FR}(t) = n \cdot \theta_{LO} \cdot e E_{0\alpha} \cdot \left(\frac{4\hbar\omega_{LO}}{\pi m_{\alpha}} \right)^{1/2} \cdot \left[1 - \frac{v_{LO}(t)}{v(t)} \right] \cdot z_{LO}^{1/2}(t) \cdot \exp[-z_{LO}(t)] \cdot K_0(z_{LO}(t)) \quad (4.17.3)$$

$\theta_{LO} = \frac{1}{2} \frac{d\omega_{LO}}{dt}$

$$\dot{E}_{\alpha,LO}^{PD}(t) = n \cdot \theta_{LO} \cdot D_0^2 \cdot \left(\frac{2m_{\alpha}^3 \cdot \hbar\omega_{LO}}{\pi^3 \cdot \hbar^4 \cdot \rho} \right)^{1/2} \cdot \left[1 - \frac{v_{LO}(t)}{v(t)} \right] \cdot z_{LO}^{1/2}(t) \cdot \exp[-z_{LO}(t)] \cdot K_1(z_{LO}(t)) \quad (4.17.4)$$

$$\dot{E}_{\alpha,TO}^{PD}(t) = \dot{E}_{\alpha,LO+TO}^{PD}(t) \quad , \quad (4.17.5)$$

enquanto os termos associados à troca de momentum entre os portadores e fônons ficam na forma

$$\pi_{\alpha,AC}^{PD}(t) = B_{\alpha,AC}^{PD}(t) \cdot v_{\alpha}(t) \quad , \quad (4.18.1)$$

4.18.1

$$\pi_{\alpha,AC}^{PZ}(t) = B_{\alpha,AC}^{PZ}(t) \cdot v_{\alpha}(t) \quad , \quad (4.18.2)$$

$$\pi_{\alpha,LO}^{FR}(t) = \theta_{LO} \cdot n \cdot m_{\alpha} \cdot \gamma_{\alpha}(t) \cdot v_{\alpha}(t) \quad , \quad (4.18.3)$$

↑

4.18.3

$$\begin{aligned} \dot{\pi}_{\alpha, LO}^{PD}(t) = & \theta_{LO} \cdot n \cdot \left(\frac{2^{-1/2} \cdot m_{\alpha}^{3/2} \cdot E_{10\alpha}^2}{3\pi^{3/2} \cdot \hbar^4 \cdot s \cdot \rho} \right) \cdot (\hbar\omega_{LO})^3 \cdot v_{LO}(t) \cdot \beta_C^{3/2}(t) \cdot \exp[z_{LO}(t)] \cdot v_{\alpha}(t) \cdot \\ & \cdot \{ [(1 + \frac{v(t)}{v_{LO}(t)}) + \exp(-2 \cdot z_{LO}(t)) \cdot (1 - \frac{v(t)}{v_{LO}(t)})] \cdot K_2(z_{LO}(t)) - \\ & - [(1 - \frac{v(t)}{v_{LO}(t)}) - \exp(-2 \cdot z_{LO}(t)) \cdot (1 - \frac{v(t)}{v_{LO}(t)})] \cdot K_1(z_{LO}(t)) \} \end{aligned} \quad (4.18.4)$$

$$\dot{\pi}_{\alpha, TO}^{PD}(t) = \dot{\pi}_{\alpha, LO \rightarrow TO}^{PD}(t) \quad , \quad (4.18.5)$$

com $\gamma_{\alpha}(t)$ dado pela expressão (4.13.2).

Fazendo as hipóteses de que:

(a) As contribuições devido ao espalhamento dos fônons acústicos pelo potencial piezoelétrico são bem menores do que aquelas originadas do espalhamento pelo potencial de deformação⁽¹⁵⁾,

(b) As contribuições devido ao espalhamento dos fônons óticos pelo potencial de deformação são bem menores do que aquelas originadas do espalhamento pela interação de Fröhlich⁽¹⁵⁾,

(c) A quasi-temperatura dos fônons acústicos se mantém praticamente constante e igual à temperatura do banho⁽³⁰⁾,

o sistema (4.6.1-6) é reduzido a um conjunto de quatro equações diferenciais de 1ª ordem, acopladas e não-lineares para as variáveis $\langle H_C | t \rangle$, $\langle H_{LO} | t \rangle$ e $\langle P_{\alpha} | t \rangle$. Como estas macrovariáveis

veis se relacionam aos parâmetros termodinâmicos através das expressões

$$\langle H_C | t \rangle = \sum_{\vec{k}, \alpha} \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \cdot f_{\vec{k}, \alpha}(t) \quad , \quad (4.19.1)$$

$$\langle H_{LO} | t \rangle = N \hbar \omega_{LO} \cdot v_{LO}(t) \quad , \quad (4.19.2)$$

$$\langle P_C | t \rangle = V \cdot n \cdot m_{\alpha} \cdot v_{\alpha}(t) \quad , \quad (4.19.3,4)$$

obtêm-se o seguinte sistema de equações diferenciais para as quantidades $\beta_C(t)$, $\beta_{LO}(t)$, $v_e(t)$ e $v_h(t)$:

$$\frac{d\beta_C(t)}{dt} = - \frac{\beta_C^2(t)}{3} \cdot \sum_{\alpha} \{ \pi_{\alpha, LO}^{FR}(t) - \dot{E}_{\alpha, AC}^{PD}(t) - \dot{E}_{\alpha, LO}^{FR}(t) \} \quad , \quad (4.20.1)$$

$$\frac{d\beta_{LO}(t)}{dt} = \frac{2 V_{cell}}{(\hbar \omega_{LO})^2} \cdot [1 - \cosh(\beta_{LO}(t) \cdot \hbar \omega_{LO})] \cdot \{ \sum_{\alpha} \dot{E}_{\alpha, LO}^{FR}(t) - \dot{E}_{LO, AN}(t) \} \quad , \quad (4.20.2)$$

$$\frac{dv_{\alpha}}{dt} = \frac{e \cdot \epsilon}{m_{\alpha}} - \pi_{\alpha, LO}^{FR}(t) + \pi_{\alpha, AC}^{PD}(t) \quad , \quad (4.20.3,4)$$

As equações (4.20.1-4) são solucionadas numericamente utilizando-se para isto os valores dos parâmetros do GaAs presentes na literatura e as condições iniciais da Tabela 4.3.1.

A Figura 4.3.1 mostra a evolução temporal da temperatura dos portadores, $T_C(t) = 1/[k_B \cdot \beta_C(t)]$, para vários

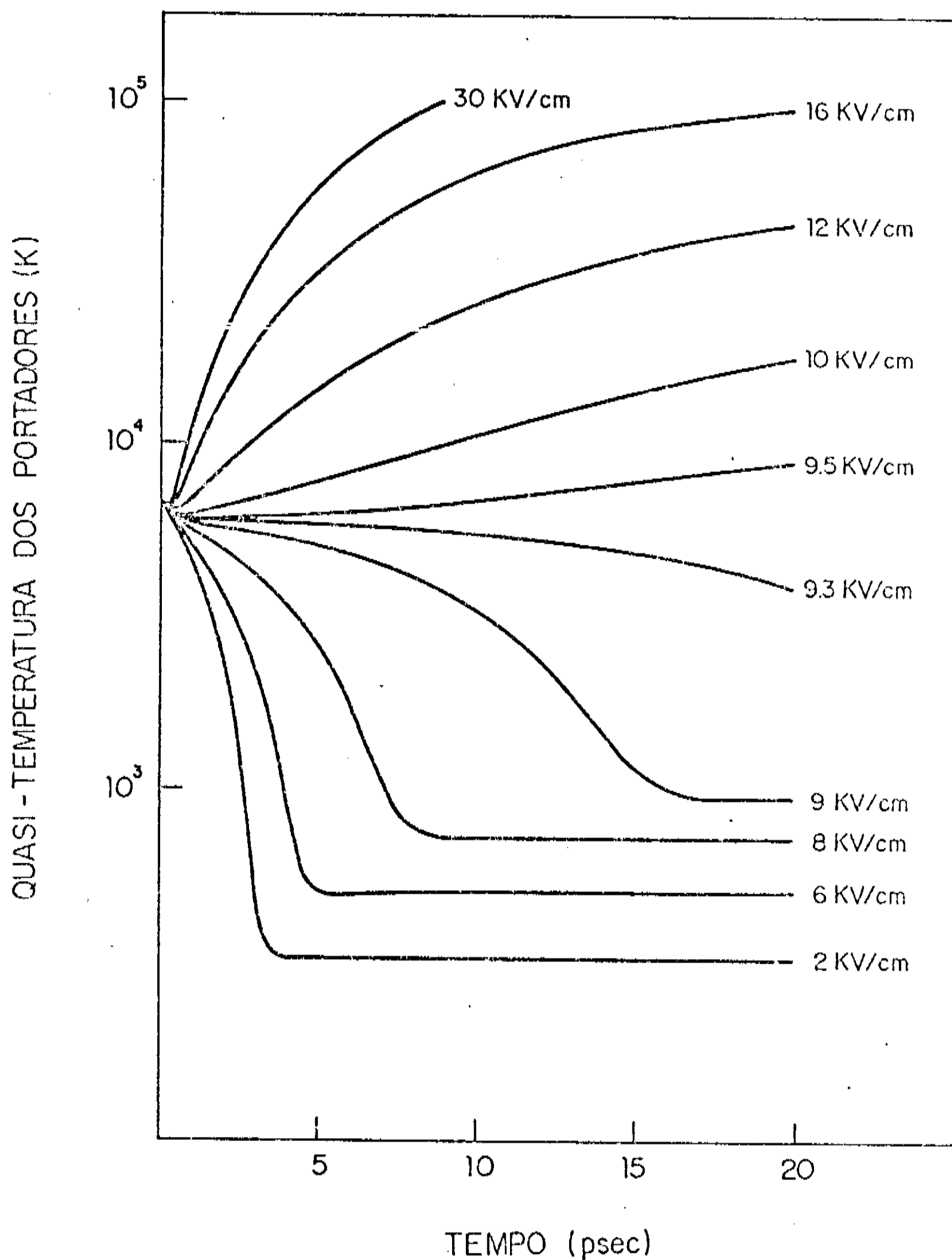


FIGURA 4.3.1 - Evolução temporal da quasi-temperatura dos portadores para diferentes campos elétricos aplicados.

valores do campo elétrico ϵ . Pode se observar que, para campos $\epsilon \lesssim 4$ kv/cm, os portadores (inicialmente com $T_C = 6700$ K) sofrem um processo contínuo de esfriamento, relaxando todo o seu excesso inicial de energia para a rede em tempos inferiores a 5 psec, ao final do qual sua temperatura estacionária é próxima àquela da rede; quando 4 kv/cm $\lesssim \epsilon \lesssim 9.4$ kv/cm, os portadores ainda estão em regime de esfriamento, sendo porém levados a estados estacionários em tempos $5 \text{ psec} \leq t \leq 30 \text{ psec}$ caracterizados por quasi-temperaturas superiores àquela do banho térmico mas inferior a sua temperatura inicial; para campos $\epsilon \gtrsim 9.4$ kv/cm observa-se uma mudança do regime de esfriamento para o de aquecimento no qual as quasi-temperaturas estacionárias finais dos portadores alcançadas em $t > 30$ psec são superiores aquela sua temperatura inicial.

A Figura 4.3.2 mostra a evolução temporal da quasi-temperatura dos fônons L0, $T_{L0} = 1/[k_B \cdot \beta_{L0}(t)]$, para vários valores do campo elétrico ϵ . Por ela se comprova que a taxa de variação da quasi-temperatura dos portadores é muito maior do que aquela da quasi-temperatura dos fônons L0, fato utilizado no Capítulo 3 para o estabelecimento analítico do critério (ii) para a existência de máximos e/ou mínimos na velocidade dos portadores. Embora a variação temporal da temperatura dos fônons L0 não seja fator de fundamental importância nas propriedades de transporte⁺, pode se observar que a evolução

⁺ Este resultado foi obtido ao se solucionar as equações (4.20.1-4) mantendo-se constante a temperatura dos fônons L0. No entanto, ao se levar em conta uma perturbação intensa dos fônons - que seriam então caracterizados por funções de distribuição de não-equilíbrio, o resultado deixa de ser válido.

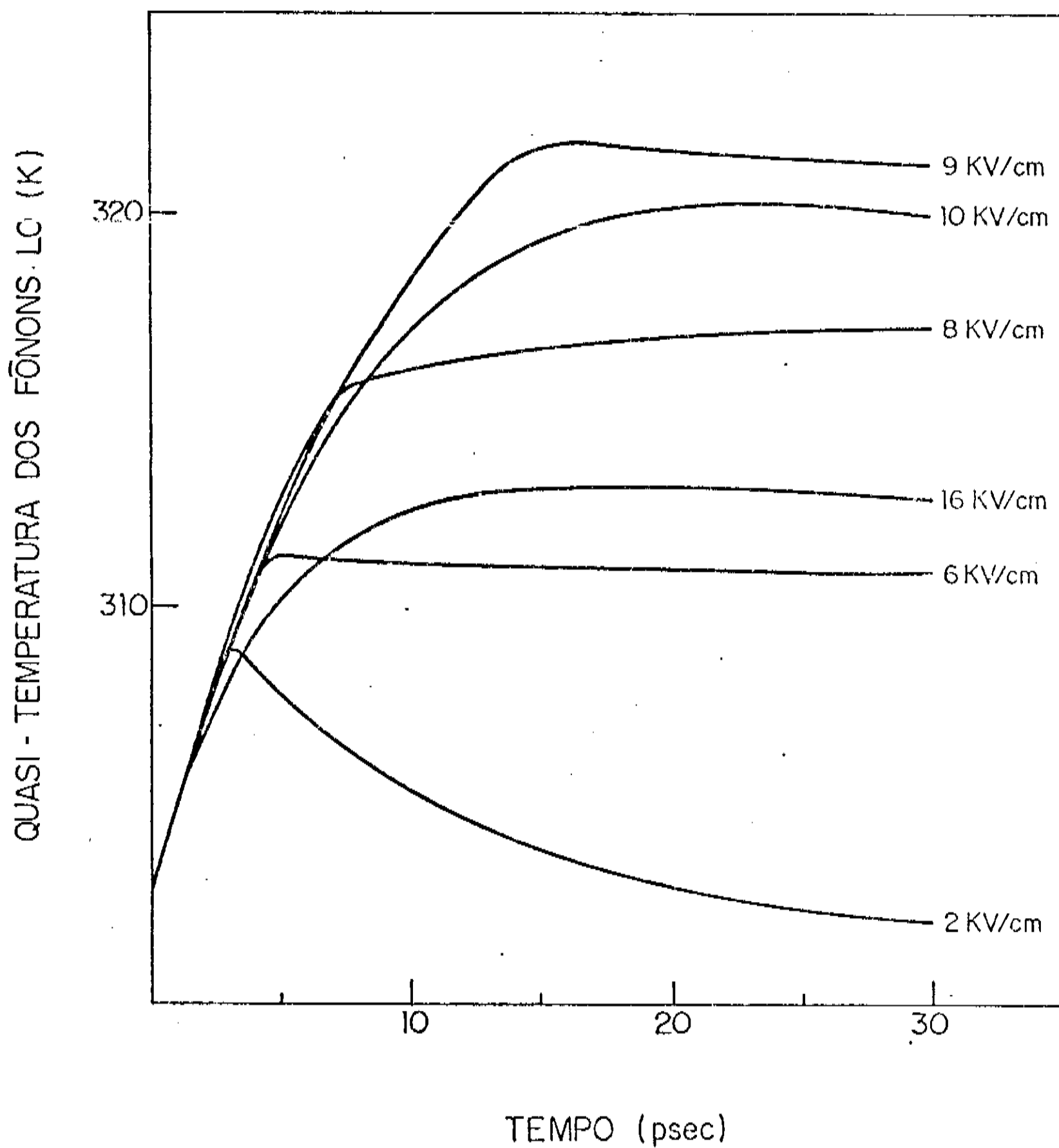


FIGURA 4.3.2 - Evolução temporal da quasi-temperatura dos fônons óticos longitudinais para diferentes campos elétricos aplicados.

temporal da quasi-temperatura dos fônons LO é determinada pelo estado inicial de não-equilíbrio do sistema acoplado portadores-fônons quando $\epsilon \lesssim 4.0$ kv/cm; quando 4.0 kv/cm $\lesssim \epsilon \lesssim 9.4$ kv/cm, a variação da quasi-temperatura do sub-sistema de fônons LO cresce com a intensidade do campo aplicado, enquanto para $\epsilon \gtrsim 9.4$ kv/cm esta variação decresce, o que mostra a ineficiência da interação portador-fônon LO para os campos mais intensos.

As Figuras 4.3.3,4 mostram a evolução temporal da velocidade de deslocamento dos elétrons e buracos, respectivamente, enquanto a Figura 4.3.5 mostra a evolução temporal dos tempos de relaxação (renormalizados) definidos no Capítulo 3. Em conjunto elas comprovam a existência de estruturas - máximos e/ou mínimos - no regime transiente como um resultado da evolução de um dado estado inicial altamente fora de equilíbrio termodinâmico do PSAE, cuja possibilidade de existência tinha sido demonstrada analiticamente no Capítulo 3, critérios (i,ii).

Na evolução temporal da velocidade de deslocamento dos portadores estão claramente presentes três situações:

- (a) Estruturas sem overshoot a campos baixos;
- (b) Estruturas com overshoot a campos moderados;
- (c) Evolução normal (monotônica crescente) a campos intensos.

Para cada uma destas situações, pode-se notar-se que a intersecção entre os tempos de relaxação ocorrem justamente no instante em que as velocidades dos elétrons apresentam má-

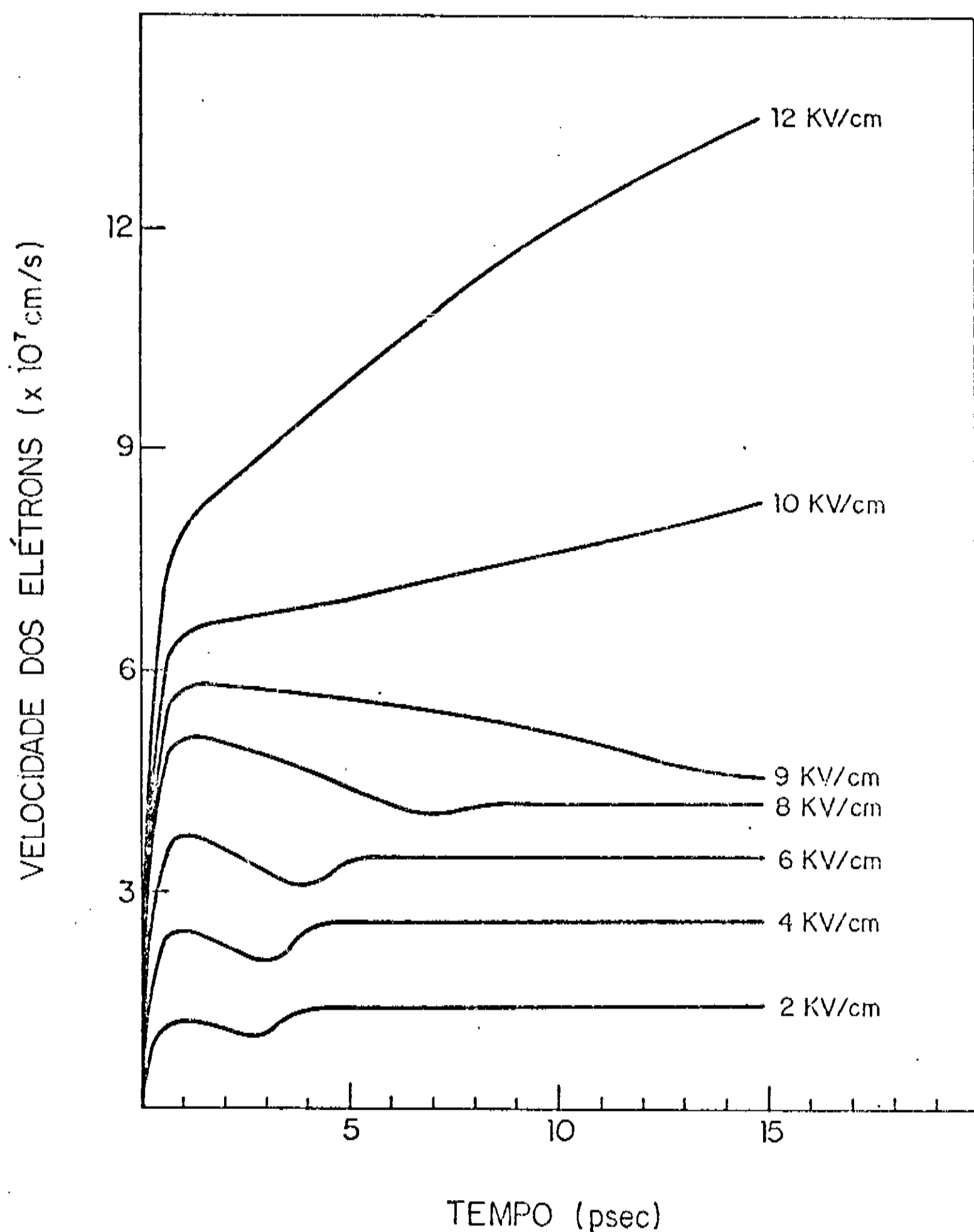


FIGURA 4.3.3 - Evolução temporal da velocidade de deslocamento dos elétrons para diferentes campos elétricos aplicados.

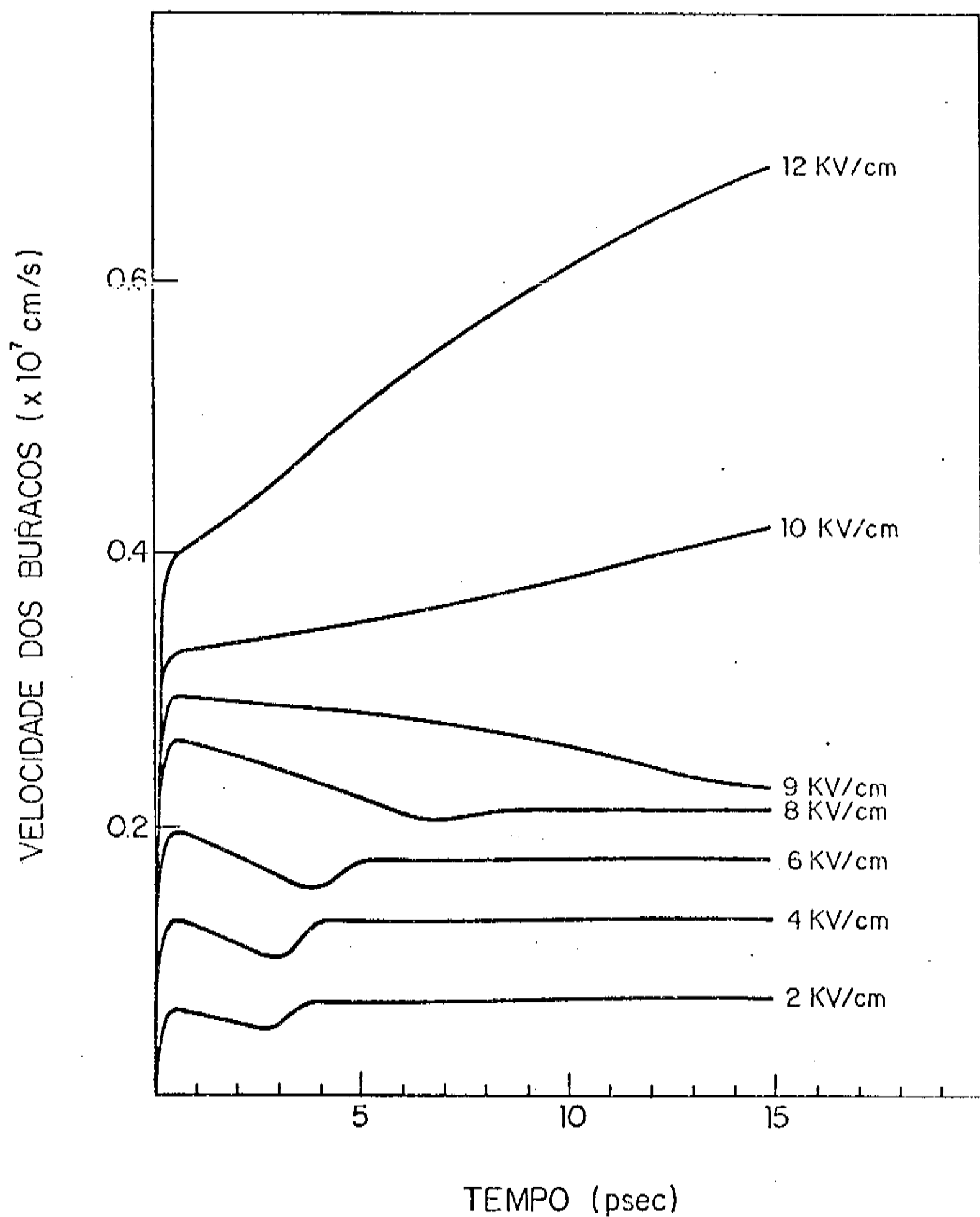


FIGURA 4.3.4 - Evolução temporal da velocidade de deslocamento dos buracos para diferentes campos elétricos aplicados.

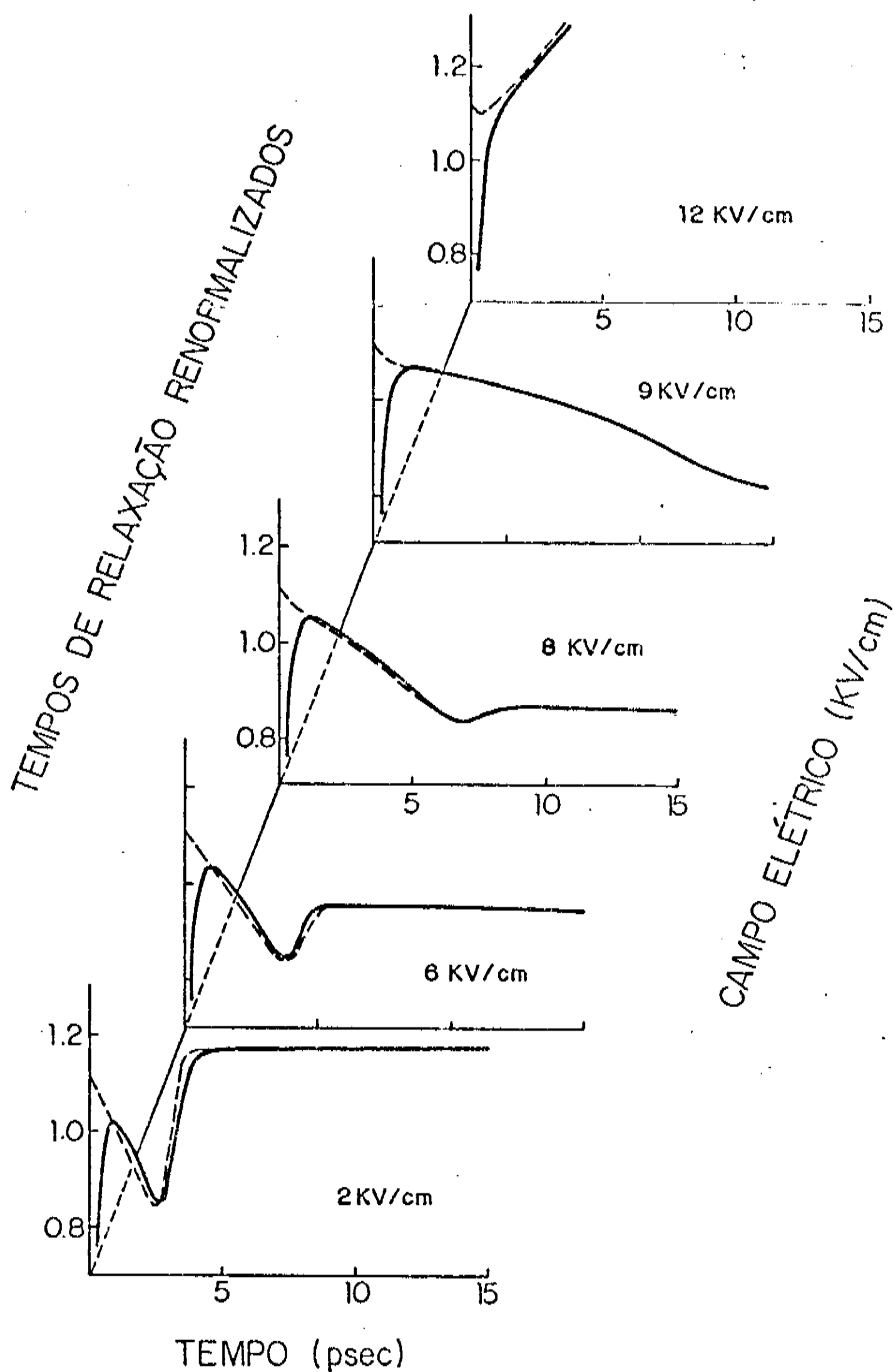


FIGURA 4.3.5 - Evolução temporal dos tempos de relaxação de momentum, $\gamma_e^{-1}(t)/\gamma_{oe}^{-1}$ (linha tracejada), e de transporte, $\tau_e(t)/\tau_{oe}$ (linha contínua), dos elétrons para diferentes campos elétricos, com $\tau_{oe}^{-1} = \frac{2}{3} eE_{0\alpha} / (2\pi m_\alpha \hbar \omega_{L0})^{1/2}$.

ximos e/ou mínimos (campos de 2 kv/cm até 9.4 kv/cm), o que comprova o critério (i). A inexistência da intersecção determina a evolução normal das velocidades dos mesmos (campos superiores a 9.4 kv/cm).

Em relação ao tipo de extremo, pode-se notar que o máximo e o mínimo da velocidade ocorrem quando, na intersecção entre os tempos de relaxação $\tau_{\alpha}(t)$ e $\gamma_{\alpha}^{-1}(t)$ (presentes na Figura 4.3.5), enquanto o sistema de portadores está esfriando ou aquecendo (o que pode ser visto na Figura 4.3.1), $\gamma_{\alpha}^{-1}(t)$ está crescendo com a temperatura dos portadores (o que pode ser visto na Figura 4.2.1), o que comprova o critério (ii).

Deve-se destacar que a velocidade de deslocamento dos buracos tem o mesmo comportamento daquela dos elétrons, embora a sua ordem de grandeza seja aproximadamente 15 vezes inferior aquela dos elétrons.

A Figura 4.3.6 mostra a dependência da velocidade de deslocamento estacionária dos elétrons com o campo elétrico, onde se pode observar a presença de três regiões que se relacionam com o tipo de evolução da velocidade. Nelas se tem

- (a) Comportamento ôhmico para $\epsilon \lesssim 4$ kv/cm,
- (b) Comportamento não-ôhmico para 4 kv/cm $\lesssim \epsilon \lesssim 9.4$ kv/cm,
- (c) Comportamento ôhmico para $\epsilon \gtrsim 9.4$ kv/cm,

comprovando o que foi previsto na equação (4.15.1)!

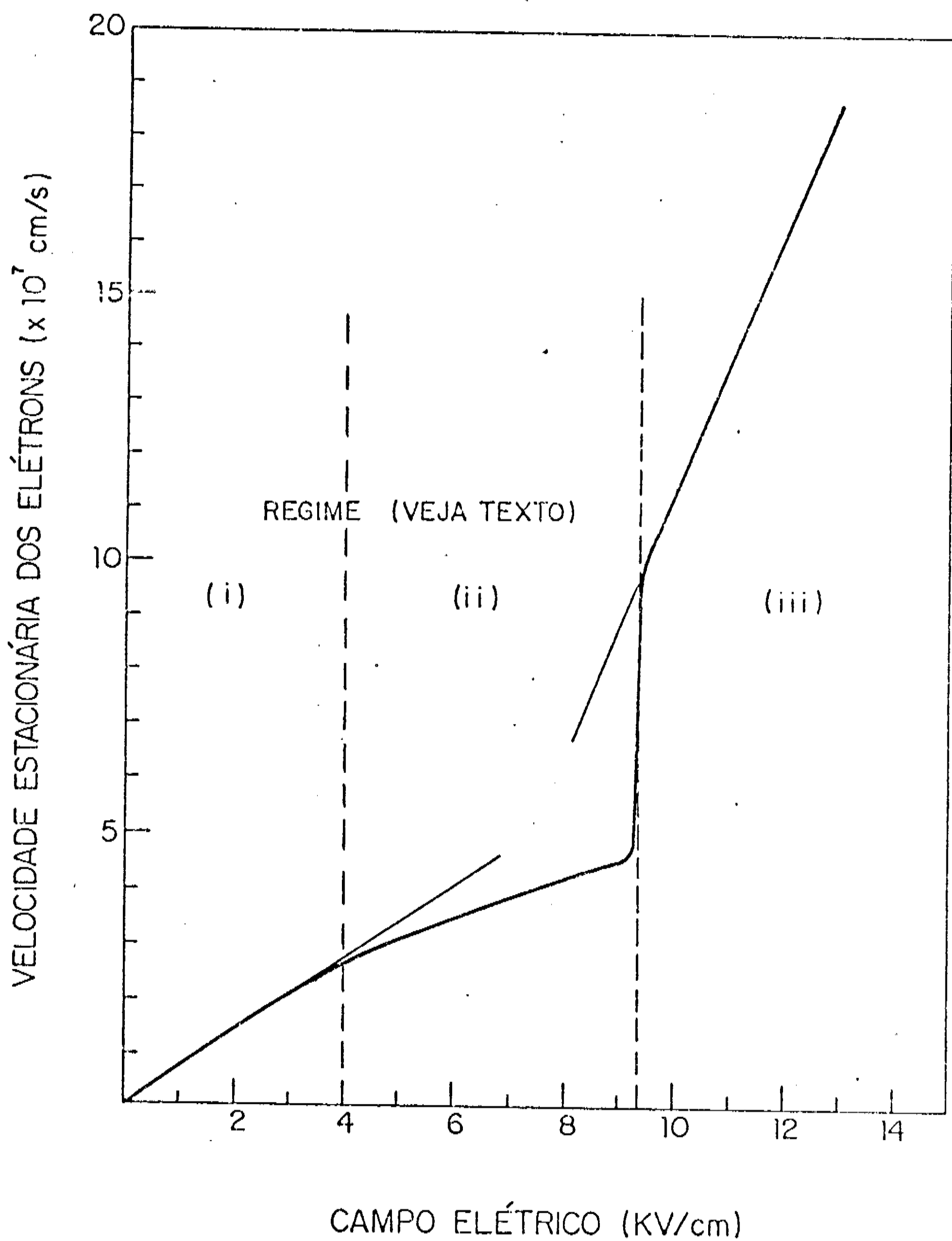


FIGURA 4.3.6 - Dependência da velocidade de deslocamento estacionária dos elétrons com o campo elétrico.

As Figuras 4.3.7,8 mostram a dependência da quasi-temperatura estacionária dos portadores, (T_C/θ_0) , e do tempo de relaxação estacionário de transporte dos elétrons, $(\gamma_e/\gamma_{oe})^{-1}$, com o campo elétrico, respectivamente. Nelas torna-se aparente que o rápido crescimento na velocidade estacionária dos elétrons na passagem do regime (ii) para o regime (iii) é devido à mudança de comportamento que ocorre com o tempo de relaxação de transporte dos elétrons quando $\epsilon \approx 9.4$ kv/cm (ver equação (3.3.6) e Figura 4.3.8), consequência, por sua vez, do aquecimento dos portadores (ver equação (4.16.3) e Figura 4.3.7).

Na Figura 4.3.9 tem-se a variação da altura relativa do máximo (mínimo) - que é a diferença (módulo da diferença) entre o valor da velocidade dos elétrons no máximo relativo (mínimo) e o seu valor no estado estacionário - com o campo elétrico aplicado. Pode-se notar por ela que o overshoot só ocorre quando $\epsilon \approx 4$ kv/cm (fim do regime i), desaparecendo em torno de $\epsilon \approx 9.4$ kv/cm (fim do regime ii); por outro lado, o mínimo tem seu menor valor quando $\epsilon \approx 4$ kv/cm, desaparecendo em torno de $\epsilon \approx 9.4$ ev/cm.

A Figura 4.3.10 apresenta a variação da largura média do máximo (mínimo) - que é a largura do pico (poço) tomada na metade de sua altura (profundidade) - com o campo elétrico aplicado. Ela mostra que, enquanto a largura média do máximo cresce com o aumento do campo elétrico, a largura do mínimo cresce, atinge um máximo em torno de $\epsilon \approx 4$ kv/cm e depois decresce.

Encerrando o estudo do comportamento das estruturas

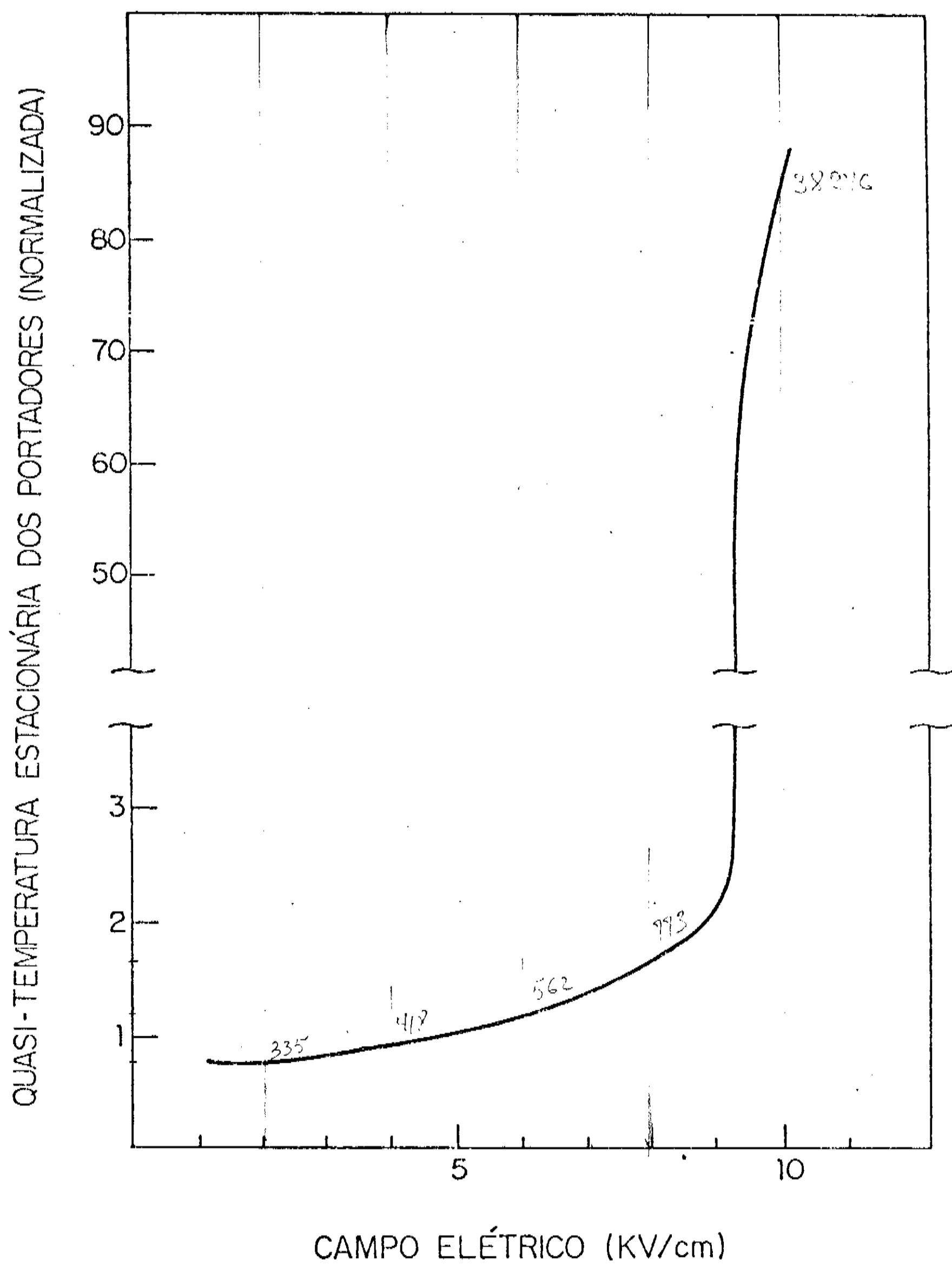


FIGURA 4.3.7 - Dependência da quasi-temperatura estacionária dos portadores, T_c/θ_0 , com o campo elétrico.

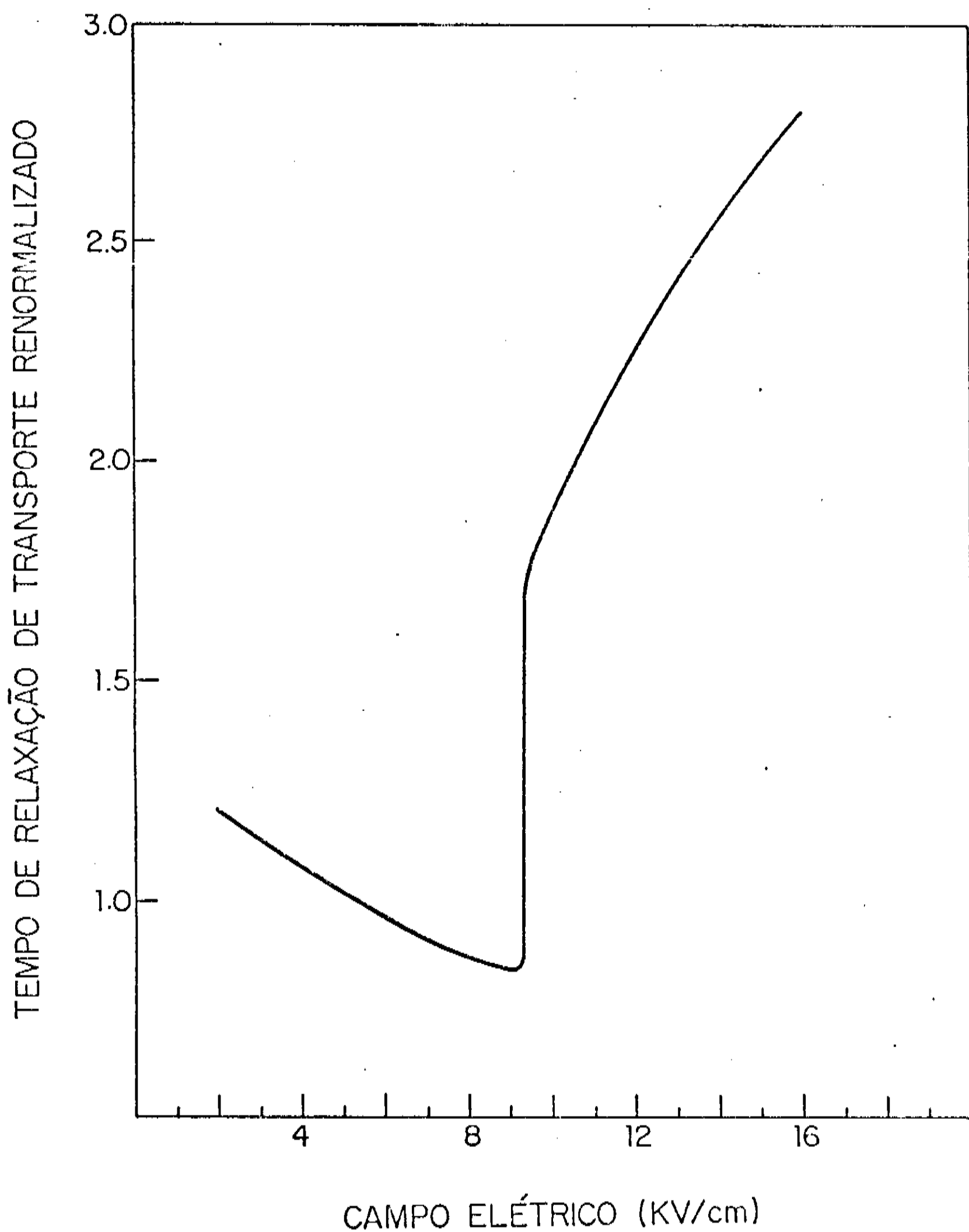


FIGURA 4.3.8 - Dependência do tempo de relaxação estacionário de transporte dos elétrons, $(\gamma_e/\gamma_{oe})^{-1}$, com o campo elétrico.

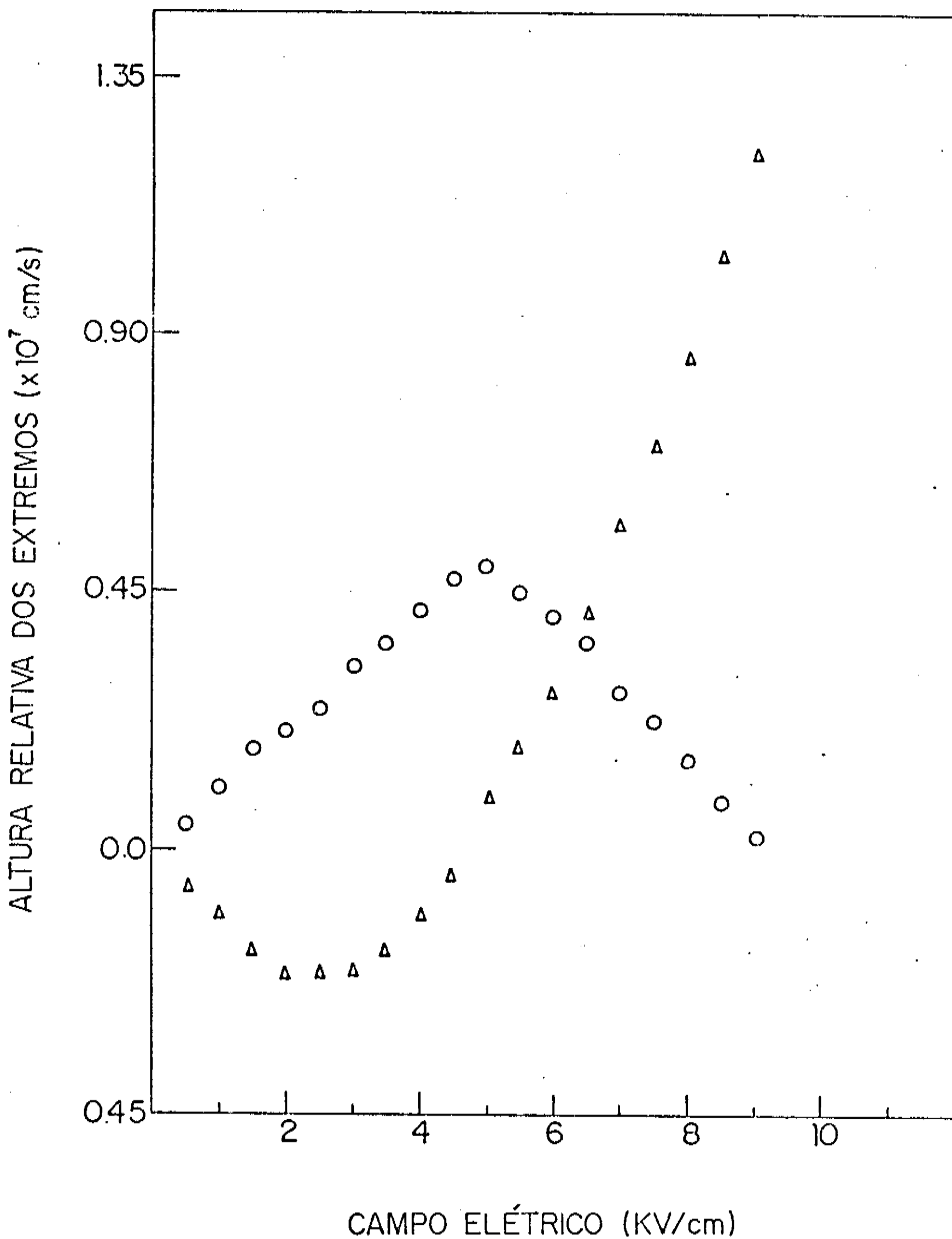


FIGURA 4.3.9 - Variação da altura relativa do máximo (Δ) e do mínimo (O) com o campo elétrico.

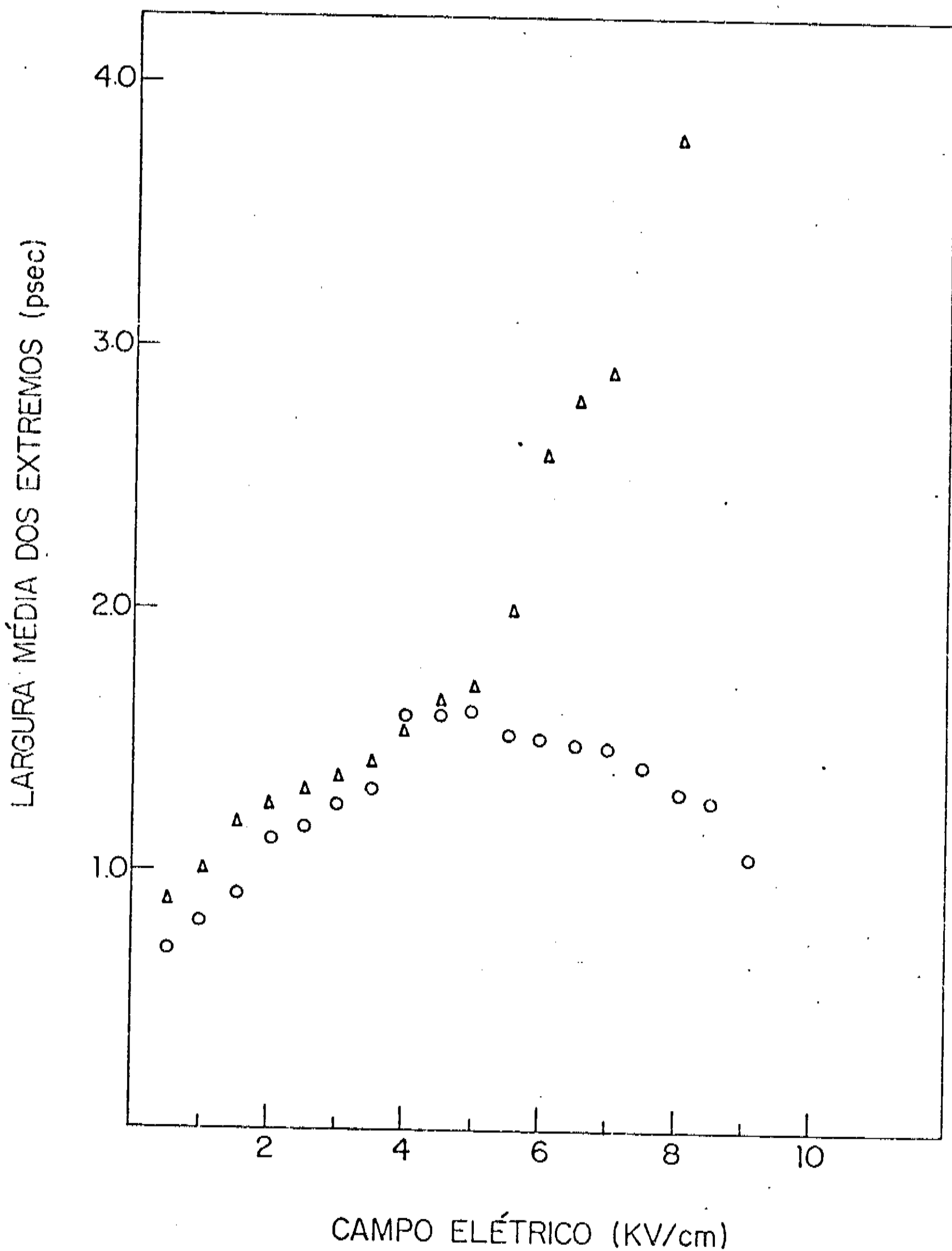


FIGURA 4.3.10 - Variação da largura média do máximo (Δ) e do mínimo (O) com o campo elétrico.

presentes na velocidade de deslocamento dos elétrons⁺, a Figura 4.3.11 mostra o deslocamento da localização temporal dos extremos em relação à origem $t = 0$; é aparente que, enquanto a posição temporal do máximo permanece invariante, a posição temporal do mínimo sofre um deslocamento para a direita com o aumento do campo elétrico.

Finalmente, as Figuras 4.3.12(13) mostram, para campos elétricos de 6 kv/cm (9 kv/cm), como o estado inicial de não-equilíbrio - caracterizado pelos mesmos parâmetros da Tabela 4.3.1 mas com diferentes quasi-temperaturas iniciais⁺⁺ - afeta os parâmetros de transporte do PSAE submetido a campo elétrico. Pode-se notar que a existência de estruturas (máximos e mínimos) depende do estado inicial de não-equilíbrio [Figuras 4.3.12,13(b)], sendo sempre previstas pelos critérios estabelecidos no Capítulo 3.

⁺ O comportamento das estruturas presentes na velocidade de deslocamento dos buracos é semelhante.

⁺⁺ As diferentes quasi-temperaturas iniciais são obtidas mudando a frequência do laser aplicado.

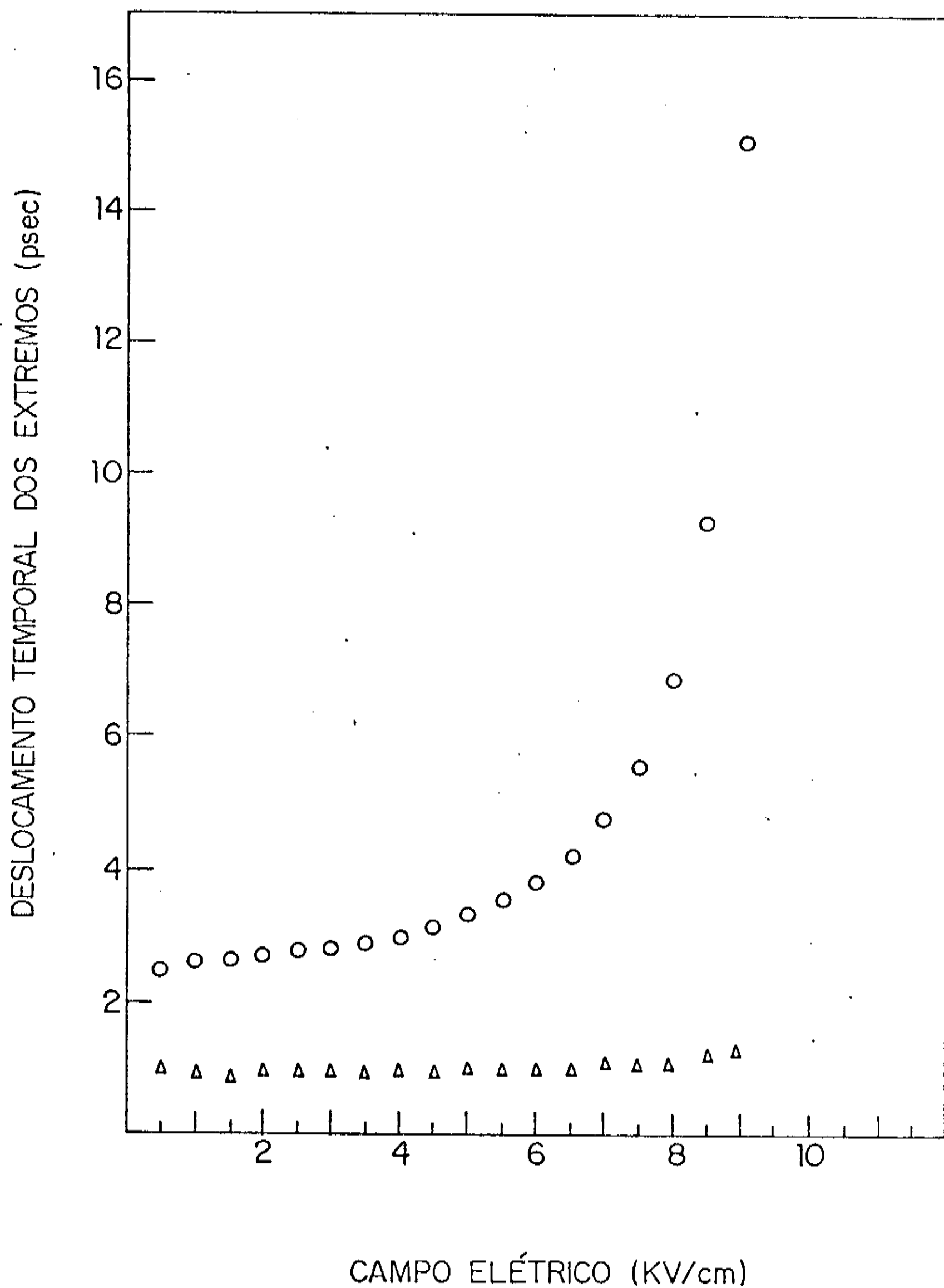


FIGURA 4.3.11 - Deslocamento da localização temporal do máximo (Δ) e mínimo (O) com o campo elétrico aplicado.

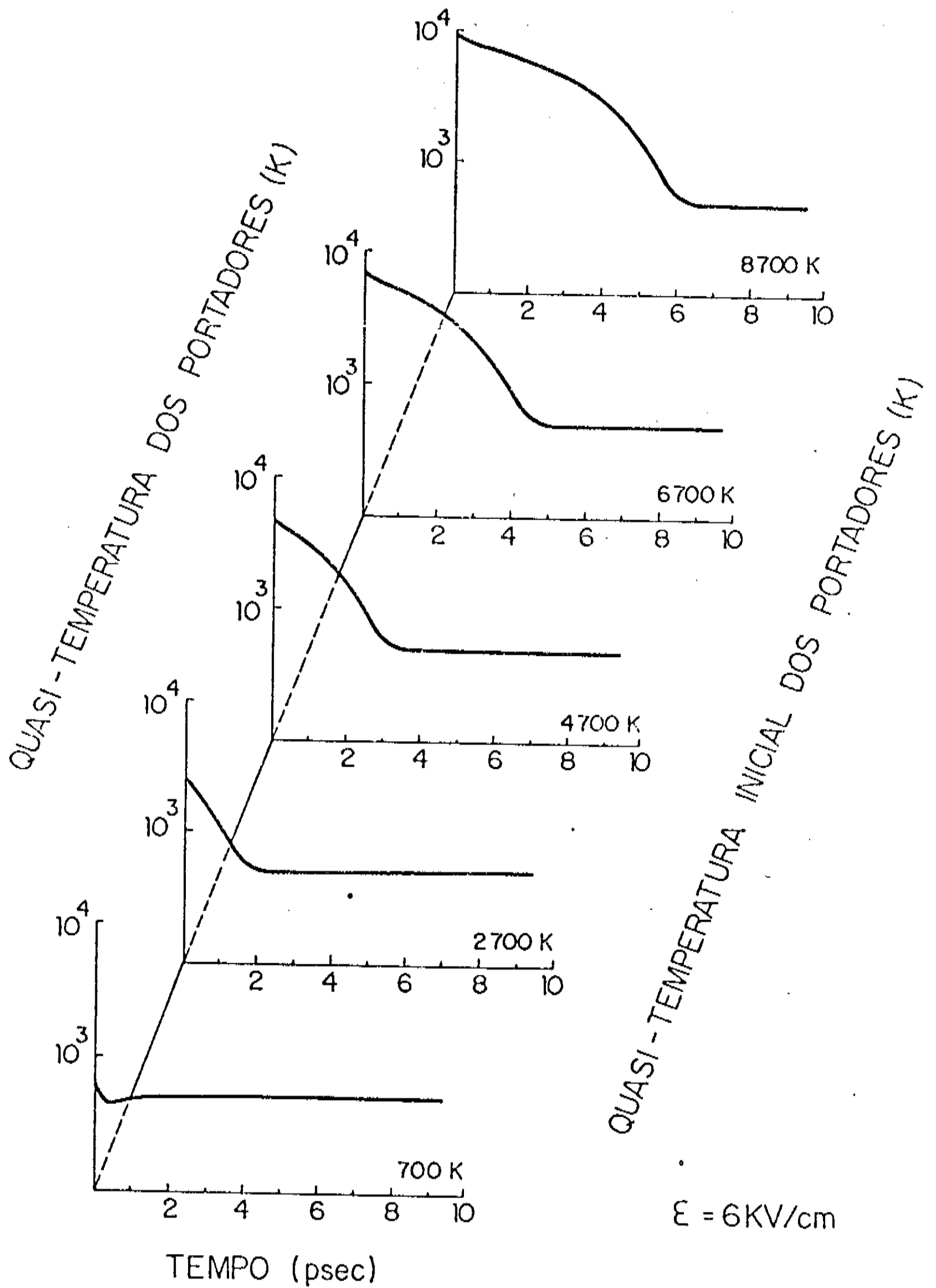


FIGURA 4.3.12(a) - Evolução temporal da quasi-temperatura dos portadores para diferentes quasi-temperaturas iniciais dos portadores quando $\mathcal{E} = 6 \text{ kv/cm}$.

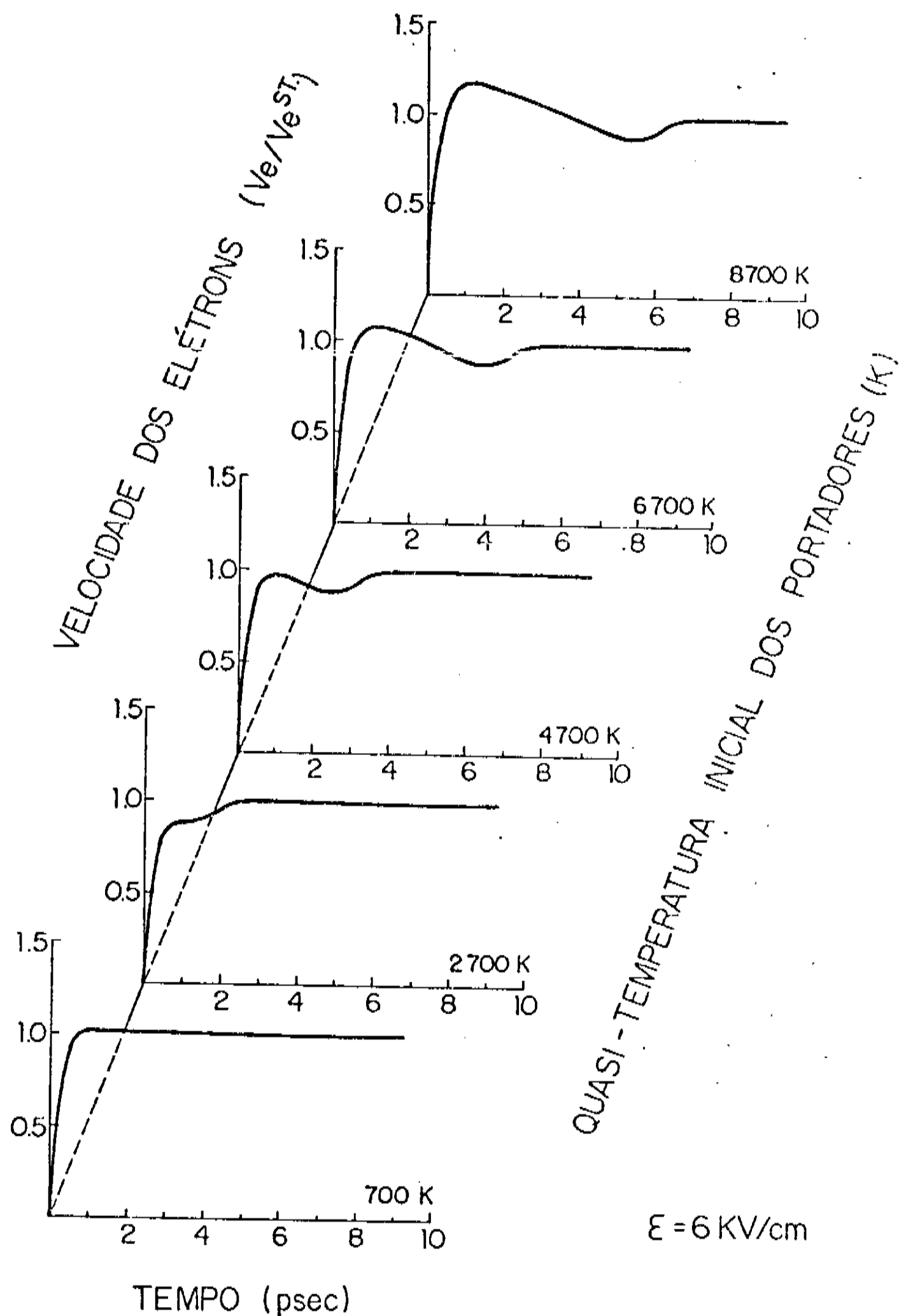


FIGURA 4.3.12(b) - Evolução temporal da velocidade dos elétrons (normalizada pelo seu valor no estado estacionário) para diferentes quasi-temperaturas iniciais dos portadores quando $\mathcal{E} = 6 \text{ kv/cm}$.

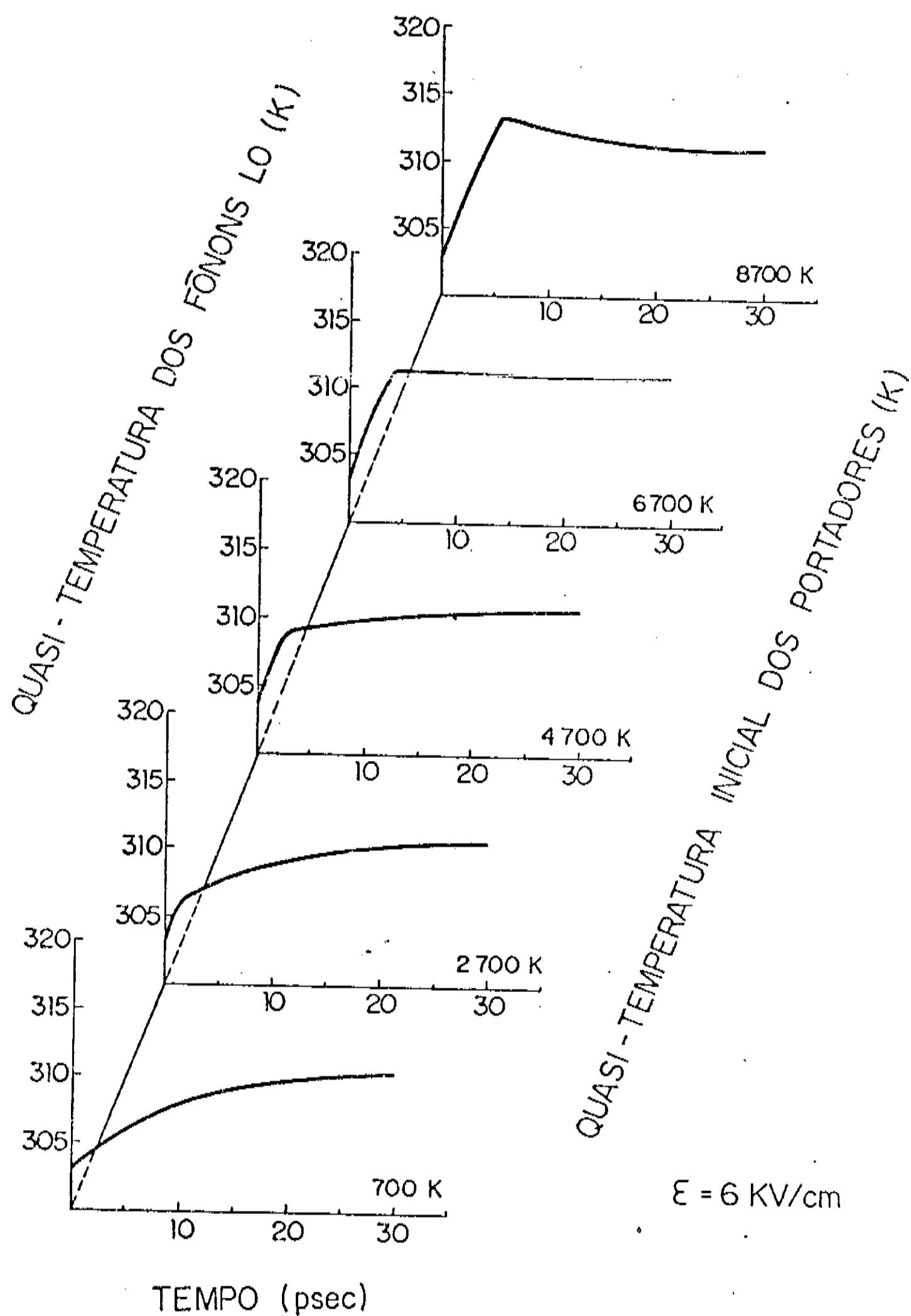


FIGURA 4.3.12(c) - Evolução temporal da quasi-temperatura dos fônons LO para diferentes quasi-temperaturas iniciais dos portadores quando $\mathcal{E} = 6 \text{ kv/cm}$.

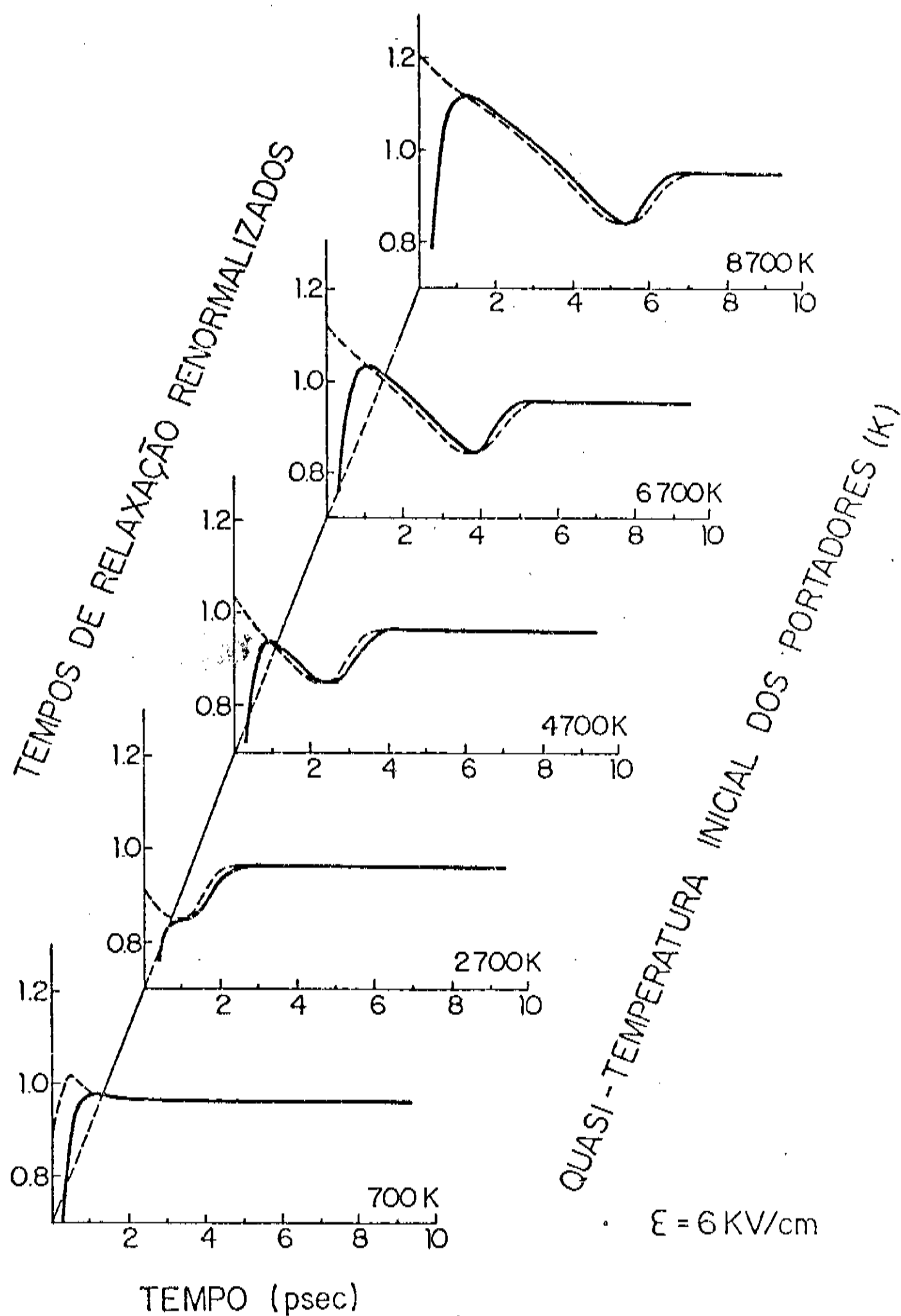


FIGURA 4.3.12(d) - Evolução temporal dos tempos de relaxação de momentum, $\gamma_e^{-1}(t)/\gamma_{e\alpha}^{-1}$ (linha tracejada), e de transporte, $\tau_e(t)$ (linha contínua), dos elétrons para diferentes quasi-temperaturas iniciais dos portadores quando $E = 6 \text{ kv/cm}$.

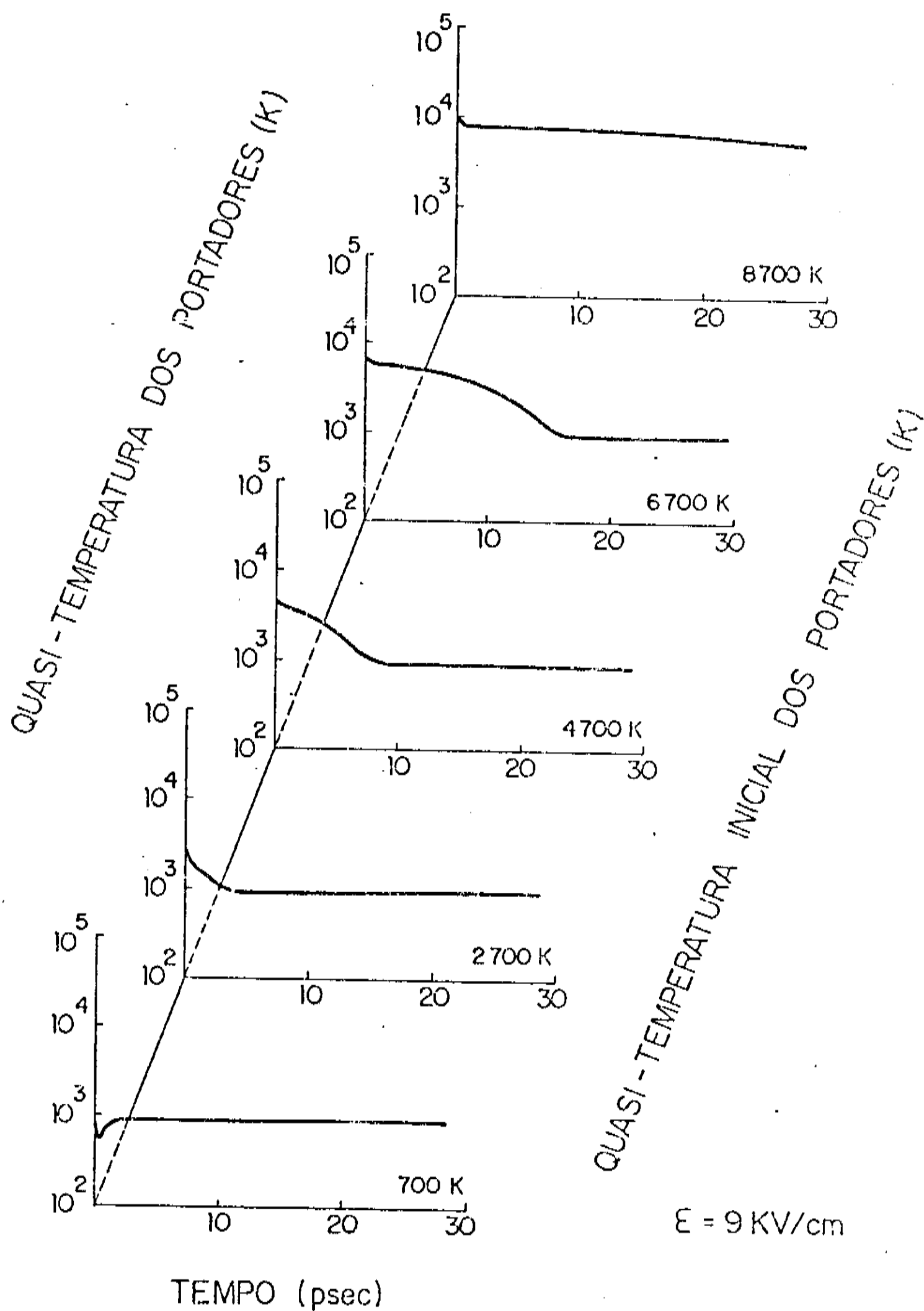


FIGURA 4.3.13(a) - Evolução temporal da quasi-temperatura dos portadores para diferentes quasi-temperaturas iniciais dos portadores quando $E = 9 \text{ kv/cm}$.

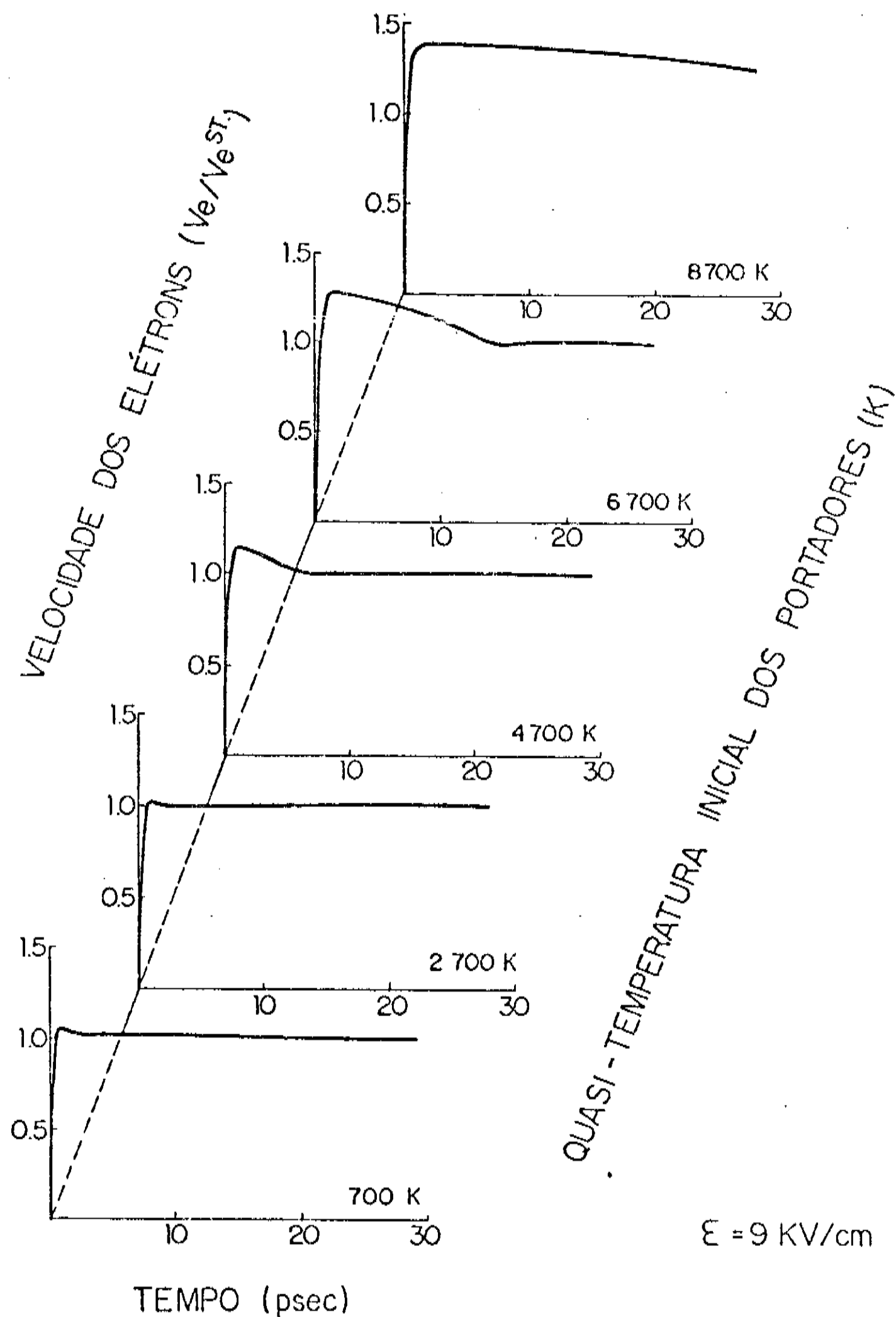


FIGURA 4.3.13(b) - Evolução temporal da velocidade dos elétrons (normalizada pelo seu valor no estado estacionário) para diferentes quasi-temperaturas iniciais dos portadores quando $\mathcal{E} = 9 \text{ kv/cm}$.

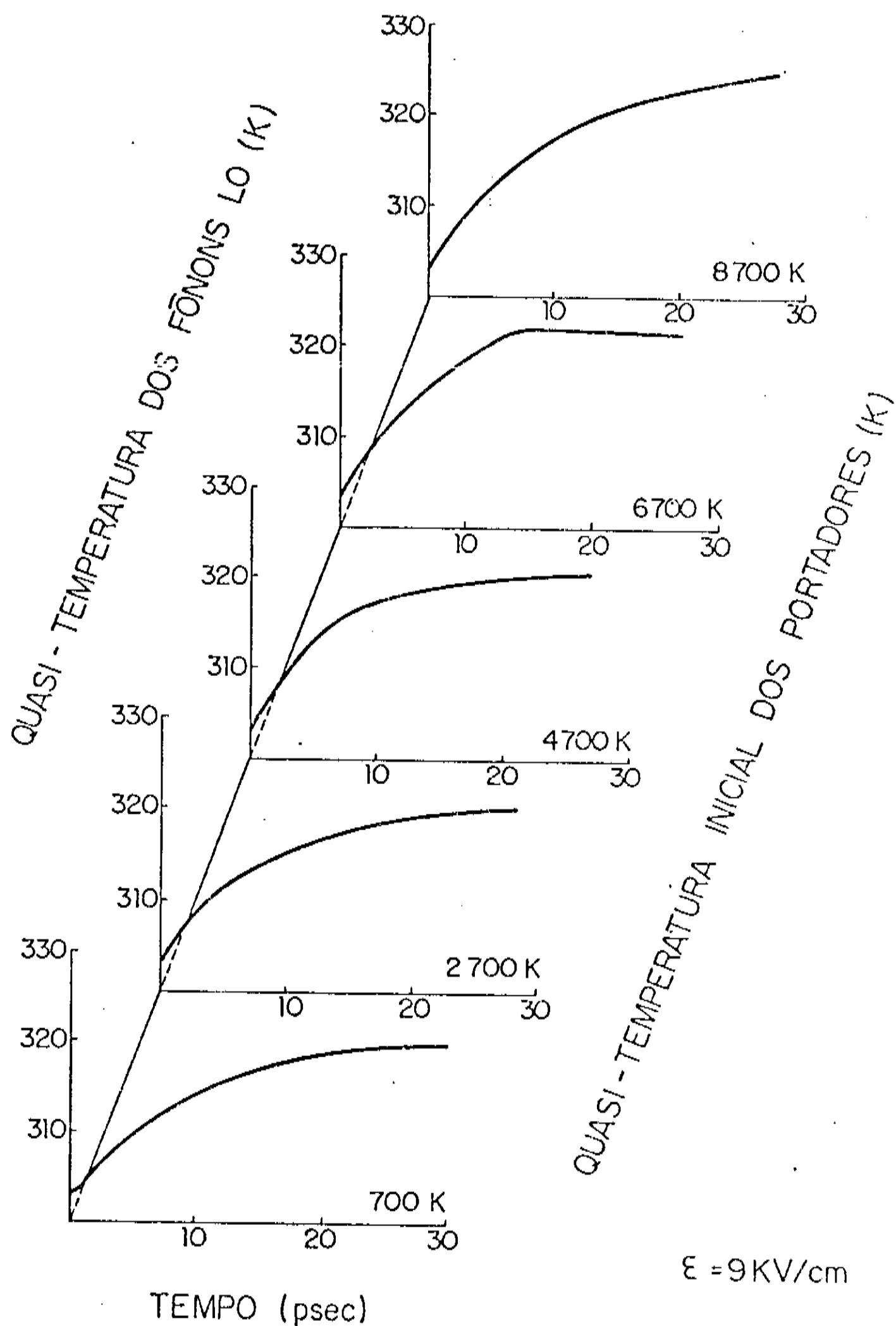


FIGURA 4.3.13(c) - Evolução temporal da quasi-temperatura dos fônons LO para diferentes quasi-temperaturas iniciais dos portadores quando $E = 9 \text{ kv/cm}$.

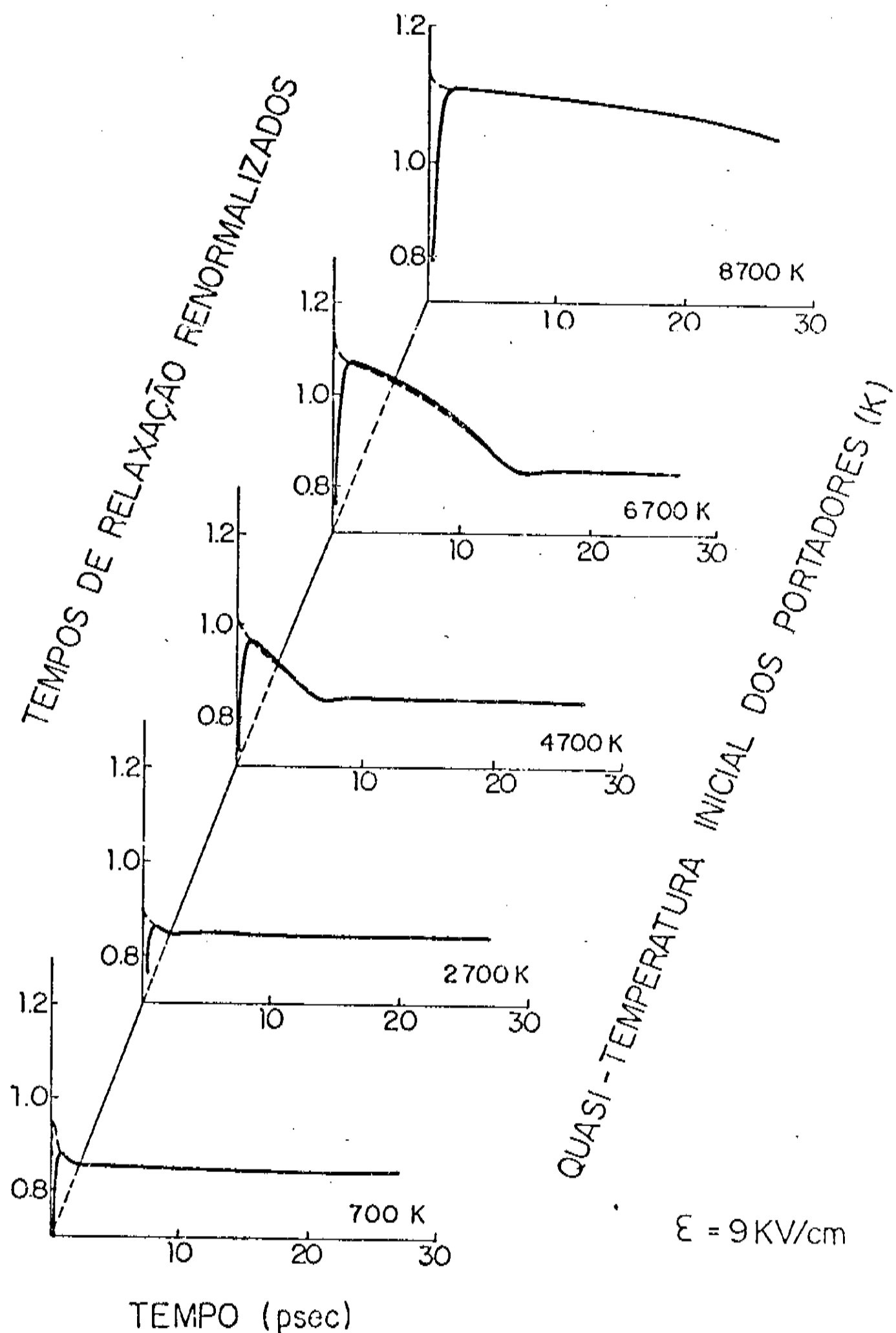


FIGURA 4.3.13(d) - Evolução temporal dos tempos de relaxação de momentum, $\gamma_e^{-1}(t)/\gamma_{e\alpha}^{-1}$ (linha tracejada), e de transporte, $\tau_e(t)$ (linha contínua), dos elétrons para diferentes quasi-temperaturas iniciais dos portadores quando $E = 9 \text{ kv/cm}$.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E COMENTÁRIOS

O estudo das propriedades óticas e de transporte de semicondutores altamente excitados tem se constituído uma importante área de testes para a Mecânica Estatística de Não-Equilíbrio, tanto devido a busca da compreensão dos princípios físicos básicos necessários a descrição dos fenômenos, quanto ao interesse tecnológico em suas múltiplas e práticas aplicações.

Neste campo, os transientes ultra-rápidos de transporte em semicondutores tem sido objeto de intensas pesquisas. O desenvolvimento da espectroscopia laser ultra-rápida tem permitido a realização de experimentos que permitem a observação destes transientes na escala de sub-picosegundos, enquanto cálculos teóricos têm sido efetuados com base principalmente no método de Monte Carlo e/ou equação de Boltzmann. Impulsionados pela busca de dispositivos semicondutores mais velozes, os estudos restringiram-se aos casos em que os portadores são acelerados pelo campo elétrico, partindo de uma condição inicial de equilíbrio termodinâmico.

Neste trabalho tratou-se de um outro e novel problema⁽³¹⁾, que é o do transporte ultra-rápido em plasmas semicondutores altamente excitados (PSAE), levados longe do equilíbrio por foto-excitação. Demonstrou-se que a evolução irreversível dos estados inicialmente fora de equilíbrio termodinâmico destes portadores foto-excitons quando submetidos a campos elétricos intensos ($\sim$ kV/cm) constituem uma nova e desafiante área de testes para a Mecânica Estatística de Não-Equilíbrio.

Através do método do operador estatístico de não-equilíbrio de Zubarev e sua Teoria de Transporte Não-Linear associada - descritos no Capítulo 2, considerou-se aqui como a evolução de um estado inicial altamente fora de equilíbrio termodinâmico do PSAE afeta os parâmetros de transporte dos elétrons e buracos foto-injetados⁽³⁹⁾.

Com base no método, inicialmente construiu-se uma equação de evolução para a velocidade de deslocamento dos portadores - equação (3.3.1) , contendo além de uma força de arraste diretamente dependente do campo aplicado, uma outra força dependente da velocidade devida à interação portador-fônon, expressa em função de um funcional de relaxação γ_α dependente de todo o conjunto completo de variáveis termodinâmicas de não-equilíbrio. Uma análise detalhada desta equação em sua forma integral equivalente, equação (3.3.6) , permitiu que se demonstrasse analiticamente a possibilidade de que os transientes ultra-rápidos da velocidade dos portadores nos vales centrais das bandas de condução e valência (ou mobilidade) podem apresentar estruturas consistindo de máximos eventuais (relativos ou absolutos, constituindo-se em um overshoot no segundo caso) e mínimos. Um critério para a existência deste fenômeno - descrito pela primeira vez neste trabalho - foi obtido (em italiano na página 42) e várias outras propriedades apresentadas^(43.b). Cumpre destacar que a demonstração é válida para qualquer teoria de transporte que permita escrever a equação para a velocidade dos portadores na forma da equação (3.3.17).

A comprovação da existência dos máximos e mínimos no caso específico do GaAs foi feita através da construção e solu

ção numérica das Equações Generalizadas de Transporte (EGT) do Capítulo 2, em compatibilidade com determinadas condições experimentais. Elas foram obtidas no Capítulo 4 para a energia dos portadores (H_C), energia dos fônons óticos longitudinais, óticos transversais e acústicos (H_{LO} , H_{TO} , H_{AC}), e momenta dos portadores na direção do campo elétrico $\vec{E}$ aplicado (P_e e P_h). Através de uma série de hipóteses, o conjunto de 6 equações integro-diferenciais, não-lineares e acopladas - equações (4.1.1-6), foi reduzido a um conjunto de quatro equações diferenciais de 1ª ordem, acopladas e não-lineares, para os parâmetros termodinâmicos de não-equilíbrio β_C , β_{LO} , $v_e(t)$ e $v_h(t)$ - equações (4.20-4), que foram solucionadas numericamente para as condições iniciais da Tabela 4.3.1.

Os resultados, já discutidos no Capítulo 4, comprovam a existência de estruturas - máximos e mínimos - no regime transiente como resultado da evolução de um dado estado inicial altamente fora de equilíbrio termodinâmico do PSAE, o que tinha sido previsto anteriormente no Capítulo 3. Este transiente com estruturas é o resultado do comportamento do tempo de relaxação de momentum e da taxa de transferência de energia do PSAE de seu estado inicial de não-equilíbrio. Devido ao mínimo de γ^{-1} estar localizado aproximadamente em $2\theta_0$ (~ 920 K para o GaAs) - ver Figura 4.2.1, se o nível de foto-excitação é tal que o valor inicial da quasi-temperatura dos portadores, T_C , é maior do que $2\theta_0$ e os portadores esfriam levando T_C a valores menores do que $2\theta_0$, então estruturas devem aparecer. Ela apresentará "overshoot" se γ^{-1} no estado estacionário é maior do que γ^{-1} no instante inicial da evolução. Por outro lado, se o

campo é intenso o suficiente para que o aquecimento gerado pelo termo de Joule prevaleça sobre a transferência de energia dos portadores ao campo de fônons, os portadores irão se aquecer, sendo levados a temperaturas superiores aquelas do estado inicial de não-equilíbrio. Isto faz com que γ^{-1} cresça continuamente e nenhum transiente com estrutura seja possível. - Figuras 4.3.1, 4.3.3-4 e 4.3.5. Para o caso específico considerado aqui, a intensidade do campo elétrico para que isto ocorra é da ordem de $9.4 \text{ kV/cm}^{(31)}$.

Uma análise do comportamento das estruturas com o campo elétrico aplicado foi feito através do estudo da variação de sua altura relativa, largura média e deslocamento da localização temporal (definidos no Capítulo 4, página 78) com a intensidade do campo⁽³⁹⁾. Os resultados presentes nas Figuras 4.3.9-11 mostram que, para o mínimo, a altura relativa e sua largura crescem inicialmente com a intensidade do campo e depois decrescem até o seu desaparecimento em torno de 9.4 kV/cm , enquanto a sua localização temporal sofre um deslocamento para tempos superiores (até o seu desaparecimento) com o aumento da intensidade do campo; para o máximo, constata-se o surgimento de overshoot para campos $\approx 4.5 \text{ kV/cm}$, o crescimento de sua largura média e a praticamente invariância de sua localização temporal com o aumento da intensidade do campo (até o seu desaparecimento).

Por outro lado, comportamentos ôhmicos (para $\epsilon \lesssim 4 \text{ kV/cm}$ e $\epsilon \gtrsim 9.4 \text{ kV/cm}$) e não-ôhmicos ($4 \text{ kV/cm} \lesssim \epsilon \lesssim 9.4 \text{ kV/cm}$) foram observados através do estudo do estado estacionário da velocidade dos portadores - Figura 4.3.6, comprovando o

que foi previsto na Equação (4.15.1).

Finalmente, as Figuras 4.3.12-13 permitem a conclusão de que o estado inicial de não-equilíbrio afeta fortemente os transientes ultra-rápidos de transporte de PSAE submetidos a campos elétricos intensos, determinando ou não a existência de estruturas nos mesmos.

A comparação dos resultados obtidos neste trabalho com dados experimentais não é ainda possível atualmente devido ao fato das observações disponíveis não se concentrarem no estado inicial de não-equilíbrio, além de não serem precisas e detalhadas o suficiente. No entanto há uma boa concordância qualitativa e semi-qualitativa com os resultados disponíveis, desde que é observado um limite superior e inferior da intensidade do campo elétrico para a existência do overshoot⁽¹⁶⁾. Pode-se afirmar que os resultados aqui obtidos constituem um desafio aos físicos experimentais devido a complexidade de sua medição.

Deve-se destacar que nos cálculos numéricos foi utilizado o modelo de bandas parabólicas invertidas, enquanto a estrutura de bandas dos semicondutores de gap direto apresentam, em geral, múltiplos vales. Assim, o espalhamento interval dos portadores está também presente e sua influência é importante na evolução do estado de não-equilíbrio do PSAE. Conjectura-se aqui que ele possa vir a produzir uma estrutura adicional em níveis suficientemente altos de excitação, como um resultado da transferência de elétrons para vales superiores com massas efetivas maiores, embora suavizada por interações entre elétrons e buracos⁽⁴⁸⁾.

Uma extensão óbvia do presente trabalho consiste então em introduzir o espalhamento intervale no problema em questão⁺, o que significa a introdução da concentração de elétrons no vale do tipo i , N_i^e , como variável dinâmica de interesse, além da energia total dos portadores no i -ésimo vale, H_C^i . Interessante seria também introduzir a possibilidade de existência de distribuições altamente fora de equilíbrio para os fônons (fônons quentes), construindo equações para as mesmas⁺.

Outra possibilidade de continuação de pesquisa na presente linha é o estudo da aplicação de campos alternados intensos ao PSAE. Resultados preliminares mostram que quando as frequências dos mesmos acham-se em micro-ondas, i.e. na ordem dos tempos de relaxação dos subsistemas de portadores e fônons, a evolução temporal dos parâmetros de transporte influenciam fortemente uns aos outros. Um resultado interessante é o fato da variação temporal da quasi-temperatura dos portadores devido a aplicação de um campo do tipo $\epsilon = \epsilon_1 + \epsilon_2 \cos(\omega.t)$ pode não ser cosenoidal mas bem complicada (embora periódica), dependendo da razão ϵ_1/ϵ_2 ⁽⁴⁷⁾.

⁺ Parte do projeto de pesquisa de Valder N. Freire para 1988 a ser realizado na Universidade Federal do Ceará.

A P P E N D I C E S

APÊNDICE A

No caso da taxa de variação da energia dos portadores devido à sua interação com fônons acústicos via potencial de deformação, tem-se no limite clássico ($f_{\vec{k},\alpha} \ll 1$)

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha,AC}^{PD}(t) = & \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k},\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q},AC} \cdot |M_{\alpha,AC}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \{v_{\vec{q},AC}(t) \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \\ & - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{\vec{q},AC}) - [1 + v_{\vec{q},AC}(t)] \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},AC})\} \end{aligned} \quad (A.1.1)$$

Ao se tomar o modelo Debye para os fônons acústicos e o limite de altas temperaturas, $\hbar\omega_{\vec{q},AC} \equiv \hbar s q \ll \beta_{AC}^{-1}(t)$ e $v_{\vec{q},AC}(t) = [\hbar\omega_{\vec{q},AC} \cdot \beta_{AC}(t)]^{-1}$; assim,

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha,AC}^{PD}(t) = & \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \beta_{AC}^{-1}(t) \cdot \sum_{\vec{q}} |M_{\alpha,AC}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot [\delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \\ & - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{\vec{q},AC}) - \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},AC})] - \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q},AC} \cdot \\ & \cdot |M_{\alpha,AC}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},AC}) \end{aligned} \quad (A.1.2)$$

Para o espalhamento dos fônons acústicos via potencial de deformação a matriz de interação é dada por

$$| M_{\alpha, AC}^{PD}(\vec{q}) |^2 = E_{1\alpha}^2 \cdot (2V\rho s)^{-1} \cdot \hbar q \quad (A.2)$$

onde $E_{1\alpha}$ é a constante do potencial de deformação, V é o volume ativo da amostra, ρ a sua densidade e s a velocidade do som na mesma⁽¹⁵⁾. Como

$$\sum_{\vec{q}} \dots \rightarrow \theta_{AC} \cdot \frac{V}{8\pi^3} \cdot \int \dots d^3\vec{q} \quad (A.3)$$

segue-se agora que

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha, AC}^{PD}(t) = & \theta_{AC} \cdot \frac{V}{4\pi^2 \hbar} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \{\beta_{AC}^{-1}(t) \cdot \hbar E_{1\alpha}^2 (2V\rho s)^{-1} \cdot \int_{\vec{q}} [\delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha} - \\ & - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} - \hbar\omega_{\vec{q}, AC}) - \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar\omega_{\vec{q}, AC})] d^3\vec{q} - \hbar^2 \cdot E_{1\alpha}^2 (2V\rho)^{-1} \cdot \\ & \cdot \int q^2 \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar\omega_{\vec{q}, AC}) d^3\vec{q} \} \quad (A.4) \end{aligned}$$

Ora,

$$\begin{aligned}
& \int q \cdot \delta (\epsilon_{\vec{k} \pm \vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \mp \hbar \omega_{\vec{q}, AC}) d^3 \vec{q} = \\
& = 2\pi \cdot \int dq \cdot q^3 \cdot \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} \delta \left(\pm \frac{\hbar^2 k q}{m_\alpha} \cdot \cos \theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_\alpha} \mp \hbar \omega_{\vec{q}, AC} \right) \sin \theta d\theta \\
& = 2\pi \cdot \int_0^{2(k \pm m_\alpha s / \hbar)} q^3 \cdot \frac{m_\alpha}{\hbar^2 k q} \cdot dq \\
& = 2\pi \cdot \frac{2^3}{3} \cdot \frac{m_\alpha}{\hbar^2} \cdot k^2 \cdot \left(1 \pm \frac{m_\alpha s}{\hbar k} \right)^3 \quad (A.5.1)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int q^2 \cdot \delta (\epsilon_{\vec{k} - \vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar \omega_{\vec{q}, AC}) d^3 \vec{q} = \\
& = 2\pi \cdot \int dq \cdot q^4 \cdot \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} \delta \left(- \frac{\hbar^2 k q}{m_\alpha} \cos \theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_\alpha} + \hbar \omega_{\vec{q}, AC} \right) \sin \theta d\theta \\
& = 2\pi \cdot \int_0^{2(k - m_\alpha s / \hbar)} q^4 \cdot \frac{m_\alpha}{\hbar^2 k q} \cdot dq \\
& = 2\pi \cdot \frac{2^4}{4} \cdot \frac{m_\alpha}{\hbar^2} \cdot k^3 \cdot \left(1 - \frac{m_\alpha s}{\hbar k} \right)^4 \quad (A.5.2)
\end{aligned}$$

e assim

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha, AC}^{PD}(t) = & \theta_{AC} \cdot \frac{V}{2\pi\hbar} \cdot \{\beta_{AC}^{-1}(t) \cdot \hbar E_{1\alpha}^2 \cdot (2V\rho_s)^{-1} \cdot \frac{2^4}{3} \cdot \frac{m_\alpha}{\hbar^2} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot [3 \cdot (\frac{m_\alpha s}{\hbar}) \cdot k + (\frac{m_\alpha D}{\hbar})^3 \cdot \frac{1}{k}] - \\ & - \hbar^2 \cdot E_{1\alpha}^2 \cdot (2V\rho)^{-1} \cdot \frac{2^4}{4} \cdot \frac{m_\alpha}{\hbar^2} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot k^3 \cdot (1 - \frac{m_\alpha s}{\hbar k})^4 \} \end{aligned} \quad (A.6)$$

Ora,

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot k &= \frac{V}{4\pi^3} \cdot [4\pi^3 \hbar^3 n / (2\pi m_\alpha)^{3/2}] \cdot \beta_c^{3/2}(t) \cdot \\ &\cdot \int \exp\{-\beta_c(t) \cdot [\hbar \vec{k} - m_\alpha \vec{v}_\alpha(t)]^2 / 2m_\alpha\} \cdot k^3 dk \sin\theta \, d\theta \, d\varphi \\ &= \frac{V}{\pi^2} \cdot \frac{4\pi^3 \hbar^3 n}{(2\pi m_\alpha)^{3/2}} \cdot \frac{\beta_c^{1/2}(t)}{\hbar v_\alpha(t)} \cdot \exp(-\beta_c(t) \cdot m_\alpha v_\alpha^2(t)/2) \cdot \\ &\cdot \int_0^\infty k^2 \cdot \exp[-\beta_c(t) \cdot \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\alpha}] \cdot \sinh(\beta_c(t) \cdot v_\alpha(t) \cdot \hbar k) dk \\ &= \frac{V}{\pi^2} \cdot \frac{4\pi^3 \hbar^3 n}{(2\pi m_\alpha)^{3/2}} \cdot \frac{\beta_c^{1/2}(t)}{\hbar v_\alpha(t)} \cdot \exp(-\beta_c(t) \cdot m_\alpha v_\alpha^2(t)/2) \cdot \\ &\cdot 2^{3/2} \cdot \frac{m_\alpha^{3/2}}{\hbar^3 \cdot \beta_c^{3/2}(t)} \cdot (\beta_c(t) \cdot m_\alpha v_\alpha^2(t)/2)^{1/2} \cdot \\ &\cdot M(2, 3/2, \beta_c(t) \cdot m_\alpha v_\alpha^2(t)/2) \end{aligned} \quad (A.7)$$

onde na última passagem foi utilizada a identidade 3.562.1 da referência (42). Ao se fazer outras interações similares, obtêm-se de (A.6) a equação (4.7.1).

No caso da taxa de variação de momentum dos portadores devido à sua interação com fônons acústicos via potencial de deformação, tem-se no limite clássico ($f_{k,\alpha} \ll 1$)

$$\begin{aligned} \dot{\pi}_{\alpha,AC}^{PD}(t) = & \frac{2\pi}{h} \cdot \sum_{\vec{k}, \vec{q}} hq_{\epsilon, \alpha} \cdot |M_{\alpha,AC}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot [1 + v_{\vec{q}, AC}(t)] \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar\omega_{\vec{q}, AC}) - \\ & - \frac{2\pi}{h} \cdot \sum_{\vec{k}, \vec{q}} hq_{\epsilon, \alpha} \cdot |M_{\alpha,AC}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot v_{\vec{q}, AC}(t) \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} - \hbar\omega_{\vec{q}, AC}) \end{aligned} \quad (A.8.1)$$

Ao se tomar o modelo de Debye para os fônons acústicos e o limite de altas temperaturas, $\hbar\omega_{\vec{q}, AC} \equiv \hbar s q \ll \beta_{AC}^{-1}(t)$ e $v_{\vec{q}, AC}(t) = [\hbar\omega_{\vec{q}, AC} \cdot \beta_{AC}(t)]^{-1}$; assim,

$$\begin{aligned} \dot{\pi}_{\alpha,AC}^{PD}(t) = & \frac{2\pi}{h} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \{\beta_{AC}^{-1}(t) \cdot \sum_{\vec{q}} hq_{\epsilon, \alpha} \cdot (\hbar\omega_{\vec{q}, AC})^{-1} \cdot |M_{\alpha,AC}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot \\ & \cdot [\delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} - \hbar\omega_{\vec{q}, AC}) - \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar\omega_{\vec{q}, AC})] - \\ & - \sum_{\vec{q}} hq_{\epsilon, \alpha} \cdot |M_{\alpha,AC}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar\omega_{\vec{q}, AC})\} \\ = & \theta_{AC} \cdot \frac{V}{4\pi^2 h} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \{\beta_{AC}^{-1}(t) \cdot \hbar E_{1\alpha}^2 \cdot (2v_{ps})^{-1} \cdot s^{-1} \cdot \\ & \cdot \int q_{\epsilon, \alpha} \cdot [\delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} - \hbar\omega_{\vec{q}, AC}) - \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar\omega_{\vec{q}, AC})] d^3\vec{q} - \\ & - \hbar^2 E_{1\alpha}^2 (2v_{ps})^{-1} \cdot \int q_{\epsilon, \alpha} \cdot q \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar\omega_{\vec{q}, AC}) d^3\vec{q}\} \end{aligned} \quad (A.8.2)$$

Ora

$$\int q_{\epsilon, \alpha} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k} \pm \vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \mp \hbar \omega_{\vec{q}, AC}) d^3 \vec{q} =$$

$$= \int dq \cdot q^2 \cdot \int d\varphi \cdot \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} q_{\epsilon, \alpha} \cdot \delta\left(\pm \frac{\hbar^2 k q}{m_{\alpha}} \cos \theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\alpha}} \mp \hbar \omega_{\vec{q}, AC}\right) \sin \theta d\theta$$

(A.9)

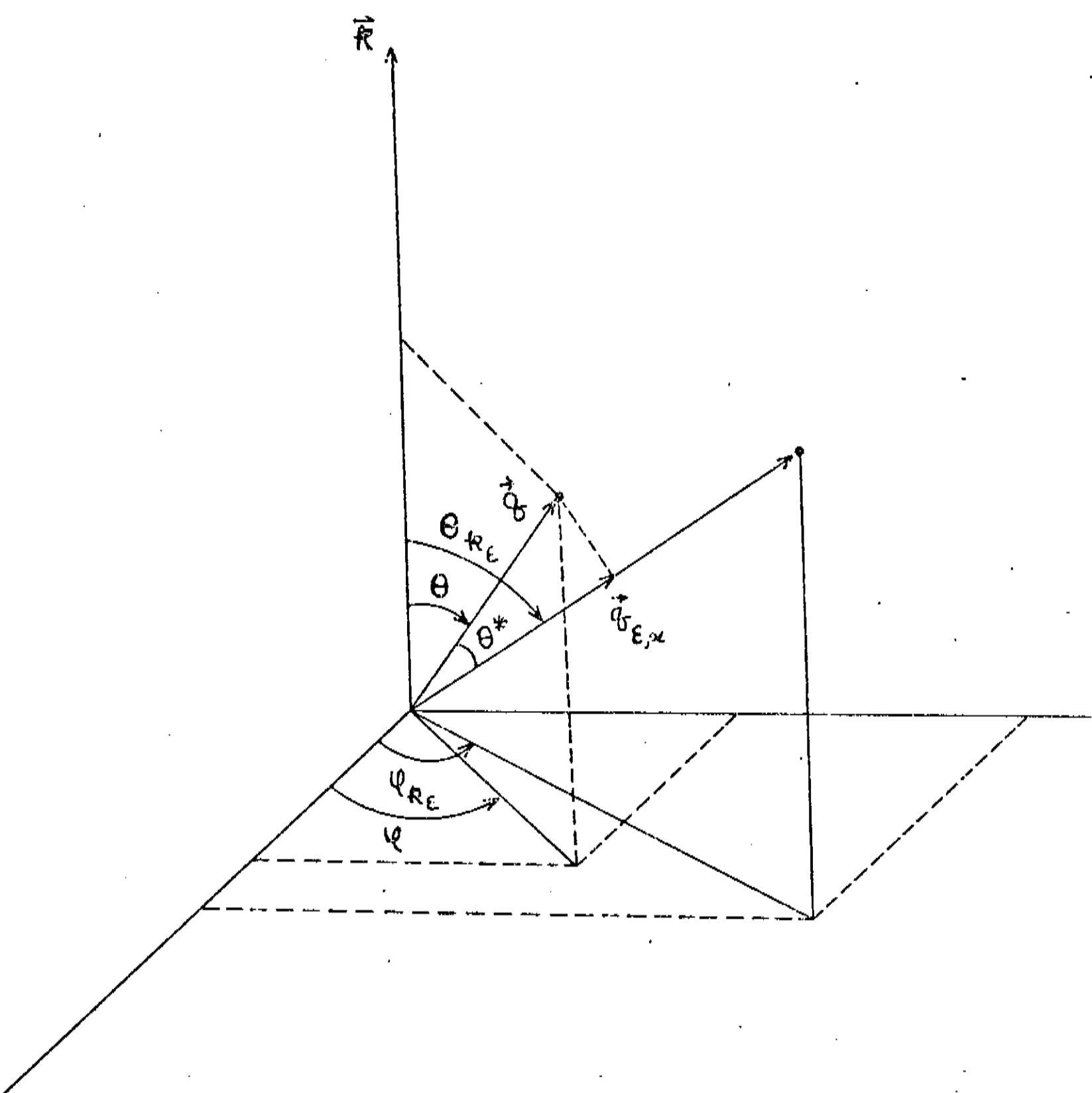


FIGURA A.1 - Relacionamento espacial entre vetores de onda envolvidos nas integrações em A.9.

De acordo com a Figura A.1 (ver também ref. 15, pg. 125),

$$q_{\epsilon, \alpha} = \vec{k}_{\epsilon}^* \cdot \vec{q} = q \cos \theta^* = q \cdot [\cos \theta \cdot \cos \theta_{k_{\epsilon}} + \sin \theta \cdot \sin \theta_{k_{\epsilon}} \cdot \cos(\varphi - \varphi_{k_{\epsilon}})]$$

(A.10)

e assim

$$\begin{aligned} \int q_{\epsilon, \alpha} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k} \pm \vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \mp \hbar \omega_{\vec{q}, AC}) d^3 \vec{q} &= \\ &= 2\pi \cdot \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot \frac{m_{\alpha}^2}{\hbar^4 k^2} \cdot \int_{q_{AC}}^{q_{AC}^+} dq \cdot q \cdot (\hbar \omega_{\vec{q}, AC} \mp \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\alpha}}) \\ &= 2\pi \cdot \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot \frac{m_{\alpha}^2}{\hbar^4 k^2} \cdot \left[\hbar \cdot \frac{2^3}{3} \cdot k^3 (1 \pm m_{\alpha} s / \hbar k)^3 \mp \frac{\hbar^2}{m_{\alpha}} \cdot 2 \cdot k^4 \cdot (1 \pm m_{\alpha} s / \hbar k)^4 \right] \end{aligned}$$

(A.11.1)

Por outro lado,

$$\begin{aligned} \int q_{\epsilon, \alpha} \cdot q \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k} - \vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar \omega_{\vec{q}, AC}) d^3 \vec{q} &= \\ &= \int dq \cdot q^3 \cdot \int d\varphi \int_{\theta=0}^{\pi} q_{\epsilon, \alpha} \cdot \delta(-\frac{\hbar^2 k q}{m_{\alpha}} \cdot \cos \theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\alpha}} + \hbar \omega_{\vec{q}, AC}) \cdot \sin \theta d\theta \\ &= 2\pi \cdot \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot \frac{m_{\alpha}^2}{\hbar^4 \cdot k^2} \cdot \int_{q_{AC}}^{q_{AC}^+} dq \cdot q \cdot (\hbar \omega_{\vec{q}, AC} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\alpha}}) \\ &= 2\pi \cdot \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot \frac{m_{\alpha}^2}{\hbar^4 \cdot k^2} \cdot \left[\hbar s \cdot \frac{2^4}{4} \cdot k^4 \cdot (1 - m_{\alpha} s / \hbar k)^4 + \frac{\hbar^2}{2m_{\alpha}} \cdot \frac{2^5}{5} \cdot k^5 (1 - m_{\alpha} s / \hbar k)^5 \right] \end{aligned}$$

(A.11.2)

e assim

$$\begin{aligned}
 \pi_{\alpha, AC}^{PD}(t) &= \theta_{AC} \cdot \frac{V}{4\pi^2 \hbar} \cdot \beta_{AC}^{-1}(t) \cdot \hbar E_{1\alpha}^2 \cdot (2V\rho s)^{-1} \cdot s^{-1} \cdot 2\pi \cdot \frac{m_{\alpha}^2}{\hbar^4} \cdot \sum_{\vec{k}} k^{-2} \cdot \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot \\
 &\cdot f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \left\{ \left[s\hbar \cdot \frac{2^3}{3} \cdot k^3 \cdot (1+m_{\alpha}s/\hbar k)^3 - \frac{\hbar^2}{m_{\alpha}} \cdot 2 \cdot k^4 \cdot (1+m_{\alpha}s/\hbar k)^4 \right] - \right. \\
 &- \left[s\hbar \cdot \frac{2^3}{3} \cdot k^3 (1-m_{\alpha}s/\hbar k)^3 + \frac{\hbar^2}{m_{\alpha}} \cdot 2 \cdot k^4 \cdot (1-m_{\alpha}s/\hbar k)^4 \right] \cdot \\
 &- \hbar^2 \cdot E_{1\alpha}^2 \cdot (2V\rho s)^{-1} \cdot \left[\hbar s \cdot \frac{2^4}{4} \cdot k^4 \cdot (1-m_{\alpha}s/\hbar k)^4 + \frac{\hbar^2}{2m_{\alpha}} \cdot \frac{2^5}{5} \cdot k^5 \cdot \right. \\
 &\cdot \left. \left. (1-m_{\alpha}s/\hbar k)^5 \right] \right\} \quad (A.12)
 \end{aligned}$$

Ora,

$$\begin{aligned}
 \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot k^3 &= \\
 &= \frac{V}{4\pi^3} \cdot \left[4\pi^3 \hbar^3 n / (2\pi m_{\alpha})^{3/2} \right] \cdot \beta_c^{3/2}(t) \cdot \exp \left[-\beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2(t) \right] \cdot \\
 &\int_{k=0}^{\infty} k^5 \cdot \exp \left[-\beta_c(t) \cdot \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \right] \cdot \left[\frac{2 \cosh(\beta_c(t) \cdot \hbar k \cdot v_{\alpha}(t))}{\beta_c(t) \cdot \hbar k \cdot v_{\alpha}(t)} - \frac{2 \sinh(\beta_c(t) \cdot \hbar k \cdot v_{\alpha}(t))}{\beta_c^2(t) \cdot (\hbar k)^2 \cdot v_{\alpha}^2(t)} \right] dk \quad (A.13)
 \end{aligned}$$

De acordo com a identidade 3.562.2 da referência (42),

$$\begin{aligned}
& \int_0^{\infty} k^4 \exp[-\beta_c(t) \cdot \epsilon_{\vec{k}, \alpha}] \cdot \cosh(\beta_c(t) \cdot \hbar k \cdot v_{\alpha}(t)) dk = \\
& = 3 \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot \frac{m_{\alpha}^{5/2}}{\hbar^5} \cdot \beta_c^{-5/2}(t) \cdot M(5/2, 1/2, \beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2(t))
\end{aligned}
\tag{A.14.1}$$

$$\begin{aligned}
& \int_0^{\infty} k^3 \cdot \exp[-\beta_c(t) \cdot \epsilon_{\vec{k}, \alpha}] \cdot \sinh(\beta_c(t) \cdot \hbar k \cdot v_{\alpha}(t)) dk = \\
& = 3 \cdot \sqrt{\pi} \cdot \frac{m_{\alpha}^2}{\hbar^4} \cdot \beta_c^{-2}(t) \cdot [\beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2(t)]^{1/2} \cdot M(5/2, 3/2, \beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2(t)).
\end{aligned}
\tag{A.14.2}$$

e assim,

$$\begin{aligned}
\sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \cos \theta_{k_e} \cdot k^3 &= V n \cdot \frac{5 \cdot 2^{1/2} \cdot m_{\alpha}^{3/2}}{\hbar^3} \cdot \beta_c^{-3/2}(t) \cdot [\beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2(t)]^{1/2} \cdot \\
&\cdot \exp[-\beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2(t)] \cdot M(7/2, 5/2, \beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2(t))
\end{aligned}
\tag{A.15}$$

Ao se fazer outras integrações similares, obtêm-se de (A.12) a equação (4.11.1).

APÊNDICE B

No caso da taxa de variação da energia dos portadores devido à sua interação com fônons acústicos via potencial piezoelétrico, tem-se no limite clássico ($f_k^\alpha \ll 1$)

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha, AC}^{PZ}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q}, AC} \cdot |M_{\alpha, AC}^{PZ}(\vec{q})|^2 \cdot f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \{v_{\vec{q}, AC}(t) \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} - \hbar \omega_{\vec{q}, AC}) - \\ - \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar \omega_{\vec{q}, AC}) \cdot [1 + v_{\vec{q}, AC}(t)]\} \end{aligned} \quad (8.1.1)$$

Ao se tomar o modelo de Debye para os fônons acústicos e o limite de altas temperaturas, $\hbar \omega_{\vec{q}, AC} \equiv \hbar s q \ll \beta_{AC}^{-1}(t)$ e $v_{\vec{q}, AC}(t) = [\hbar \omega_{\vec{q}, AC} \cdot \beta_{AC}(t)]^{-1}$; assim,

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha, AC}^{PZ}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \beta_{AC}^{-1}(t) \cdot \sum_{\vec{q}} |M_{\alpha, AC}^{PZ}(\vec{q})|^2 \cdot [\delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} - \hbar \omega_{\vec{q}, AC}) - \\ - \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar \omega_{\vec{q}, AC})] - \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q}, AC} \cdot |M_{\alpha, AC}^{PZ}(\vec{q})|^2 \cdot \\ \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar \omega_{\vec{q}, AC}) \end{aligned} \quad (8.1.2)$$

Para o espalhamento dos fônons acústicos via potencial piezoelétrico, a matriz de interação é dada por

$$|M_{\alpha,AC}^{PZ}(\vec{q})|^2 = \frac{\hbar \cdot e^2 H_{PZ}^2}{2V\epsilon_{ps}^2} \cdot \frac{1}{q} \quad (B.2)$$

onde H_{PZ} é a constante obtida do tensor piezoelétrico e ϵ a permitividade⁽¹⁵⁾. Como

$$\sum_{\vec{q}} \dots \rightarrow \theta_{AC} \cdot \frac{V}{8\pi^3} \cdot \int \dots d^3\vec{q} \quad (B.3)$$

segue-se agora que

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha,AC}^{PZ}(t) = & \theta_{AC} \cdot \frac{V}{4\pi^2\hbar} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \{B_{AC}^{-1}(t) \cdot \frac{\hbar \cdot e^2 \cdot H_{PZ}^2}{2V\epsilon_{ps}^2} \cdot \int q^{-1} \cdot [\delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \\ & - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{\vec{q},AC}) - \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},AC})] d^3\vec{q} - \frac{\hbar e^2 H_{PZ}^2}{2V\epsilon_{ps}^2} \\ & \cdot \int \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{\vec{q},AC}) d^3\vec{q} \} \end{aligned} \quad (B.4)$$

Ora,

$$\begin{aligned} \int q^{-1} \delta(\epsilon_{\vec{k}\pm\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} \mp \hbar\omega_{\vec{q},AC}) d^3\vec{q} &= \\ &= 2\pi \cdot \int dq \cdot q \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} \delta\left(\pm \frac{\hbar^2 k q}{m_{\alpha}} \cdot \cos\theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\alpha}} \mp \hbar\omega_{\vec{q},AC}\right) \sin\theta d\theta \\ &= 2\pi \cdot \int_0^{2(k \pm m_{\alpha}s/\hbar)} q \cdot \frac{m_{\alpha}}{\hbar^2 k q} dq \\ &= 4\pi \cdot \frac{m_{\alpha}}{\hbar^2} \cdot \left(1 \pm \frac{m_{\alpha}s}{\hbar k}\right) \end{aligned} \quad (B.5.1)$$

$$\begin{aligned}
\int \delta (\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{\vec{q},AC}) d^3\vec{q} &= \\
&= 2\pi \cdot \int dq \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} \delta \left(-\frac{\hbar^2 k q}{m_\alpha} \cos\theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},AC} \right) \sin\theta d\theta \\
&= 2\pi \cdot \int_0^{2(k-m_\alpha s/\hbar k)} \frac{m_\alpha}{\hbar^2 k q} dq \\
&= 4\pi \cdot \frac{m_\alpha}{\hbar^2} \cdot k \cdot \left(1 - \frac{m_\alpha s}{\hbar k}\right)^2 \quad (B.5.2)
\end{aligned}$$

e assim

$$\begin{aligned}
\dot{E}_{\alpha,AC}^{PZ}(t) &= \theta_{AC} \cdot \frac{V}{\pi\hbar} \cdot \{\beta_{AC}^{-1}(t) \cdot \frac{\hbar e^2 H_{PZ}^2}{V\epsilon_\rho^2} \cdot \frac{m_\alpha^2}{\hbar^3} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \frac{1}{k} - \\
&\quad - \frac{\hbar e^2 H_{PZ}^2}{2V\epsilon_\rho^2} \cdot \frac{m_\alpha}{\hbar^2} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot [k - 2 \cdot \left(\frac{m_\alpha s}{\hbar}\right) + \left(\frac{m_\alpha s}{\hbar}\right)^2 \cdot \frac{1}{k}]\} \\
&\quad (B.6)
\end{aligned}$$

Ao se fazer as integrações utilizando-se a identidade 3.562.1 da referência (42) [veja exemplo no Apêndice A], obtêm-se de (B.6) a equação (4.7.2).

No caso da taxa de variação de momentum dos portadores devido à sua interação com fônons acústicos via potencial piezoelétrico, tem-se no limite clássico ($f_{\vec{k},\alpha} \ll 1$)

$$\dot{\pi}_{\alpha,AC}^{PZ}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k},\vec{q}} \hbar q_{\epsilon,\alpha} \cdot |M_{\alpha,AC}^{PZ}(q)|^2 \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot [1 + v_{\vec{q},AC}(t)] \cdot$$

$$\cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},AC}) - \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k},\vec{q}} \hbar q_{\epsilon,\alpha} \cdot |M_{\alpha,AC}^{PZ}(q)|^2 \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot$$

$$\cdot v_{\vec{q},AC}(t) \cdot \delta(\epsilon_{\vec{q}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{\vec{q},AC}) \quad (B.7.1)$$

Ao se tomar o modelo de Debye para os fônons acústicos e o limite de altas temperaturas, $\hbar\omega_{\vec{q},AC} \equiv \hbar s q \ll \beta_{AC}^{-1}(t)$ e $v_{\vec{q},AC}(t) = [\hbar\omega_{\vec{q},AC} \cdot \beta_{AC}(t)]^{-1}$; assim,

$$\dot{\pi}_{\alpha,AC}^{PZ}(t) = - \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \{\beta_{AC}^{-1}(t) \cdot \sum_{\vec{q}} \hbar q_{\epsilon,\alpha} \cdot (\hbar\omega_{\vec{q},AC})^{-1} \cdot |M_{\alpha,AC}^{PZ}(\vec{q})|^2 \cdot$$

$$\cdot [\delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{\vec{q},AC}) - \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},AC})] -$$

$$- \sum_{\vec{q}} \hbar q_{\epsilon,\alpha} \cdot |M_{\alpha,AC}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},AC})\}$$

$$= \theta_{AC} \cdot \frac{V}{4\pi^2 \hbar} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \{\beta_{AC}^{-1}(t) \cdot \frac{\hbar e^2 H_{PZ}^2}{2V \cdot \epsilon_{\rho s}^2} \cdot$$

$$\cdot \int q_{\epsilon,\alpha} \cdot q^{-2} \cdot [\delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{\vec{q},AC}) - \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},AC})] d^3\vec{q} -$$

$$- \frac{\hbar^2 \cdot e^2 H_{PZ}^2}{2V \epsilon_{\rho s}^2} \cdot \int q_{\epsilon,\alpha} \cdot q^{-1} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},AC}) d^3\vec{q} \quad (B.7.2)$$

Ora,

$$\begin{aligned}
 \int q_{\epsilon, \alpha} \cdot q^{-2} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k} \pm \vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \mp \hbar \omega_{\vec{q}, AC}) d^3 \vec{q} &= \\
 &= \int dq \cdot \int d\varphi \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} q_{\epsilon, \alpha} \cdot \delta\left(\pm \frac{\hbar^2 k q}{m_{\alpha}} \cos \theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\alpha}} \mp \hbar \omega_{\vec{q}, AC}\right) \sin \theta d\theta \\
 &= (\mp) 2\pi \cdot \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot \frac{m_{\alpha}}{\hbar^2} \cdot \left[1 - \left(\frac{m_{\alpha} s}{\hbar}\right)^2 \cdot \frac{1}{k^2}\right] \quad (B.8.1)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \int q_{\epsilon, \alpha} \cdot q^{-1} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k} - \vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar \omega_{\vec{q}, AC}) d^3 \vec{q} &= \\
 &= \int dq \cdot q \cdot \int d\varphi \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} q_{\epsilon, \alpha} \cdot \delta\left(-\frac{\hbar^2 k q}{m_{\alpha}} \cos \theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\alpha}} + \hbar \omega_{\vec{q}+AC}\right) \sin \theta d\theta \\
 &= -4\pi \cdot \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot \frac{m_{\alpha}^2 s}{\hbar^4} \cdot \left[1 - \frac{2}{3} \cdot \frac{\hbar k}{m_{\alpha} s} - \frac{1}{3} \cdot \left(\frac{m_{\alpha} s}{\hbar}\right)^2 \cdot \frac{1}{k^2}\right] \quad (B.8.2)
 \end{aligned}$$

e assim

$$\begin{aligned}
 \pi_{\alpha, AC}^{PZ}(t) &= 0_{AC} \cdot \frac{V}{4\pi^2 \hbar} \cdot \beta_{AC}^{-1}(t) \cdot \frac{\hbar e^2 H_{PZ}^2}{2V \epsilon_{ps}^2} \cdot 4\pi \cdot \frac{m_{\alpha}}{\hbar^2} \cdot \sum_{\vec{k}} \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \\
 &\cdot \left[1 - \left(\frac{m_{\alpha} s}{\hbar}\right)^2 \cdot \frac{1}{k^2}\right] - \frac{\hbar^2 \cdot e^2 H_{PZ}^2}{2V \epsilon_{ps}^2} \cdot 4\pi \cdot \frac{m_{\alpha}^2 s}{\hbar^4} \cdot \sum_{\vec{k}} \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \\
 &\cdot \left[1 - \frac{2}{3} \cdot \frac{\hbar k}{m_{\alpha} s} - \frac{1}{3} \cdot \left(\frac{m_{\alpha} s}{\hbar}\right)^2 \cdot \frac{1}{k^2}\right] \quad (B.9)
 \end{aligned}$$

Ao se fazer as integrações de forma similar às aquelas do Apêndice A, eq. (A.13-14), obtêm-se de (B.9) a equação (4.11.2).

APÊNDICE C

No caso da taxa de variação da energia dos portadores devido à sua interação com fônons óticos longitudinais via potencial de Fröhlich, tem-se no limite clássico ($f_{\vec{k},\alpha} \ll 1$)

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha,LO}^{FR}(t) = & \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k},\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q},LO} \cdot |M_{\alpha,LO}^{FR}(\vec{q})|^2 \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \{v_{\vec{q},LO}(t) \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \\ & - \hbar\omega_{\vec{q},LO}) - [1+v_{\vec{q},LO}(t)] \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},LO})\} \quad (C.1.1) \end{aligned}$$

Ao se tomar o modelo de Einstein para os fônons óticos tem-se $\hbar\omega_{\vec{q},LO} = \hbar\omega_{LO}$ e $v_{\vec{q},LO}(t) = [\exp(\beta_{LO}(t) \cdot \hbar\omega_{LO}) - 1]^{-1} = v_{LO}(t)$; assim,

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha,LO}^{FR}(t) = & \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \hbar\omega_{LO} \cdot \{v_{LO}(t) \cdot \sum_{\vec{q}} |M_{\alpha,LO}^{FR}(\vec{q})|^2 \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{LO}) - \\ & - [1+v_{LO}(t)] \cdot \sum_{\vec{q}} |M_{\alpha,LO}^{FR}(\vec{q})|^2 \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{LO})\} \quad (C.1.2) \end{aligned}$$

Para o espalhamento dos fônons óticos longitudinais via potencial de Fröhlich, a matriz de interação é dada por

$$|M_{\alpha,LO}^{FR}(\vec{q})|^2 = \frac{2\pi\hbar^2 e E_{o\alpha}}{V_{m_\alpha}} \cdot \frac{1}{q^2} \quad (C.2.1)$$

$$eE_{o\alpha} = \frac{m_{\alpha} e^2 \hbar \omega_{LO}}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2} \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \quad (C.2.2)$$

onde $E_{o\alpha}$ é a constante de acoplamento de Fröhlich e ϵ_0 (ϵ_{∞}) é a constante dielétrica estática (ótica) do semiconductor⁽¹⁵⁾.

Como

$$\sum_{\vec{q}} \dots \rightarrow \theta_{LO} \cdot \frac{V}{8\pi^3} \int \dots d^3\vec{q} \quad (C.3)$$

segue-se que

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha, LO}^{FR}(t) = & \theta_{LO} \cdot \frac{V}{4\pi^2 \hbar} \cdot \hbar \omega_{LO} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \alpha}(t) \{ v_{LO}(t) \cdot \frac{2\pi \hbar^2 e E_{o\alpha}}{V m_{\alpha}} \cdot \int \frac{1}{q^2} \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha} - \\ & - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} - \hbar \omega_{LO}) d^3\vec{q} - [1 + v_{LO}(t)] \cdot \frac{2\pi \hbar^2 e E_{o\alpha}}{V m_{\alpha}} \cdot \int \frac{1}{q^2} \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \\ & - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar \omega_{LO}) d^3\vec{q} \} \end{aligned} \quad (C.4)$$

Ora,

$$\begin{aligned} \int \frac{1}{q^2} \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} - \hbar \omega_{LO}) d^3\vec{q} &= 2\pi \int dq \int_{\theta=0}^{\pi} \delta\left(\frac{\hbar^2 k q}{m_{\alpha}} \cdot \cos\theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\alpha}} - \hbar \omega_{LO}\right) \sin\theta d\theta \\ &= 2\pi \cdot \int_{k_{<}^+}^{k_{>}^-} dq \cdot \frac{m_{\alpha}}{\hbar^2 k q} \\ &= 2\pi \cdot \frac{m_{\alpha}}{\hbar^2 k} \cdot \ln \left\{ \frac{(1 + \hbar \omega_{LO} / \epsilon_{\vec{k}, \alpha})^{1/2} + 1}{(1 + \hbar \omega_{LO} / \epsilon_{\vec{k}, \alpha})^{1/2} - 1} \right\} \\ &= 2\pi \cdot \frac{m_{\alpha}}{\hbar^2 k} \cdot \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{1}{(2\ell-1) \cdot [(1 + \hbar \omega_{LO} / \epsilon_{\vec{k}, \alpha})^{1/2}]^{2\ell-1}} \end{aligned} \quad (C.5.1)$$

$$\begin{aligned}
\int \frac{1}{q^2} \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{LO}) d^3\vec{q} &= 2\pi \cdot \int d\vec{q} \cdot \int_{\theta=0}^{\pi} \delta\left(-\frac{\hbar^2 k q}{m_{\alpha}} \cdot \cos\theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\alpha}} + \hbar\omega_{LO}\right) \sin\theta d\theta \\
&= 2\pi \cdot \int_{k^-}^{k^+} dq \cdot \frac{m_{\alpha}}{\hbar^2 k q} \\
&= 2\pi \cdot \frac{m_{\alpha}}{\hbar^2 k} \cdot \ln \left\{ \frac{1 + (1 - \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2}}{1 - (1 - \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2}} \right\} \\
&= 2\pi \cdot \frac{m_{\alpha}}{\hbar^2 k} \cdot \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{1}{(2\ell-1)} \cdot [(1 - \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2}]^{2\ell-1}
\end{aligned}$$

(C.5.2)

e assim

$$\begin{aligned}
\dot{E}_{\alpha,LO}^{FR}(t) &= \theta_{LO} \cdot 2\pi \cdot \omega_{LO} \cdot eE_{\alpha\alpha} \cdot \{v_{LO}(t) \cdot \sum_{\vec{k}} \sum_{\ell=1}^{\infty} k^{-1} \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \frac{1}{(2\ell-1) [(1 + \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2}]^{2\ell-1}} - \\
&\quad - [1 + v_{LO}(t)] \cdot \sum_{\vec{k}} \sum_{\ell=1}^{\infty} k^{-1} \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \frac{[(1 - \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2}]^{2\ell-1}}{(2\ell-1)} \} \quad (C.6)
\end{aligned}$$

Ora,

$$\begin{aligned}
\sum_{\vec{k}} k^{-1} \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot (1 + \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{-\ell+1/2} &= \frac{v}{4\pi^3} \cdot [4\pi^3 \hbar^3 n / (2\pi m_{\alpha})^{3/2}] \cdot \beta_c^{3/2}(t) \cdot 2\pi \cdot \\
&\quad \cdot \exp[-\beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} m_{\alpha} v_{\alpha}^2(t)] \cdot \int_0^{\infty} dk \cdot k \cdot (1 + \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{-\ell+1/2} \cdot \exp[-\beta_c(t) \cdot \epsilon_{\vec{k},\alpha}] \cdot \\
&\quad \cdot \sinh(\beta_c(t) v_{\alpha}(t) \cdot \hbar k)
\end{aligned}$$

$$= \frac{V}{\pi^2} \cdot [4\pi^3 \hbar^3 n / (2\pi m_\alpha)^{3/2}] \cdot \beta_c^{3/2}(t) \cdot \exp[-\beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2(t)] \cdot$$

$$\cdot \sum_{\ell'=0}^{\infty} \frac{[\beta_c(t) \cdot v_\alpha(t) \cdot \hbar]^{2\ell'+1}}{(2\ell'+1)!} \cdot \left(\frac{2m_\alpha}{\hbar^2}\right)^{\ell'+1} \cdot \int_0^\infty (\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{\ell'+\ell-1/2} \cdot$$

$$\cdot (\epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{L0})^{-\ell+1/2} \cdot \exp[-\beta_c(t) \cdot \epsilon_{\vec{k},\alpha}] d\epsilon_k^\alpha$$

$$= \frac{V}{\pi^2} \cdot [4\pi^3 \hbar^3 n / (2\pi m_\alpha)^{3/2}] \cdot \beta_c^{3/2}(t) \cdot \exp[-\beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2(t)] \cdot$$

$$\cdot \sum_{\ell'=0}^{\infty} \frac{[\beta_c(t) \cdot v_\alpha(t) \cdot \hbar]^{2\ell'+1}}{(2\ell'+1)!} \cdot \left(\frac{2m_\alpha}{\hbar^2}\right)^{\ell'+1} \cdot \Gamma(\ell'+\ell+1/2) \cdot$$

$$\cdot U(\ell'+\ell+1/2, \ell'+2; \beta_c(t) \cdot \hbar\omega_{L0}) \quad (C.7)$$

onde na última passagem foi utilizada a identidade 13.2.5 da referência (41). Ao se fazer integrações similares, obtêm-se de (C.6) a equação (4.8.1).

No caso da taxa de variação de momentum dos portadores devido à sua interação com fônons óticos longitudinais via interação de Fröhlich, tem-se no limite clássico ($f_{\vec{k},\alpha} \ll 1$)

$$\begin{aligned} \dot{\pi}_{\alpha,LO}^{FR}(t) = & \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k},\vec{q}} \hbar q_{\epsilon,\alpha} \cdot |M_{\alpha,LO}^{FR}(\vec{q})|^2 \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot [1 + v_{\vec{q},LO}(t)] \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \\ & + \hbar\omega_{\vec{q},LO}) - \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k},\vec{q}} \hbar q_{\epsilon,\alpha} \cdot |M_{\alpha,LO}^{FR}(\vec{q})|^2 \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot v_{\vec{q},LO}(t) \cdot \\ & \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},LO}). \end{aligned} \quad (C.8.1)$$

Ao se tomar o modelo de Einstein para os fônons óticos tem-se $\hbar\omega_{\vec{q},LO} = \hbar\omega_{LO}$ e $v_{\vec{q},LO}(t) = [\exp(\beta_{LO}(t) \cdot \hbar\omega_{LO}) - 1]^{-1} \equiv v_{LO}(t)$; assim,

$$\begin{aligned} \dot{\pi}_{\alpha,LO}^{FR}(t) = & \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \{ [1 + v_{LO}(t)] \cdot \sum_{\vec{q}} \hbar q_{\epsilon,\alpha} \cdot |M_{\alpha,LO}^{FR}(\vec{q})|^2 \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \\ & + \hbar\omega_{LO}) - v_{LO}(t) \cdot \sum_{\vec{q}} \hbar q_{\epsilon,\alpha} \cdot |M_{\alpha,LO}^{FR}(\vec{q})|^2 \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{LO}) \} \\ = & v_{LO} \cdot \frac{V}{4\pi^2 \hbar} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \{ [1 + v_{LO}(t)] \cdot \frac{2\pi \hbar^3 e E_{o\alpha}}{V m_{\alpha}} \cdot \int q_{\epsilon,\alpha} \cdot q^{-2} \cdot \\ & \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{LO}) d^3 \vec{q} - v_{LO}(t) \cdot \frac{2\pi \hbar^3 e E_{o\alpha}}{V m_{\alpha}} \int q_{\epsilon,\alpha} \cdot q^{-2} \cdot \\ & \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{LO}) d^3 \vec{q} \} \end{aligned} \quad (C.8.2)$$

Ora,

$$\begin{aligned}
 & \int q_{\epsilon, \alpha} \cdot q^{-2} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \mp \hbar \omega_{LO}) d^3 \vec{q} = \\
 & = \int dq \cdot \int d\varphi \cdot \int_{\theta=0}^{\pi} q_{\epsilon, \alpha} \left(\pm \frac{\hbar^2 k q}{m_{\alpha}} \cos \theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\alpha}} \mp \hbar \omega_{LO} \right) \sin \theta d\theta \\
 & = 2\pi \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot \frac{m_{\alpha}^2}{\hbar^4 \cdot k^2} \cdot \left\{ \left(\mp \right) \frac{\hbar^2 k^2}{m_{\alpha}} \cdot \left(1 \pm \hbar \omega_{LO} / \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \right)^{1/2 \pm \hbar \omega_{LO}} \cdot \ln \left| \frac{\left(1 \pm \hbar \omega_{LO} / \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \right)^{1/2 \pm 1}}{\pm \left(1 \pm \hbar \omega_{LO} / \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \right)^{1/2 \mp 1}} \right| \right\}
 \end{aligned}
 \tag{C.9}$$

e assim

$$\begin{aligned}
 \pi_{\alpha, LO}^{FR}(t) = & \theta_{LO} \cdot \frac{V}{4\pi^2 \hbar} \{ [1 + v_{LO}(t)] \cdot \frac{2\pi \hbar^3 e E_{o\alpha}}{V m_{\alpha}} \cdot \frac{2\pi m_{\alpha}^2}{\hbar^4} \cdot \sum_{\vec{k}} k^{-2} \cdot \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \\
 & \cdot \left[- \frac{\hbar^2 k^2}{m_{\alpha}} \cdot \left(1 + \hbar \omega_{LO} / \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \right)^{1/2 \pm 2\hbar \omega_{LO}} \cdot \sum_{\ell'=1}^{\infty} \frac{1}{(2\ell'-1)} \cdot \right. \\
 & \cdot \left. \left(1 + \hbar \omega_{LO} / \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \right)^{-\ell'+1/2} \right] - v_{LO}(t) \cdot \frac{2\pi \hbar^3 E_{o\alpha}}{V m_{\alpha}} \cdot \frac{2\pi m_{\alpha}^2}{\hbar^4} \cdot \\
 & \cdot \sum_{\vec{k}} k^{-2} \cdot \cos \theta_{k_{\epsilon}} \cdot f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \left[+ \frac{\hbar^2 k^2}{m_{\alpha}} \cdot \left(1 - \hbar \omega_{LO} / \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \right)^{1/2} + \right. \\
 & \left. + 2\hbar \omega_{LO} \cdot \sum_{\ell'=1}^{\infty} \frac{1}{2\ell'-1} \cdot \left(1 - \hbar \omega_{LO} / \epsilon_{\vec{k}, \alpha} \right)^{\ell'-1/2} \right] \}
 \end{aligned}
 \tag{C.10}$$

Ora,

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \cos \theta_{k_\epsilon} \cdot (1 - \hbar \omega_{L0} / \epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2} = \\
 & = \frac{V}{4\pi^3} \cdot [4\pi^3 \hbar^3 n / (2\pi m_\alpha)^{3/2}] \cdot \beta_c^{3/2}(t) \cdot \exp \left[-\beta_b(t) \cdot \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2(t) \right] \cdot \\
 & \cdot \int_0^\infty k^2 \cdot (1 - \hbar \omega_{L0} / \epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2} \cdot \exp \left[-\beta_c(t) \cdot \epsilon_{\vec{k},\alpha} \right] \cdot \left[\frac{2 \cosh(\beta_c(t) \cdot \hbar k \cdot v_\alpha(t))}{\beta_c(t) \cdot \hbar k \cdot v_\alpha(t)} \right. \\
 & \left. - \frac{2 \sinh(\beta_c(t) \cdot \hbar k \cdot v_\alpha(t))}{\beta_c^2(t) \cdot (\hbar k)^2 \cdot v_\alpha^2(t)} \right] dk \quad (C.11)
 \end{aligned}$$

De acordo com a identidade 13.2.5 da referência (41),

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty k \cdot (1 - \hbar \omega_{L0} / \epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2} \cdot \exp \left[-\beta_c(t) \cdot \epsilon_{\vec{k},\alpha} \right] \cdot \cosh(\beta_c(t) \cdot \hbar k \cdot v_\alpha(t)) dk = \\
 & = \frac{1}{2} \cdot \sum_{\ell=0}^\infty \frac{|\beta_c(t) \cdot \hbar \cdot v_\alpha(t)|^{2\ell}}{(2\ell)!} \cdot \left(-\frac{2m_\alpha}{\hbar^2} \right)^{\ell+1} \cdot \exp \left[-\beta_c(t) \cdot \hbar \omega_{L0} \right] \cdot (\hbar \omega_{L0})^{\ell+1} \cdot \\
 & \cdot \Gamma(3/2) \cdot U(3/2, \ell+2; \beta_c(t) \cdot \hbar \omega_{L0}) \quad (C.12.1)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_0^\infty (1 - \hbar\omega_{L0}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2} \cdot \exp[-\beta_c(t) \cdot \epsilon_{\vec{k},\alpha}] \cdot \sinh(\beta_c(t) \cdot \hbar k \cdot v_\alpha(t)) dk = \\
& = \frac{1}{2} \cdot \sum_{\ell=0}^\infty \frac{[\beta_c(t) \cdot \hbar \cdot v_\alpha(t)]^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!} \cdot \left(\frac{2m_\alpha}{\hbar^2}\right)^{\ell+1} \cdot \exp[-\beta_b(t) \cdot \hbar\omega_{L0}] \cdot (\hbar\omega_{L0})^{\ell+1} \cdot \\
& \cdot \Gamma(3/2) \cdot U(3/2, \ell+2; \beta_c(t) \cdot \hbar\omega_{L0}) \quad (C.12.2)
\end{aligned}$$

e assim

$$\begin{aligned}
& \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \cos\theta_{k_\epsilon} \cdot (1 - \hbar\omega_{L0}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2} = \\
& = V \cdot n \cdot \frac{\beta_c(t) \cdot \hbar\omega_{L0}}{\pi^{1/2}} \cdot [\beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} \cdot m_\alpha v_\alpha^2(t)]^{-1/2} \cdot \exp[-\beta_c(t) \cdot \hbar\omega_{L0}] \cdot \\
& \cdot \exp[-\beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2(t)] \cdot \sum_{\ell=0}^\infty \Gamma(3/2) \cdot \left[\frac{1}{(2\ell+1)!} - \frac{1}{(2\ell)!} \right] \cdot \\
& \cdot [4 \cdot \beta_c(t) \cdot \frac{1}{2} m_\alpha v_\alpha^2(t) \cdot \beta_c(t) \cdot \hbar\omega_{L0}]^\ell \cdot U(3/2, \ell+2; \beta_c(t) \cdot \hbar\omega_{L0}) \quad (C.13)
\end{aligned}$$

Ao se fazer outras integrações similares, obtêm-se de (C.10) a equação (4.12.1).

APÊNDICE D

No caso da taxa de variação da energia dos portadores devido à sua interação com fônons óticos longitudinais via potencial de deformação, tem-se no limite clássico ($f_{\vec{k},\alpha} \ll 1$)

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha,LO}^{PD}(t) = & \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k},\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q},LO} \cdot |M_{\alpha,LO}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \{v_{\vec{q},LO}(t) \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \\ & - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{\vec{q},LO}) - [1+v_{\vec{q},LO}(t)] \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},LO})\} \end{aligned} \quad (D.1.1)$$

Ao se tomar o modelo de Einstein para os fônons óticos tem-se $\hbar\omega_{\vec{q},LO} = \hbar\omega_{LO}$ e $v_{\vec{q},LO}(t) = [\exp(\beta_{LO}(t) \cdot \hbar\omega_{LO}) - 1]^{-1} \equiv v_{LO}(t)$; assim,

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha,LO}^{PD}(t) = & \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \hbar\omega_{LO} \cdot \{v_{LO}(t) \cdot \sum_{\vec{q}} |M_{\alpha,LO}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{LO}) - \\ & - [1+v_{LO}(t)] \cdot \sum_{\vec{q}} |M_{\alpha,LO}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{LO})\} \end{aligned} \quad (D.1.2)$$

Para o espalhamento dos fônons óticos longitudinais via potencial de deformação, a matriz de interação é dada por

$$|M_{\alpha, LO}^{PD}(\vec{q})|^2 = E_{LO\alpha}^2 \cdot \hbar\omega_{LO} \cdot (2V\rho s^2)^{-1} \quad (D.2.1)$$

$$E_{LO\alpha}^2 = \frac{D_0^2 \cdot s^2}{\omega_{LO}^2} \quad (D.2.2)$$

onde D_0 é a constante do potencial de deformação associada aos fônons óticos⁽¹⁵⁾. Como

$$\sum_{\vec{q}} \dots \rightarrow \theta_{LO} \cdot \frac{V}{8\pi^3} \cdot \int \dots d^3\vec{q}$$

segue-se que

$$\begin{aligned} \dot{E}_{\alpha, LO}^{PD}(t) &= \theta_{LO} \cdot \frac{V}{4\pi^2\hbar} \cdot \hbar\omega_{LO} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \{v_{LO}(t) \cdot \frac{E_{LO\alpha}^2 \cdot \hbar\omega_{LO}}{2V\rho s^2} \cdot \int \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha} - \\ &\quad - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} - \hbar\omega_{LO}) d^3\vec{q} - [1+v_{LO}(t)] \cdot \frac{E_{LO\alpha}^2 \cdot \hbar\omega_{LO}}{2V\rho s^2} \int \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \\ &\quad + \hbar\omega_{LO}) d^3\vec{q} \} \end{aligned} \quad (D.4)$$

ora,

$$\begin{aligned} \int \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} - \hbar\omega_{LO}) d^3\vec{q} &= 2\pi \int dq \cdot q^2 \cdot \int_{\theta=0}^{\pi} \delta\left(\frac{\hbar^2 k q}{m_{\alpha}} \cos\theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\alpha}} - \hbar\omega_{LO}\right) \sin\theta d\theta \\ &= 2\pi \cdot \int_{k_{<}^+}^{k_{>}^-} dq \cdot q^2 \cdot \frac{m_{\alpha}}{\hbar^2 k q} \\ &= 4\pi \cdot m_{\alpha} k \cdot (1 + \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k}, \alpha})^{1/2} \end{aligned} \quad (D.5.1)$$

$$\begin{aligned}
\int \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{LO}) d^3\vec{q} &= 2\pi \cdot \int d\vec{q} \cdot q^2 \cdot \int_{\theta=0}^{\pi} \delta\left(-\frac{\hbar^2 k q}{m_\alpha} \cos\theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_\alpha} + \hbar\omega_{LO}\right) \sin\theta d\theta \\
&= 2\pi \cdot \int_{k_-}^{k_+} d\vec{q} \cdot q^2 \cdot \frac{m_\alpha}{\hbar^2 k q} \\
&= 4\pi \cdot m_\alpha k (1 - \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2} \quad (D.5.2)
\end{aligned}$$

e assim

$$\begin{aligned}
\dot{E}_{\alpha,LO}^{PD}(t) &= \theta_{LO} \cdot \frac{m_\alpha \cdot E_{LO\alpha}^2 \cdot (\hbar\omega_{LO})^2}{2\pi\hbar\rho_s^2} \cdot \{v_{LO}(t) \cdot \sum_{\vec{k}} k \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot (1 + \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2} - \\
&\quad - [1 + v_{LO}(t)] \cdot \sum_{\vec{k}} k \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot (1 - \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2}\} \quad (D.6)
\end{aligned}$$

Ao se fazer as integrações de forma similar às aquelas do Apêndice C, eq. (C.7), obtêm-se de (D.6) a equação (4.8.2).

No caso da taxa de variação de momentum dos portadores devido à sua interação com fônons óticos longitudinais via potencial de deformação, tem-se no limite clássico ($f_{\vec{k},\alpha} \ll 1$)

$$\dot{\pi}_{\alpha,LO}^{PD}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k},\vec{q}} \hbar q_{E,\alpha} \cdot |M_{\alpha,LO}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot [1 + v_{\vec{q},LO}(t)].$$

$$\cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} + \hbar\omega_{\vec{q},LO}) - \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k},\vec{q}} \hbar q_{E,\alpha} \cdot |M_{\alpha,LO}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot$$

$$\cdot v_{\vec{q},LO}(t) \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{\vec{q},LO}) \quad (D.7.1)$$

Ao se tomar o Modelo de Eistein para os fônons óticos tem-se $\hbar\omega_{\vec{q},LO} = \hbar\omega_{LO}$ e $v_{\vec{q},LO} = [\exp(\beta_{LO}(t) \cdot \hbar\omega_{LO}) - 1]^{-1} \equiv v_{LO}(t)$; assim,

$$\dot{\pi}_{\alpha,LO}^{PD} = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \{ [1 + v_{LO}(t)] \cdot \sum_{\vec{q}} \hbar q_{E,\alpha} \cdot |M_{\alpha,LO}^{PD}(\vec{q})|^2 \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} +$$

$$+ \hbar\omega_{LO}) - v_{LO}(t) \cdot \sum_{\vec{q}} \hbar q_{E,\alpha} \cdot |M_{\alpha,LO}^{FR}(\vec{q})|^2 \cdot$$

$$\delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} - \epsilon_{\vec{k},\alpha} - \hbar\omega_{LO}) \}$$

$$= \theta_{LO} \cdot \frac{V}{4\pi^2 \hbar} \cdot \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k},\alpha}(t) \cdot \{ [1 + v_{LO}(t)] \cdot E_{10\alpha}^2 \cdot \hbar\omega_{LO} \cdot (2V\rho_s^2)^{-1} \cdot$$

$$\begin{aligned}
& \int q_{\epsilon, \alpha} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar\omega_{LO}) d^3\vec{q} = v_{LO}(t) \cdot E_{LO\alpha}^2 \cdot \hbar\omega_{LO} \cdot \\
& \cdot (2V\rho_s^2)^{-1} \cdot \int q_{\epsilon, \alpha} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} - \hbar\omega_{LO}) d^3\vec{q} \}
\end{aligned}
\tag{D.7.2}$$

Ora,

$$\begin{aligned}
& q_{\epsilon, \alpha} \cdot \delta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}, \alpha} - \epsilon_{\vec{k}, \alpha} + \hbar\omega_{LO}) d^3\vec{q} = \\
& = \int dq \cdot q^2 \cdot \int d\varphi \cdot \int_{\theta=0}^{\pi} q_{\epsilon, \alpha} \cdot \delta\left(\pm \frac{\hbar^2 k q}{m_{\alpha}} \cdot \cos\theta + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\alpha}} \mp \hbar\omega_{LO}\right) \sin\theta d\theta \\
& = (\mp) 2\pi \cdot \cos\theta_{k_{\epsilon}} \cdot \frac{m_{\alpha}}{\hbar^2} \cdot \left\{ k^2 (1 \pm \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k}, \alpha})^{1/2} + k^2 (1 \pm \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k}, \alpha})^{3/2} \mp \frac{2m_{\alpha}}{\hbar^2} \cdot \right. \\
& \quad \left. \cdot \hbar\omega_{LO} (1 \pm \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k}, \alpha})^{1/2} \right\}
\end{aligned}
\tag{D.8}$$

e assim

$$\begin{aligned}
\pi_{\alpha, LO}^{PD}(t) &= v_{LO} \cdot \frac{V}{4\pi^2 \hbar} \cdot \{ [1 + v_{LO}(t)] \cdot E_{LO\alpha}^2 \cdot 2\pi m_{\alpha} \cdot \sum_{\vec{k}} \cos\theta_{k_{\epsilon}} \cdot f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot \\
& \cdot [k^2 (1 - \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k}, \alpha})^{1/2} + k^2 (1 - \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k}, \alpha})^{3/2} + \frac{2m_{\alpha}}{\hbar^2} \cdot \hbar\omega_{LO} \cdot \\
& \cdot (1 - \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k}, \alpha})^{1/2}] + v_{LO}(t) \cdot E_{LO\alpha}^2 \cdot 2\pi m_{\alpha} \cdot \sum_{\vec{k}} \cos\theta_{k_{\epsilon}} \cdot f_{\vec{k}, \alpha}(t) \cdot
\end{aligned}$$

$$\cdot [k^2(1+\hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2} + k^2 \cdot (1+\hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{3/2} - \frac{2m_\alpha}{\hbar^2} \cdot$$

(D.9)

$$\cdot \hbar\omega_{LO}(1 + \hbar\omega_{LO}/\epsilon_{\vec{k},\alpha})^{1/2}]\}$$

Ao se fazer as integrações utilizando-se a identidade 13.2.5 da referência (41) [Veja exemplo no Apêndice **C**], obtêm-se de (D.9) a equação (4.12.2).

BIBLIOGRAFIA

1. H.Haken, *Synergetics* (Springer, Berlin-Heidelberg, 1978).
2. G.Nicolis e I.Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems* (Wiley, New York, 1977).
3. (a) R.Zwanzig, *Ann. Rev. Phys. Chem.* 16, 67 (1965);
(b) R.Kubo, *J.Phys. Soc. Japan* 12, 570 (1957).
4. D.Forster, *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry and Correlation Functions* (Benjamin, Reading, MA, 1975).
5. B.Robertson, *Phys. Rev.* 144, 151 (1966); *ibid* 108, 171 (1967);
em *The Maximum Entropy Formalism*, editado por R.D.Levine e M. Tribus (MIT Press, Cambridge, MA, 1978).
6. H.Grabert, *Projection Operator Techniques in Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Springer, Berlin-Heidelberg, 1982).
7. H.Mori, I.Oppenheim e J.Ross, em *Studies in Statistical Mechanics I*, editado por J. de Boer e G.E.Uhlenbeck (North Holland, Amsterdam, 1962).
8. D.N.Zubarev, *Neravnovesnaia Statisticheskaiia Termodinamika* (Izd. Nauka, Moskwa, 1971) [Em inglês: *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics* (Consultants Bureau, New York, 1974)].
9. E.T.Jaynes, *Phys. Rev.* 106, 620 (1957); *ibid* 108, 171 (1957);
ibid Ref. (5).

10. A.C.Algarte,A.R.Vasconcelos,R.Luzzi e A.J.Sampaio, Rev. Brasil. Fis. 15, 106 (1985).
11. (a) J.M.Ziman, *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids* (Clarendon, Oxford,1960);
(b) D.Pines, *Elementary Excitations in Solids* (Benjamin, Reading, MA, 1964);
12. (a) E.G.D.Cohen, em *Fundamental Problems in Statistical Mechanics V*, editado por E.G.D.Cohen (North Holland, Amsterdam, 1980);
(b) J.R.Dorfman e H. Van Beijeren, em *Modern Theoretical Chemistry Vol. 6*, editado por B.J.Berne (Plenum, New York, 1977).
13. B.R. Nag, *Electron Transport in Compound Semiconductors* (Springer, Berlin-Heidelberg, 1980).
14. D.K.Ferry, em *Handbook on Semiconductors Vol. 1*, editado por T.S.Moss (North Holland, Amsterdam, 1982).
15. E.M. Conwell, Solid State Phys. Suppl. 9, 1 (1967).
16. (a) C.V.Shank, R.L.Fork,B.I.Greene,F.K.Reinhart and R.A. Logan, Appl. Phys. Lett. 38, 104 (1981).
(b) R.B. Hammond, Physica 134B, 475 (1985).

- (c) R.B.Hammond, N.G.Paulter e A.J. Gibbs, em *High-Speed Electronics*, editado por B.Källbäck e H.Beneking (Springer, Berlin-Heidelberg, 1986).
- (d) C.V.Shank, Proc. Fifth Int. Conf. on Hot Carriers, editado por J.Shah, Solid State Electronics Vol. (Pergamon, Oxford, 1987).
17. (a) T.Kurosawa, J. Phys. Soc. Japan Suppl. 21, 424 (1966).
- (b) P.J.Price, em *Semiconductors and Semimetals Vol.14*, editado por R.K.Williardson e A.C.Beer (Academic, New York, 1979).
- (c) C.Jacoboni e L.Reggiani, Rev. Mod. Phys.,Vol.55,3 (1983).
18. (a) H.Budd, J. Phys. Soc. Japan Suppl. 21, 420 (1966).
- (b) H.D.Rees, J. Phys. Chem. Solids 30, 643 (1969).
19. R.Brunetti e C.Jacoboni, em *Semiconductors Probed by Ultrafast Laser Spectroscopy*, editado por R. Alfano (Academic, New York, 1984).
20. (a) P.Kocevar, Physica, 134B, 155 (1985).
- (b) M.Rieger,P.Kocevar, P.Bordone, P.Lugli e L.Reggiani, *ibid* ref. (16d).

21. (a) J.G.Ruch, IEEE Trans. Elec. Dev. ED-19, 652 (1972).
 (b) T.J.Maloney and J.Frey, Journ. Appl. Phys., 48, 781 (1977).

22. J.D.Meindl, IEEE Trans. on Elec. Dev. 31, 1555 (1984).

23. C.M.Snowden, Rep. Prog. Phys., Vol. 48, pp. 223-275 (1985).

24. (a) W. Kohn e J.M. Luttinger, Phys. Rev. 108, 590 (1957).
 (b) _____, Phys. Rev. 109, 1892 (1958).

25. (a) N.Pottier e D.Calecki, Physica 110A, 471 (1982);
 (b) N.Pottier, Physica 117B, 241 (1982);
 (c) N.Pottier, Physica 121A, 293 (1983).

26. (a) J.J.Niez e D.K.Ferry, Phys. Rev. B28, 889 (1983);
 (b) J.J.Niez, K.S.Yi e D.K.Ferry, Phys. Rev. B28, 1988 (1983);

27. (a) D.C.Langreth e J.W.Wilkins, Phys. Rev. B6, 3189 (1972);
 (b) A.P.Jahuo e J.W.Wilkins, Phys. Rev. Lett. 49, 762 (1982);
 (c) A.P.Jahuo e J.W.Wilkins, Phys. Rev. B29, 1919 (1984).

28. J.R. Barker e S. Murray, Phys. Lett. 93A, 271 (1983).
29. N. Sawaki, J. Phys. C 16, 4611 (1983).
30. (a) A.J. Sampaio, Tese de Doutorado (UNICAMP, 1983, não publicada);
 (b) A.C. Algarte, Tese de Doutorado (UNICAMP, 1983, não publicada);
 (c) R. Luzzi e A.R. Vasconcellos, em *Ultrafast Transient Response of Nonequilibrium Semiconductor Plasma*, *ibid* Ref. (19);
 (d) T. Tomê, Tese de Doutorado (UNICAMP, 1987, não publicada);
 (e) A.S.C. Esperidião, Tese de Doutorado, em desenvolvimento;
 (f) A.C. Algarte, A.R. Vasconcellos, R. Luzzi, and A.J. Sampaio, Rev. Brasil. Fis. 16, 42 (1986).
31. V.N. Freire, A.R. Vasconcellos, e R. Luzzi, *ibid*. Ref. (16c).
32. V.N. Freire, A.R. Vasconcellos, e R. Luzzi, em *Hot Carriers in Semiconductors 5, Solid State Electronics* (Pergamon, Oxford, 1987).
33. (a) C.V. Shank, D.H. Auston, E.P. Ippen, e O. Teschke, Solid State Commun. 26, 567 (1978);
 (b) D. von der Linde e R. Lambrich, Phys. Rev. Lett. 42, 1090 (1979);

(c) R.J. Seymour, M.R. Junnakar, e R.R. Alfano, *Solid State Commun.* 41, 657 (1982).

(d) J. Shah e R.F. Leheny, *ibid.* Ref. (19).

34. J. Collet, T. Amand, e R. Pugnet, *Phys. Lett.* 96A, 368 (1983).

35. J.A. Kash e J.C. Tsang, *Proc. 18-Int. Conf. Phys. Semic.*, editado por O. Engström (World Scientific, Singapore, 1986).

36. Carlos H. Brito Cruz, comunicação privada.

37. A.C. Algarte e R. Luzzi, *Phys. Rev.* B27, 7563 (1983).

38. R. Luzzi e A.R. Vasconcellos, *ibid.* Ref. (19).

39. V.N. Freire, A.R. Vasconcellos, e R. Luzzi, para ser submetido a *Phys. Rev.*

40. A.C. Algarte, comunicação privada.

41. M. Abramovitz e I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1970).

42. I.S. Gradshteyn e I.M. Ryzhik, *Table of Integrals Series and Products* (Academic, New York, 1965).

43. (a) R. Luzzi, A.R. Vasconcellos, e A.C. Algarte, *Rev. Brasil. Fis.* 16, 495 (1986).

(b) V.N. Freire, A.R. Vasconcellos, e R. Luzzi, Submetido a Zeitschrift für Physik B.

44. H. Mori, Prog. Theor. Phys. 33, 423 (1965).

45. K. Kawasaki e J.D. Gunton, Phys. Rev. A8, 2048 (1972).

46. R. Zwanzig, *Perspectives in Statistical Physics*, editado por H.J. Raveché (North Holland, Amsterdam, 1981).

47. V.N. Freire, A.S.C. Esperidião, e A.J.C. Sampaio, Resumo do VI Encontro de Físicos do Nordeste, Nov/87.

48. M.A. Osman, U. Ravaioli, e D.K. Ferry, ibid. Ref. (16c).