

# Propriedades Ópticas de Sólidos

**Lúcio H. Acioli**

**Departamento de Física - UFPE**

# Propriedades ópticas de sólidos

## 1 Introdução

## 2 Propagação clássica de ondas eletromagnéticas

- Equações de Maxwell
- Processos ópticas
- Oscilador de Lorentz
- Susceptibilidade e índice de refração complexos
- Relações de Kramers-Kronig

## 3 Elétrons livres: modelo de Lorentz-Drude

- Refletividade de plasmas

## 4 Semicondutores: transições interbanda

- Bandas eletrônicas
- Densidade de estados
- Transições interbanda (gap direto)

## 5 Éxcitons

- Éxcitons livres

## 6 Confinamento quântico

- Estruturas com confinamento quântico 1, 2, 3D
- Poços quânticos
- Pontos quânticos

## 7 Finalizando...

# Introdução

Serão abordados as **propriedades ópticas básicas da matéria condensada**. As ferramentas básicas são as Equações de Maxwell, que permitem um tratamento clássico dos fenômenos ópticos de uma forma bastante satisfatória.

A mecânica quântica é necessária aqui apenas para descrever a matéria. A palavra fóton, fundamental na óptica quântica, será usada apenas por um vício de linguagem.

Tentaremos abordar aspectos mais modernos da óptica de materiais, mas nosso objetivo primário é introduzir a descrição matemática e aspectos experimentais mais importantes para a caracterização da matéria condensada. Nosso foco maior será em sistemas cristalinos, ou parcialmente ordenados, presentes na natureza ou preparados artificialmente.

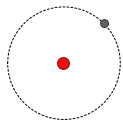
## Bibliografia

- 1 ***Optical Properties of Solids***, Mark Fox, Oxford, (2012) - **Livro texto**
- 2 *Óptica Moderna - Fundamentos e Aplicações*, S. C. Zilio, IFSC / USP (2009);

# Acoplamento radiação-matéria

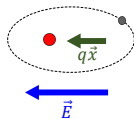
*Como a radiação acopla-se à matéria?*

## *Como a radiação acopla-se à matéria?*

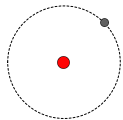


### Átomo neutro:

Trabalho é realizado sobre a matéria através do **momento de dipolo induzido** pelo campo elétrico aplicado.

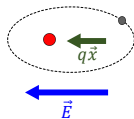


## Como a radiação acopla-se à matéria?



### Átomo neutro:

Trabalho é realizado sobre a matéria através do **momento de dipolo induzido** pelo campo elétrico aplicado.



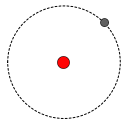
### Molécula polar:

Trabalho é realizado pelo campo elétrico aplicado sobre a matéria através do **momento de dipolo permanente**.

$$H_{int} = -\mu \cdot \mathbf{E}$$

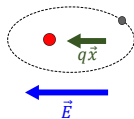
# Acoplamento radiação-matéria

## Como a radiação acopla-se à matéria?



### Átomo neutro:

Trabalho é realizado sobre a matéria através do **momento de dipolo induzido** pelo campo elétrico aplicado.



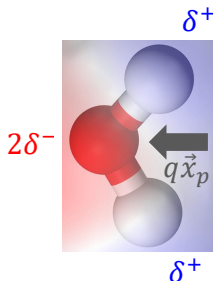
### Molécula polar:

Trabalho é realizado pelo campo elétrico aplicado sobre a matéria através do **momento de dipolo permanente**.

$$H_{int} = -\mu \cdot \mathbf{E}$$

### Forno de micro-ondas

Campo elétrico oscilante (  $f_{mo} = 2.45 \text{ GHz}$  ) acopla-se ao dipolo permanente da água, transferindo energia para o “sistema” (farinha de trigo, açúcar, ovos, ...)



# Propriedades ópticas de sólidos

## 1 Introdução

## 2 Propagação clássica de ondas eletromagnéticas

- Equações de Maxwell
- Processos ópticas
- Oscilador de Lorentz
- Susceptibilidade e índice de refração complexos
- Relações de Kramers-Kronig

## 3 Elétrons livres: modelo de Lorentz-Drude

- Refletividade de plasmas

## 4 Semicondutores: transições interbanda

- Bandas eletrônicas
- Densidade de estados
- Transições interbanda (gap direto)

## 5 Éxcitons

- Éxcitons livres

## 6 Confinamento quântico

- Estruturas com confinamento quântico 1, 2, 3D
- Poços quânticos
- Pontos quânticos

## 7 Finalizando...



# Equações de Maxwell

(Meios materiais / MKS)

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}\end{aligned}$$

Relações constitutivas:

$$\begin{aligned}\mathbf{D} &= \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon \mathbf{E} \\ \mathbf{H} &= \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M} = \frac{1}{\mu} \mathbf{B}\end{aligned}$$

Conservação da carga:

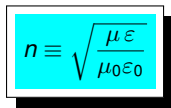
$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

⇒ Radiação eletromagnética satisfaz **eq de ondas**. Meio isotrópico e homogêneo:

$$\nabla^2 \begin{Bmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{B} \end{Bmatrix} - \mu\epsilon \frac{\partial^2}{\partial t^2} \begin{Bmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{B} \end{Bmatrix} = \nabla^2 \begin{Bmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{B} \end{Bmatrix} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \begin{Bmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{B} \end{Bmatrix} = 0$$

$$v = \frac{c}{n} = \sqrt{\frac{1}{\mu_0\epsilon_0}} \sqrt{\frac{\mu_0\epsilon_0}{\mu\epsilon}}$$

Índice de refração  $n$  :


$$n \equiv \sqrt{\frac{\mu\epsilon}{\mu_0\epsilon_0}}$$

# Equações de Maxwell - Vetor de Poynting

## Vetor de Poynting :

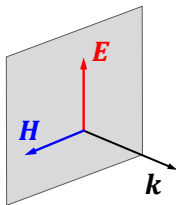
Energia por unidade de tempo e de área que a onda EM carrega ( W/m<sup>2</sup>).

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} = \frac{1}{\mu} \mathbf{E} \times \mathbf{B}$$

Ondas monocromáticas planas:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \quad ; \quad \mathbf{H} = \mathbf{H}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \Rightarrow \mathbf{B} = \frac{1}{\omega} \mathbf{k} \times \mathbf{E} = \frac{n}{c} \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E}$$



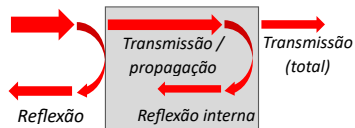
Densidade de energia:

$$u_{EM} = \frac{1}{2} \left( \epsilon \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{\mu} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \right) \Rightarrow$$

$$\mathbf{S} = \frac{c}{n} u_{EM} \hat{\mathbf{k}} \quad ; \quad u_{EM} \propto \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}$$

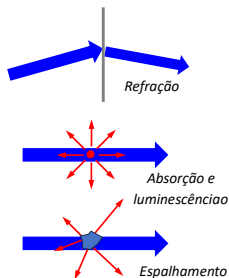
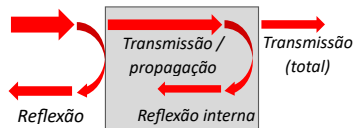
# Processos ópticos

Luz incidente sobre um meio material **homogêneo**.  
A figura ilustra um os fenômenos de **reflexão**,  
**transmissão**, **propagação**, **reflexão interna** e  
**transmissão (total)**, nesta sequência.



# Processos ópticos

Luz incidente sobre um meio material **homogêneo**.  
A figura ilustra um os fenômenos de **reflexão**,  
**transmissão**, **propagação**, **reflexão interna** e  
**transmissão (total)**, nesta sequência.



Ao propagar num meio material, fenômenos ópticos fundamentais manifestam-se. O espalhamento Rayleigh, por exemplo, da luz do sol nas inhomogeneidades da nossa atmosfera resultam na cor azul do céu.

Conhecer bem o comportamento da luz permite obter informação sobre o meio com o qual ela interage. De fato, a **interação radiação-matéria** é uma das ferramentas mais importantes no desenvolvimento da Física Moderna.

# Processos ópticos

- Reflexão e Transmissão

# Processos ópticos

- **Reflexão e Transmissão**

Quando a luz atinge uma interface entre dois meios distintos, parte da potência é refletida e parte é transmitida. Definimos:

$$R = \frac{\text{Potência refletida}}{\text{Potência incidente}}, \quad T = \frac{\text{Potência transmitida}}{\text{Potência incidente}}$$

Conservação da energia:

$$R + T = 1$$

Os coeficientes  $R$  e  $T$  são os **coeficientes de reflexão** e de **transmissão**, respectivamente.

# Processos ópticos

## • Reflexão e Transmissão

Quando a luz atinge uma interface entre dois meios distintos, parte da potência é refletida e parte é transmitida. Definimos:

$$R = \frac{\text{Potência refletida}}{\text{Potência incidente}}, \quad T = \frac{\text{Potência transmitida}}{\text{Potência incidente}}$$

Conservação da energia:

$$R + T = 1$$

Os coeficientes  $R$  e  $T$  são os **coeficientes de reflexão** e de **transmissão**, respectivamente.

## • Propagação

A propagação da luz em um meio homogêneo é descrita pelas Equações de Maxwell, e a velocidade de propagação é determinada pelo **índice de refração**,  $n$  do meio:

$$v = \frac{c}{n}$$

# Processos ópticos

- Propagação

**Dispersão** : dependência do índice de refração com o comprimento de onda,  $\lambda$ , da luz:

$$n = n(\lambda)$$



# Processos ópticos

- Propagação

**Dispersão** : dependência do índice de refração com o comprimento de onda,  $\lambda$ , da luz:

$$n = n(\lambda)$$

**Absorção** : **intensidade** (energia por unidade de tempo e de área) da luz, depois de propagar uma distância  $z$  no meio, obedece a **Lei de Beer**:

$$I(z) = I_0(z) e^{-\alpha z}$$

$I_0$ : intensidade inicial e  $\alpha = \alpha(\lambda)$  é o coeficiente de absorção (inverso de comprimento)

# Processos ópticos

- Propagação

**Dispersão** : dependência do índice de refração com o comprimento de onda,  $\lambda$ , da luz:

$$n = n(\lambda)$$

**Absorção** : **intensidade** (energia por unidade de tempo e de área) da luz, depois de propagar uma distância  $z$  no meio, obedece a **Lei de Beer**:

$$I(z) = I_0(z) e^{-\alpha z}$$

$I_0$ : intensidade inicial e  $\alpha = \alpha(\lambda)$  é o coeficiente de absorção (inverso de comprimento)

**Densidade óptica** (“*Optical Density*”) - medida da transmissividade do meio de comprimento  $\ell$ :

$$O.D. \equiv -\log_{10} \left[ \frac{I(\ell)}{I_0} \right] = 0,434 \alpha \ell$$

# Coefficientes ópticos

- Absorção / Espalhamento

**Seção de choque** : área “efetiva” de um centro espalhador, ou centro absorvedor.

**Coefficiente de extinção** depende:

- da **densidade de espalhadores**,  $N$  ;
- da **seção de choque** (area),  $\sigma_p$ , do processo.

$$I(z) = I_0 e^{-N \sigma_p z} \quad ; \quad \alpha = -N \sigma_p$$

# Coefficientes ópticos

## • Absorção / Espalhamento

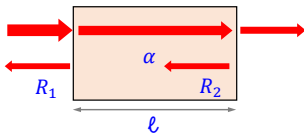
**Seção de choque** : área “efetiva” de um centro espalhador, ou centro absorvedor.

**Coefficiente de extinção** depende:

- da **densidade de espalhadores**,  $N$ ;
- da **seção de choque** (area),  $\sigma_p$ , do processo.

$$I(z) = I_0 e^{-N\sigma_p z} \quad ; \quad \alpha = -N\sigma_p$$

## Transmissão total



$$\Phi \equiv 2nk\ell$$

Supomos  $R_1 = R_2 = R$

1) Luz incoerente (**sem** interferência):

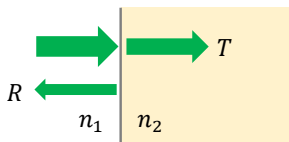
$$T = \frac{(1 - R)^2 e^{-\alpha \ell}}{1 - R^2 e^{-2\alpha \ell}}$$

2) Luz coerente (**com** interferência):

$$T = \frac{(1 - R)^2 e^{-\alpha \ell}}{1 - 2R e^{-\alpha \ell} \cos \Phi - R^2 e^{-2\alpha \ell}}$$

# Coeficientes ópticos - Refletividade

- Alguns números

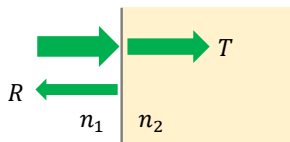


Ao incidir na interface entre dois meios de índices de refração  $n_1$  e  $n_2$ , a refletividade e a transmissividade são, respectivamente

$$R = \frac{(n_1 - n_2)^2}{(n_1 + n_2)^2} \quad ; \quad T = 1 - R = \frac{4 n_1 n_2}{(n_1 + n_2)^2}$$

# Coefficientes ópticos - Refletividade

- Alguns números



Ao incidir na interface entre dois meios de índices de refração  $n_1$  e  $n_2$ , a refletividade e a transmissividade são, respectivamente

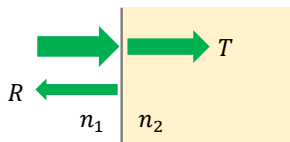
$$R = \frac{(n_1 - n_2)^2}{(n_1 + n_2)^2} \quad ; \quad T = 1 - R = \frac{4 n_1 n_2}{(n_1 + n_2)^2}$$

## Exemplos:

- Interface **ar / vidro comum** (borossilicato):  $n_v \approx 1,5 \quad \Rightarrow \quad R_v \approx 0,04 \text{ (4\%)}$

# Coeficientes ópticos - Refletividade

- Alguns números



Ao incidir na interface entre dois meios de índices de refração  $n_1$  e  $n_2$ , a refletividade e a transmissividade são, respectivamente

$$R = \frac{(n_1 - n_2)^2}{(n_1 + n_2)^2} \quad ; \quad T = 1 - R = \frac{4 n_1 n_2}{(n_1 + n_2)^2}$$

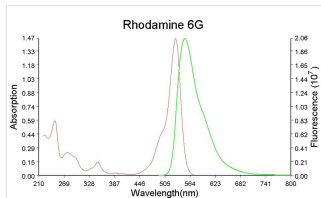
## Exemplos:

- Interface **ar / vidro comum** (borossilicato):  $n_v \approx 1,5 \Rightarrow R_v \approx 0,04$  (4%)
- Interface **ar / GaAs**:  $n_{GaAs} \approx 3,5 \Rightarrow R_{GaAs} \approx 0,31$  (31%)

Suficiente para operação de um laser de diodo baseado em GaAs!

# Coeficientes ópticos - Absorção

- Alguns números



**Rodamina 6G** (lasers de corante);

**Massa molecular:**  $M_{mol} = 479$  g/mol)

**Seção de choque:**  $\sigma_{abs} = 3,8 \times 10^{-16}$  cm<sup>2</sup>

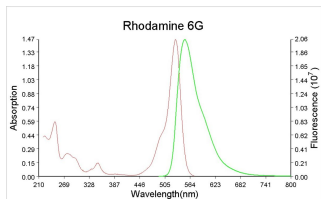
**Densidade (num laser):**  $N_a \approx 10^{18}$  1/cm<sup>3</sup>

$$\alpha_{abs}^{Rh6G} = N \sigma_{abs}^{Rh6G} \approx 3,8 \times 10^2 \text{ cm}^{-1}$$



# Coefficientes ópticos - Absorção

- Alguns números



**Rodamina 6G** (lasers de corante);

Massa molecular:  $M_{mol} = 479$  g/mol)

Seção de choque:  $\sigma_{abs} = 3,8 \times 10^{-16}$  cm<sup>2</sup>

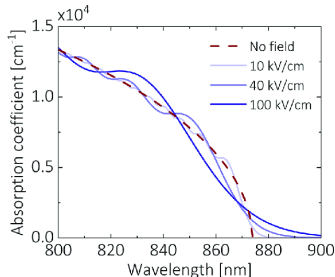
Densidade (num laser):  $N_a \approx 10^{18}$  1/cm<sup>3</sup>

$$\alpha_{abs}^{Rh6G} = N \sigma_{abs}^{Rh6G} \approx 3,8 \times 10^2 \text{ cm}^{-1}$$

Coefficiente de absorção **GaAs** ( $\lambda = 850$  nm):

$$\alpha_{abs}^{GaAs} \approx 1,3 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$$

$$\ell_{abs} \equiv 1/\alpha_{abs}^{GaAs} \approx 0.77 \text{ } \mu\text{m} !$$



# Oscilador de Lorentz

Índice de refração  $n$   $\Rightarrow$  propriedades ópticas do meio.

Permissividade elétrica,  $\epsilon$ , e permeabilidade magnética,  $\mu$  definem  $n$ .

$$n \equiv \sqrt{\frac{\mu \epsilon}{\mu_0 \epsilon_0}} \rightarrow \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}} \equiv \sqrt{\epsilon_r}$$

(Materiais não magnéticos:  $\mu = \mu_0$ )

# Oscilador de Lorentz

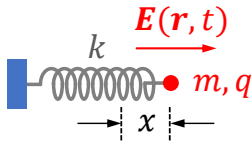
Índice de refração  $n$   $\Rightarrow$  propriedades ópticas do meio.

Permissividade elétrica,  $\epsilon$ , e permeabilidade magnética,  $\mu$  definem  $n$ .

$$n \equiv \sqrt{\frac{\mu \epsilon}{\mu_0 \epsilon_0}} \rightarrow \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}} \equiv \sqrt{\epsilon_r}$$

(Materiais não magnéticos:  $\mu = \mu_0$ )

**Oscilador de Lorentz**: modelo simples que descreve diversos materiais ópticos



$$\omega_0^2 \equiv \frac{k}{m}$$

Amortecimento:  $F_{visc} = -\gamma v$

# Oscilador de Lorentz

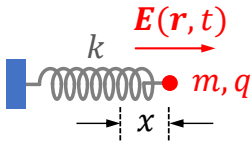
Índice de refração  $n$   $\Rightarrow$  propriedades ópticas do meio.

Permissividade elétrica,  $\epsilon$ , e permeabilidade magnética,  $\mu$  definem  $n$ .

$$n \equiv \sqrt{\frac{\mu \epsilon}{\mu_0 \epsilon_0}} \rightarrow \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}} \equiv \sqrt{\epsilon_r}$$

(Materiais não magnéticos:  $\mu = \mu_0$ )

**Oscilador de Lorentz**: modelo simples que descreve diversos materiais ópticos



$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F_{mola} + F_E + F_{visc} = -kx + qE(t) - m\gamma \frac{dx}{dt}$$

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = \frac{qE_0}{m} e^{-i\omega t}$$

$$\omega_0^2 \equiv \frac{k}{m}$$

$$x(t) = x_0 e^{-i\omega t} = \frac{qE_0}{m [\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega]} e^{-i\omega t}$$

Amortecimento:  $F_{visc} = -\gamma v$

# Resposta do meio: polarização

$N$  osciladores por unidade de volume. Momento de dipolo elétrico é

$$p(t) = q x(t) = q x_0 e^{-i\omega t}$$

**Polarização: número de dipolos por unidade de volume**  $\Rightarrow P(t) = N p(t)$

$$P(t) = P_0 e^{-i\omega t} = N q x_0 e^{-i\omega t} = \frac{N q^2 E_0}{m [\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega]} e^{-i\omega t} \equiv \varepsilon_0 \tilde{\chi}_R(\omega) E_0 e^{-i\omega t}$$

# Resposta do meio: polarização

$N$  osciladores por unidade de volume. Momento de dipolo elétrico é

$$p(t) = q x(t) = q x_0 e^{-i\omega t}$$

**Polarização: número de dipolos por unidade de volume**  $\Rightarrow P(t) = N p(t)$

$$P(t) = P_0 e^{-i\omega t} = N q x_0 e^{-i\omega t} = \frac{N q^2 E_0}{m [\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega]} e^{-i\omega t} \equiv \epsilon_0 \tilde{\chi}_R(\omega) E_0 e^{-i\omega t}$$

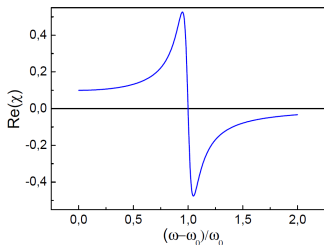
**Susceptibilidade (elétrica), ressonante**

$$\tilde{\chi}_R(\omega) = \frac{N q^2 E_0}{m \epsilon_0 [\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega]} = \chi_{E'}^r(\omega) + i \chi_{E'}^i(\omega)$$

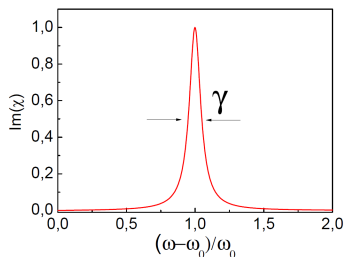
$$P^r(t) = \text{Re} \left[ \left( \tilde{\chi}_R^r + i \tilde{\chi}_R^i \right) E_0 (\cos \omega t - i \sin \omega t) \right] = \tilde{\chi}_R^r E_0 \cos \omega t + \tilde{\chi}_R^i E_0 \sin \omega t$$

Respostas em **fase** ( $\cos \omega t$ ) e em **quadratura** ( $\sin \omega t$ )

# Susceptibilidade complexa

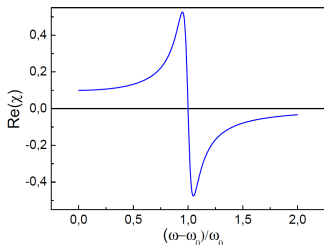


$\text{Re}(\tilde{\chi}_R) \Leftrightarrow$  dispersão

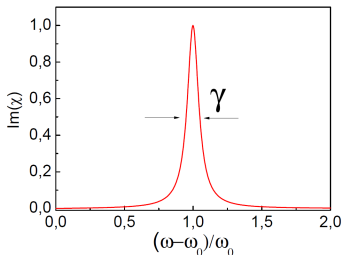


$\text{Im}(\tilde{\chi}_R) \Leftrightarrow$  absorção

# Susceptibilidade complexa



$Re(\tilde{\chi}_R) \Leftrightarrow$  dispersão



$Im(\tilde{\chi}_R) \Leftrightarrow$  absorção

## Comentários:

- 1 Efeitos dispersivos decaem mais lentamente com  $\omega - \omega_0$  que efeitos absorptivos;
- 2 As figuras acima envolvem ressonâncias estreitas:  $\gamma \ll \omega_0$ ;
- 3 Bandas eletrônicas apresentam “ressonâncias” muito mais largas;
- 4 Modelo de Lorentz pode ser usado para descrever elétrons num metal;
- 5 Relações de **Kramers-Kronig** relacionam absorção e dispersão.



# Susceptibilidade e índice de refração complexos

# Susceptibilidade e índice de refração complexos

Das relações constitutivas e ainda supondo meios **não magnéticos**:  $\mu = \mu_0$

$$\mathbf{D} = \tilde{\epsilon}\mathbf{E} = \epsilon_0\mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_0\mathbf{E} + \epsilon_0\chi_{NR}\mathbf{E} + \epsilon_0\tilde{\chi}_R\mathbf{E}$$

$$\frac{\tilde{\epsilon}}{\epsilon_0} \equiv \epsilon_r = (1 + \tilde{\chi}_R + \chi_{NR})$$

A contribuição não-ressonante,  $\chi_{NR}$ , **real**, inclui outras contribuições, geralmente associadas a ressonâncias “*distantes*”

# Susceptibilidade e índice de refração complexos

Das relações constitutivas e ainda supondo meios **não magnéticos**:  $\mu = \mu_0$

$$\mathbf{D} = \tilde{\epsilon}\mathbf{E} = \epsilon_0\mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_0\mathbf{E} + \epsilon_0\chi_{NR}\mathbf{E} + \epsilon_0\tilde{\chi}_R\mathbf{E}$$

$$\frac{\tilde{\epsilon}}{\epsilon_0} \equiv \epsilon_r = (1 + \tilde{\chi}_R + \chi_{NR})$$

A contribuição não-ressonante,  $\chi_{NR}$ , **real**, inclui outras contribuições, geralmente associadas a ressonâncias “*distantes*”

**Índice de refração e susceptibilidade:**  $\tilde{n} = \sqrt{\tilde{\epsilon}_r}$

$$\tilde{n}(\omega) = \sqrt{1 + \chi_{NR} + \tilde{\chi}_R(\omega)} \equiv \sqrt{n_{NR} + \tilde{\chi}_R(\omega)} \approx n_{NR} + \frac{\tilde{\chi}_R(\omega)}{2n_{NR}}$$

(Usamos o fato de que, em geral,  $|\chi| \ll 1$ )

# Relações de Kramers-Kronig

# Relações de Kramers-Kronig

**Relações de Kramers-Kronig:** consequência da **causalidade**.

Índice de refração complexo

$$\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega)$$

# Relações de Kramers-Kronig

**Relações de Kramers-Kronig:** consequência da **causalidade**.

Índice de refração complexo

$$\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega)$$

**Kramers-Kronig** relaciona partes dispersiva e absorptiva do índice de refração.

$$n(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \text{P} \int_0^{\infty} \frac{\omega' \kappa(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

$$\kappa(\omega) = -\frac{2}{\pi\omega} \text{P} \int_0^{\infty} \frac{\omega'^2 [n(\omega') - 1]}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

$$\text{P} \int_a^b f(x) dx = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left( \int_a^{c-\delta} f(x) dx + \int_{c+\delta}^b f(x) dx \right)$$

# Propriedades ópticas de sólidos

## 1 Introdução

## 2 Propagação clássica de ondas eletromagnéticas

- Equações de Maxwell
- Processos ópticas
- Oscilador de Lorentz
- Susceptibilidade e índice de refração complexos
- Relações de Kramers-Kronig

## 3 Elétrons livres: modelo de Lorentz-Drude

- Refletividade de plasmas

## 4 Semicondutores: transições interbanda

- Bandas eletrônicas
- Densidade de estados
- Transições interbanda (gap direto)

## 5 Éxcitons

- Éxcitons livres

## 6 Confinamento quântico

- Estruturas com confinamento quântico 1, 2, 3D
- Poços quânticos
- Pontos quânticos

## 7 Finalizando...

# Elétrons livres: modelo de Lorentz-Drude



# Elétrons livres: modelo de Lorentz-Drude

**Plasma:** partículas livres, positivas e negativas. Um metal ou um semicondutor fortemente dopado podem ser tratados como um plasma no qual as cargas positivas estão em posições fixas.

**Lorentz-Drude** resposta eletrônica do sistema, supondo  $k = m\omega_0^2 = 0$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \cancel{\omega_0^2} x = \frac{qE_0}{m} e^{-i\omega t} \quad \Rightarrow \quad x_0 = -\frac{qE_0}{m} \frac{1}{\omega^2 + i\gamma\omega}$$

$$\epsilon_r(\omega) \equiv \frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{Nq^2}{\epsilon_0 m_0} \frac{1}{\omega^2 + i\gamma\omega}$$

# Elétrons livres: modelo de Lorentz-Drude

**Plasma:** partículas livres, positivas e negativas. Um metal ou um semicondutor fortemente dopado podem ser tratados como um plasma no qual as cargas positivas estão em posições fixas.

**Lorentz-Drude** resposta eletrônica do sistema, supondo  $k = m\omega_0^2 = 0$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \cancel{\omega_0^2} x = \frac{qE_0}{m} e^{-i\omega t} \quad \Rightarrow \quad x_0 = -\frac{qE_0}{m} \frac{1}{\omega^2 + i\gamma\omega}$$

$$\epsilon_r(\omega) \equiv \frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{Nq^2}{\epsilon_0 m_0} \frac{1}{\omega^2 + i\gamma\omega}$$

Definindo a **frequência de plasma** e desprezando o amortecimento,  $\gamma$

$$\omega_p \equiv \sqrt{\frac{Nq^2}{\epsilon_0 m_0}}$$

$$\omega_p^{Au} = 1,12 \times 10^{16} \text{ rad/s}$$

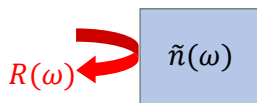
$$\epsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

# Refletividade de plasmas

O que acontece quando a radiação incide sobre a interface do vácuo com um plasma?

$$\epsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \rightarrow \begin{cases} < 0 & p/\omega < \omega_p \\ > 0 & p/\omega > \omega_p \end{cases}$$

$$\tilde{n}(\omega) = \sqrt{\epsilon_r(\omega)} \rightarrow \begin{cases} \text{imaginário puro} & p/\omega < \omega_p \\ \text{real} & p/\omega > \omega_p \end{cases}$$

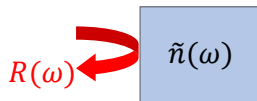


# Refletividade de plasmas

O que acontece quando a radiação incide sobre a interface do vácuo com um plasma?

$$\epsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \rightarrow \begin{cases} < 0 & \rho/\omega < \omega_p \\ > 0 & \rho/\omega > \omega_p \end{cases}$$

$$\tilde{n}(\omega) = \sqrt{\epsilon_r(\omega)} \rightarrow \begin{cases} \text{imaginário puro} & \rho/\omega < \omega_p \\ \text{real} & \rho/\omega > \omega_p \end{cases}$$

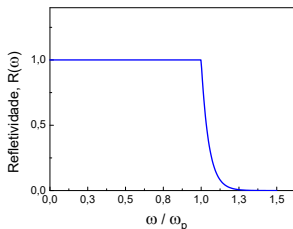


**Refletividade:**

$$R(\omega) = |(\tilde{n} - 1) / (\tilde{n} + 1)|$$

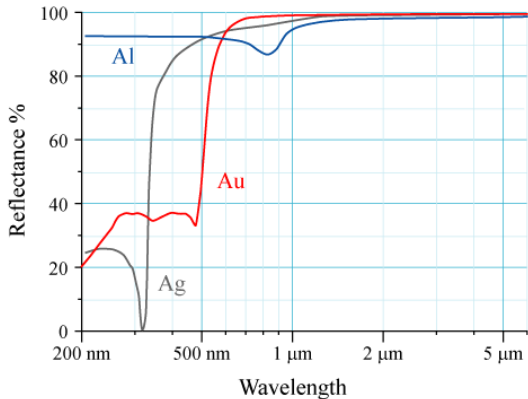
$$R(\omega) \rightarrow 1 \quad \text{para} \quad \omega < \omega_p$$

Para frequências menores que  $\omega_p$ , a radiação é **totalmente refletida**



# Refletividade: metais nobres

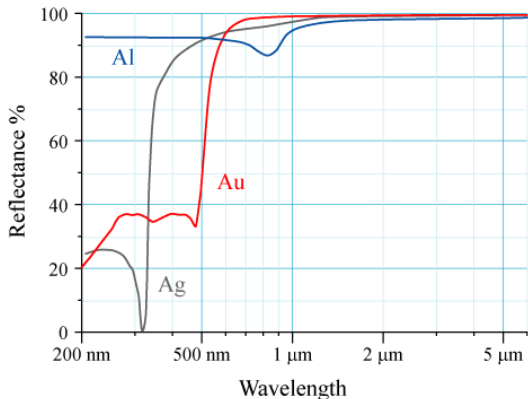
Refletividade do ouro (**Au**), alumínio (**Al**) e prata (**Ag**); incidência normal



Lembrar que  $\omega \propto 1/\lambda$ !

# Refletividade: metais nobres

Refletividade do ouro (**Au**), alumínio (**Al**) e prata (**Ag**); incidência normal



Lembrar que  $\omega \propto 1/\lambda$ !

Transições **interbanda** no metal não foram considerados aqui!

# Propriedades ópticas de sólidos

## 1 Introdução

## 2 Propagação clássica de ondas eletromagnéticas

- Equações de Maxwell
- Processos ópticas
- Oscilador de Lorentz
- Susceptibilidade e índice de refração complexos
- Relações de Kramers-Kronig

## 3 Elétrons livres: modelo de Lorentz-Drude

- Refletividade de plasmas

## 4 Semicondutores: transições interbanda

- Bandas eletrônicas
- Densidade de estados
- Transições interbanda (gap direto)

## 5 Éxcitons

- Éxcitons livres

## 6 Confinamento quântico

- Estruturas com confinamento quântico 1, 2, 3D
- Poços quânticos
- Pontos quânticos

## 7 Finalizando...

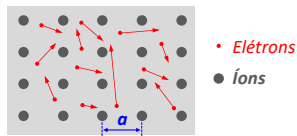




# Bandas eletrônicas

Materiais usados na indústria eletrônica: sólidos cristalinos .

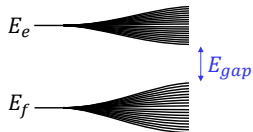
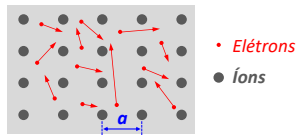
Cristal é formado minimizando a energia total, mas pensaremos nele como se juntássemos um conjunto de átomos neutros.



# Bandas eletrônicas

Materiais usados na indústria eletrônica: **sólidos cristalinos**.

Cristal é formado minimizando a energia total, mas pensaremos nele como se juntássemos um conjunto de átomos neutros.



→  
Separação atômica  
diminuindo

Átomos separados; interação pequena  $\Rightarrow$  níveis atômicos livres  
Átomos próximos; interação grande  $\Rightarrow$  níveis perturbados:

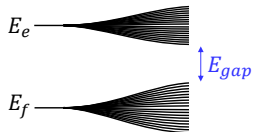
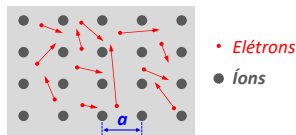
**bandas de energia**

**Energia do gap,  $E_{gap}$ :** menor diferença da energia entre última banda cheia (**valência**) e primeira banda vazia (**condução**)

# Bandas eletrônicas

Materiais usados na indústria eletrônica: **sólidos cristalinos**.

Cristal é formado minimizando a energia total, mas pensaremos nele como se juntássemos um conjunto de átomos neutros.



→  
Separação atômica  
diminuindo

Átomos separados; interação pequena  $\Rightarrow$  níveis atômicos livres  
Átomos próximos; interação grande  $\Rightarrow$  níveis perturbados:

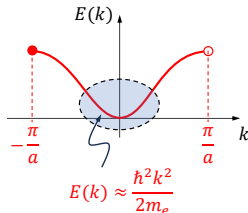
**bandas de energia**

**Energia do gap,  $E_{gap}$ :** menor diferença da energia entre última banda cheia (**valência**) e primeira banda vazia (**condução**)

**Relação de Dispersão:** energia do elétron é função de seu vetor de onda  $\mathbf{k}$ , onde  $\hbar\mathbf{k}$  é seu quasi-momentum

Vetores de onda longe da condição de Bragg são “quasi-livres” e a energia é

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z}$$



# Densidade de estados

# Densidade de estados

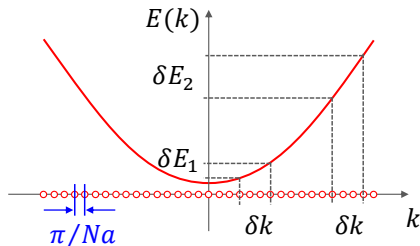
## Propriedades dos estados de uma banda:

1) Separação dos estados no espaço  $k$ :

$$\Delta k = \pi / Na;$$

2) Na figura ao lado, há o mesmo número de estados no intervalo  $\delta E_1$  que no intervalo  $\delta E_2$ .

3) **Densidade de estados** no intervalo  $\delta E_1$  é maior que no intervalo  $\delta E_2$ .



**Densidade de estados** é fundamental p/ determinar propriedades ópticas de sólidos

# Densidade de estados

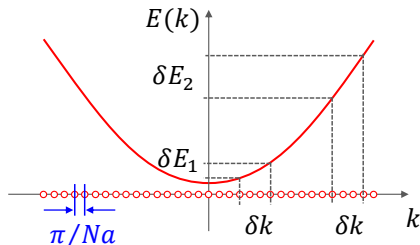
## Propriedades dos estados de uma banda:

1) Separação dos estados no espaço  $k$ :

$$\Delta k = \pi / Na;$$

2) Na figura ao lado, há o mesmo número de estados no intervalo  $\delta E_1$  que no intervalo  $\delta E_2$ .

3) **Densidade de estados** no intervalo  $\delta E_1$  é maior que no intervalo  $\delta E_2$ .



**Densidade de estados** é fundamental p/ determinar propriedades ópticas de sólidos

Concavidade da parábola é dada pelo inverso da **massa efetiva**:  $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2 m_e$

Quanto **menor a massa efetiva**, maior a concavidade e **menor a densidade de estados**.

# Transição interbanda (gap direto)

# Transição interbanda (gap direto)

**Propriedades dos estados de uma banda:**

**Condução:**  $E_c(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_c}$

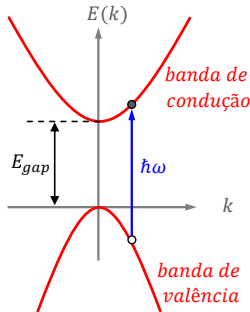
**Valência:**  $E_v(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2 m_v}$

**Ressonância:**

$$\hbar\omega = E_c(k) - E_v(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} ; \quad \frac{1}{\mu} \equiv \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v}$$

**Densidade de estados conjunta:**

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\hbar\omega - E_g} ; \quad \text{para } \hbar\omega > E_g$$





# Transição interbanda (gap direto)

**Propriedades dos estados de uma banda:**

**Condução:**  $E_c(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_c}$

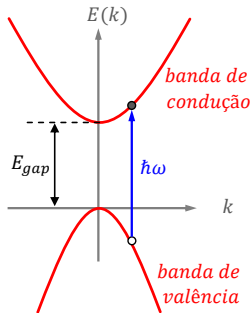
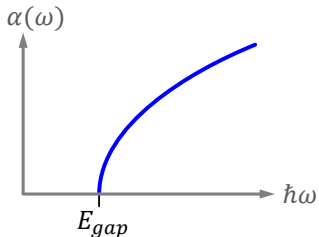
**Valência:**  $E_v(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2 m_v}$

**Ressonância:**

$$\hbar\omega = E_c(k) - E_v(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} ; \quad \frac{1}{\mu} \equiv \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v}$$

**Densidade de estados conjunta:**

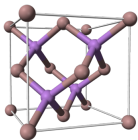
$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\hbar\omega - E_g} ; \quad \text{para } \hbar\omega > E_g$$



O coeficiente de absorção depende ainda do **momento de dipolo elétrico da transição**, isto é, da magnitude do acoplamento da luz com a matéria

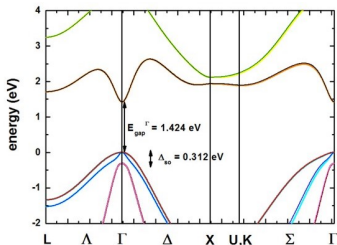
$$\mathbf{p} = \int \Psi_c^*(\mathbf{r}) (\mathbf{e}\mathbf{r}) \Psi_v(\mathbf{r}) d^3r$$

# Bandas eletrônicas - GaAs



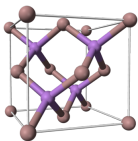
O **arseneto de gálio** (**GaAs**) é um semiconductor III-V com estrutura “*zinc-blend*”.

É um material importante em opto-eletrônica: ao contrário do **silício** (**Si**), tem **gap direto**, o que possibilita fabricar lasers de diodo operando no infravermelho.



$sp^3s^*$  parameters of Klimeck et al. **wavevector  $\mathbf{k}$**   
including spin-orbit coupling

# Bandas eletrônicas - GaAs



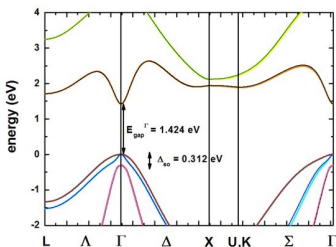
O **arseneto de gálio** (**GaAs**) é um semicondutor III-V com estrutura “*zinc-blend*”.

É um material importante em opto-eletrônica: ao contrário do **silício** (**Si**), tem **gap direto**, o que possibilita fabricar lasers de diodo operando no infravermelho.

Apresenta 3 bandas de valência (buracos leves, pesados e “*split-off*”) e uma banda de condução.

Gálio ↔ Alumínio (**Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As**):

energia do “gap”,  $E_{gap}$ , pode ser controlada.

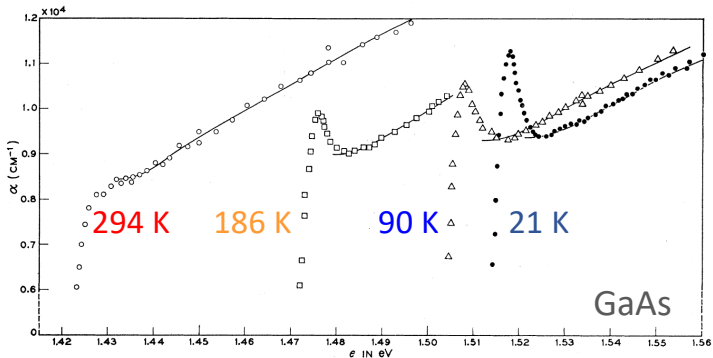


$sp^3s^*$  parameters of Klimeck et al. wavevector  $\mathbf{k}$   
including spin-orbit coupling

$$E_{gap} = 1,424 \text{ eV} \rightarrow \lambda_{gap} = 871 \text{ nm}$$

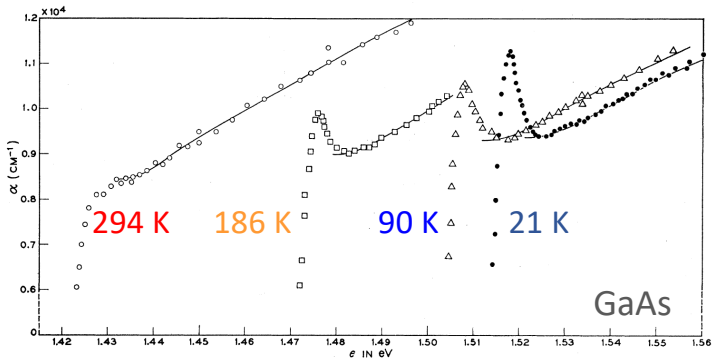
# Bandas eletrônicas - GaAs

Absorção do GaAs (**intrínseco**), como função da temperatura



# Bandas eletrônicas - GaAs

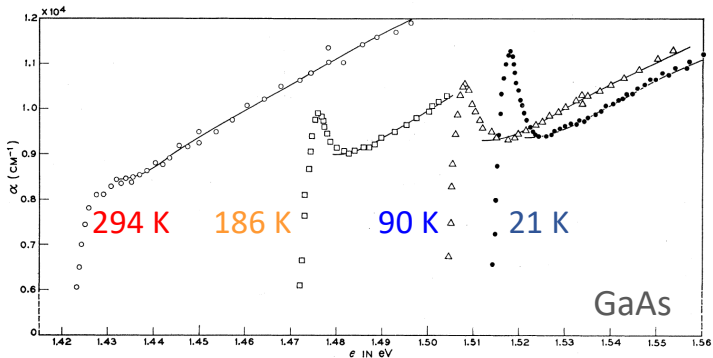
Absorção do GaAs (**intrínseco**), como função da temperatura



- Fônons “completam” a energia quando a temperatura é mais alta;

# Bandas eletrônicas - GaAs

Absorção do GaAs (**intrínseco**), como função da temperatura



- Fônons “completam” a energia quando a temperatura é mais alta;
- Picos de absorção de **excitons**, presentes em temperaturas mais baixas.

# Propriedades ópticas de sólidos

## 1 Introdução

## 2 Propagação clássica de ondas eletromagnéticas

- Equações de Maxwell
- Processos ópticas
- Oscilador de Lorentz
- Susceptibilidade e índice de refração complexos
- Relações de Kramers-Kronig

## 3 Elétrons livres: modelo de Lorentz-Drude

- Refletividade de plasmas

## 4 Semicondutores: transições interbanda

- Bandas eletrônicas
- Densidade de estados
- Transições interbanda (gap direto)

## 5 **Éxcitons**

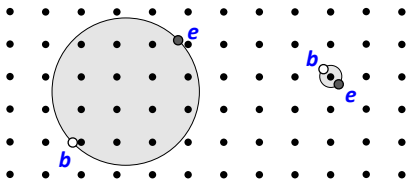
- **Éxcitons livres**

## 6 Confinamento quântico

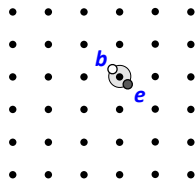
- Estruturas com confinamento quântico 1, 2, 3D
- Poços quânticos
- Pontos quânticos

## 7 Finalizando...

# Éxcitons



Éxcitons "livres"  
Wannier-Mott



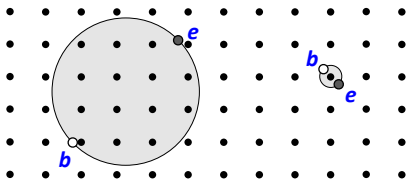
Éxcitons "ligados"  
(Frenkel)

- Um par "**elétron-buraco**" pode formar um estado ligado, como um átomo de hidrogênio (com um próton de massa muito pequena).
- Em temperatura ambiente, a energia de ligação é pequena comparada à energia térmica, e o éxciton é **ionizado**.

Em geral, somente é observado em **baixas temperaturas** e com **amostras muito puras**.



# Éxcitons



Éxcitons “livres”  
Wannier-Mott

Éxcitons “ligados”  
(Frenkel)

- Um par “**elétron-buraco**” pode formar um estado ligado, como um átomo de hidrogênio (com um próton de massa muito pequena).

- Em temperatura ambiente, a energia de ligação é pequena comparada à energia térmica, e o éxciton é **ionizado**.

Em geral, somente é observado em **baixas temperaturas** e com **amostras muito puras**.

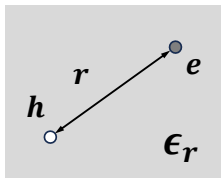
“**Átomo de hidrogênio**”

“**Raio de Bohr**”:  $a_X$  ; **Parâmetro de rede**:  $a_R$

Éxcitons livres (Wannier-Mott):  $a_X^W \gg a_R$

Éxcitons ligados (Frenkel):  $a_X^F \ll a_R$

# Éxcitons livres

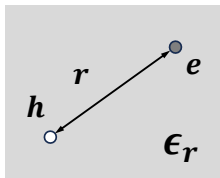


Eq. de Schroedinger; par elétron-buraco:

$$H\psi_X = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu} \psi_X - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r r} \psi_X = E_X \psi$$

$$a_X = \frac{4\pi\epsilon_r \hbar^2}{\mu e^2} \quad ; \quad E_{X,n} = -\frac{1}{n^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r a_X}$$

# Éxcitons livres



Eq. de Schroedinger; par elétron-buraco:

$$H\psi_X = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu} \psi_X - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r r} \psi_X = E_X \psi$$

$$a_X = \frac{4\pi\epsilon_r \hbar^2}{\mu e^2} \quad ; \quad E_{X,n} = -\frac{1}{n^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r a_X}$$

## Éxcitons em GaAs

Massa do elétron

$$m_e^* = 0.067 m_e$$

Massa do buraco:

$$m_b^* = 0.2 m_e$$

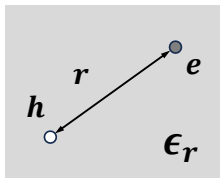
Constante dielétrica

$$\epsilon_r = 12.8$$

Energia térmica (298 K)

$$k_B T = 25.7 \text{ eV}$$

# Éxcitons livres



Eq. de Schroedinger; par elétron-buraco:

$$H\psi_X = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu} \psi_X - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r r} \psi_X = E_X \psi$$

$$a_X = \frac{4\pi\epsilon_r \hbar^2}{\mu e^2} \quad ; \quad E_{X,n} = -\frac{1}{n^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r a_X}$$

## Éxcitons em GaAs

Massa do elétron

$$m_e^* = 0.067 m_e$$

Massa do buraco:

$$m_b^* = 0.2 m_e$$

Constante dielétrica

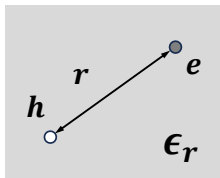
$$\epsilon_r = 12.8$$

Energia térmica (298 K)

$$k_B T = 25.7 \text{ eV}$$

Hidrogênio	$a_H$	0.053 nm
Exciton	$a_X$	13 nm
Hidrogênio	$E_H$	-13.6 eV
Exciton	$E_{X,1}$	-4.2 eV

# Éxcitons livres



Eq. de Schroedinger; par elétron-buraco:

$$H\psi_X = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2\mu} \psi_X - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r r} \psi_X = E_X \psi$$

$$a_X = \frac{4\pi\epsilon_r \hbar^2}{\mu e^2} \quad ; \quad E_{X,n} = -\frac{1}{n^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_r a_X}$$

## Éxcitons em GaAs

Massa do elétron

$$m_e^* = 0.067 m_e$$

Massa do buraco:

$$m_b^* = 0.2 m_e$$

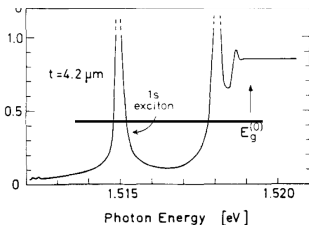
Constante dielétrica

$$\epsilon_r = 12.8$$

Energia térmica (298 K)

$$k_B T = 25.7 \text{ eV}$$

Hidrogênio	$a_H$	0.053 nm
Exciton	$a_X$	13 nm
Hidrogênio	$E_H$	-13.6 eV
Exciton	$E_{X,1}$	-4.2 eV



Espectro de absorção de GaAs muito puro, para  $T = 1.2 \text{ K}$ .

Os 3 primeiros estados excitônicos ligados,  $n = 1, 2, 3$  podem ser vistos, indicando a qualidade da amostra.

# Propriedades ópticas de sólidos

## 1 Introdução

## 2 Propagação clássica de ondas eletromagnéticas

- Equações de Maxwell
- Processos ópticas
- Oscilador de Lorentz
- Susceptibilidade e índice de refração complexos
- Relações de Kramers-Kronig

## 3 Elétrons livres: modelo de Lorentz-Drude

- Refletividade de plasmas

## 4 Semicondutores: transições interbanda

- Bandas eletrônicas
- Densidade de estados
- Transições interbanda (gap direto)

## 5 Éxcitons

- Éxcitons livres

## 6 Confinamento quântico

- Estruturas com confinamento quântico 1, 2, 3D
- Poços quânticos
- Pontos quânticos

## 7 Finalizando...

# Confinamento quântico

Aqui tratamos de sistemas físicos em que efeitos quânticos fundamentais podem ser controlados externamente, através do confinamento de elétrons e buracos em regiões espaciais que são da ordem do comprimento de onda de **de Broglie**.

Estes efeitos são intrínsecamente **quânticos** e estão presentes nos lasers de semicondutores e algumas telas **OLED** (*Organic Light Emitting Device*).

# Confinamento quântico

Aqui tratamos de sistemas físicos em que efeitos quânticos fundamentais podem ser controlados externamente, através do confinamento de elétrons e buracos em regiões espaciais que são da ordem do comprimento de onda de **de Broglie**.

Estes efeitos são intrinsecamente **quânticos** e estão presentes nos lasers de semicondutores e algumas telas **OLED** (*Organic Light Emitting Device*).

Um exemplo de **confinamento quântico**: **poço de potencial infinito em 1D**

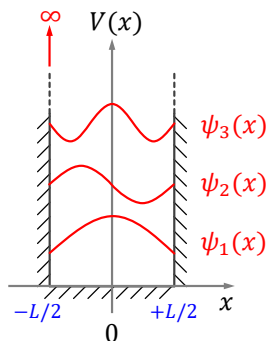
## Auto-estados e auto-energias

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen}(k_n x) & ; p/ n \text{ par} \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{cos}(k_n x) & ; p/ n \text{ ímpar} \end{cases}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad ; \quad k_n = \frac{n\pi}{L}$$

Dimensões típicas:  **$L \approx 10 \text{ nm}$** .

(comparar com  $a_x \approx 13 \text{ nm}$ )





# Estruturas com confinamento quântico 1, 2, 3D

# Estruturas com confinamento quântico 1, 2, 3D

Existem várias formas de realizar o confinamento quântico, conforme ilustrado ao lado. Todas estas estruturas já foram realizadas de alguma forma ou de outra. A maioria absoluta envolve **materiais semicondutores**.

# Estruturas com confinamento quântico 1, 2, 3D

Existem várias formas de realizar o confinamento quântico, conforme ilustrado ao lado. Todas estas estruturas já foram realizadas de alguma forma ou de outra. A maioria absoluta envolve **materiais semicondutores**.

Os métodos de fabricação envolvem desde técnicas consagradas de crescimento de semicondutores, como MOCVD, até técnicas químicas, pelas quais **M. Bawendi, L. Brus e A. Ekimov** dividiram o **Nobel de Química de 2023**, por sua contribuição para o entendimento e fabricação de **pontos quânticos semicondutores**.



*"bulk"*



*poço quântico*



*fio quântico*



*ponto quântico*

# Estruturas com confinamento quântico 1, 2, 3D

Existem várias formas de realizar o confinamento quântico, conforme ilustrado ao lado. Todas estas estruturas já foram realizadas de alguma forma ou de outra. A maioria absoluta envolve **materiais semicondutores**.

Os métodos de fabricação envolvem desde técnicas consagradas de crescimento de semicondutores, como MOCVD, até técnicas químicas, pelas quais **M. Bawendi, L. Brus e A. Ekimov** dividiram o **Nobel de Química de 2023**, por sua contribuição para o entendimento e fabricação de **pontos quânticos semicondutores**.



*"bulk"*



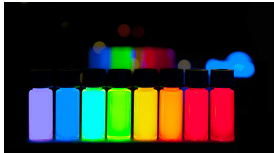
*poço quântico*



*fio quântico*



*ponto quântico*

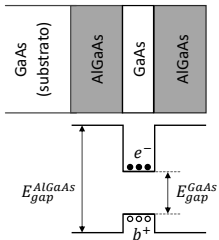


Pontos quânticos baseados no **CdSe** com o espectro de emissão "*sintonizado*" pelo tamanho das partículas.

Métodos de fabricação atuais permitem produzir kg de material!

# Poços quânticos

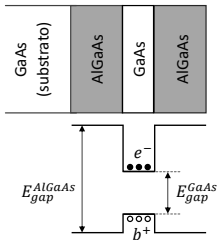
# Poços quânticos



1as hetero-estruturas explorando efeitos de confinamento quântico em dispositivos opto-eletrônicos: **poços quânticos**, meio de ganho em lasers de GaAs, operando à temperatura ambiente.

**Prêmio Nobel de 2000 para Z. Alferov and H. Kroemer.**

# Poços quânticos



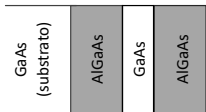
1as hetero-estruturas explorando efeitos de confinamento quântico em dispositivos opto-eletrônicos: **poços quânticos**, meio de ganho em lasers de GaAs, operando à temperatura ambiente.

**Prêmio Nobel de 2000 para Z. Alferov and H. Kroemer.**

GaAs e  $Al_xGa_{1-x}As$  estruturas cristalinas muito similares  
⇒ fração  $x$  de alumínio também permite sintonizar o dispositivo:

$$E_{gap}^{GaAs} = 1,42 \text{ eV} \quad ; \quad E_{gap}^{AlGaAs} = 2,16^* \text{ eV}$$

# Poços quânticos



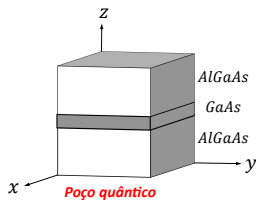
1as hetero-estruturas explorando efeitos de confinamento quântico em dispositivos opto-eletrônicos: **poços quânticos**, meio de ganho em lasers de GaAs, operando à temperatura ambiente.

**Prêmio Nobel de 2000 para Z. Alferov and H. Kroemer.**

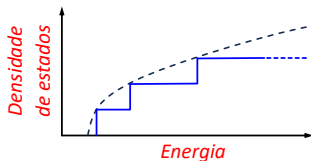
GaAs e  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  estruturas cristalinas muito similares  
 $\Rightarrow$  fração  $x$  de alumínio também permite sintonizar o dispositivo:

$$E_{\text{gap}}^{\text{GaAs}} = 1,42 \text{ eV} \quad ; \quad E_{\text{gap}}^{\text{AlGaAs}} = 2,16^* \text{ eV}$$

Confinamento apenas na direção  $\hat{z}$ , livre nas direções transversais,  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$ .



$$E(k_x, k_y, n) = \frac{\hbar^2}{2m_e} [k_x^2 + k_y^2 + k_n^2] = E_n + \frac{\hbar^2}{2m_e} k_{\parallel}^2$$





## **Comentários:**

## Comentários:

- Até o momento supomos que o poço de potencial é **infinito**, o que é um claro exagero. No poço de potencial 1D construído a partir de **GaAs/ AlGaAs**, or exemplo, a profundidade máxima do poço é da ordem da diferença dos “*gaps*” dos dois materiais:

$$\Delta V_{max} \approx E_{gap}^{AlGaAs} - E_{gap}^{GaAs} = (2.16 - 1.42) \text{ eV} = 0.74 \text{ eV}$$

## Comentários:

- Até o momento supomos que o poço de potencial é **infinito**, o que é um claro exagero. No poço de potencial 1D construído a partir de **GaAs/ AlGaAs**, or exemplo, a profundidade máxima do poço é da ordem da diferença dos “*gaps*” dos dois materiais:

$$\Delta V_{max} \approx E_{gap}^{AlGaAs} - E_{gap}^{GaAs} = (2.16 - 1.42) \text{ eV} = 0.74 \text{ eV}$$

- Não é um problema muito complicado resolver a equação de Schroedinger em potenciais com descontinuidades finitas. É possível, e já foi feito, em diversas situações de interesse, em 1, 2 e 3D. A essência do que foi discutido até o momento não muda.

## Comentários:

- Até o momento supomos que o poço de potencial é **infinito**, o que é um claro exagero. No poço de potencial 1D construído a partir de **GaAs/ AlGaAs**, or exemplo, a profundidade máxima do poço é da ordem da diferença dos “*gaps*” dos dois materiais:

$$\Delta V_{max} \approx E_{gap}^{AlGaAs} - E_{gap}^{GaAs} = (2.16 - 1.42) \text{ eV} = 0.74 \text{ eV}$$

- Não é um problema muito complicado resolver a equação de Schroedinger em potenciais com descontinuidades finitas. É possível, e já foi feito, em diversas situações de interesse, em 1, 2 e 3D. A essência do que foi discutido até o momento não muda.
- No tratamento completo do problema, temos que incluir a energia potencial associada à interação coulombiana entre elétrons e buracos. Neste caso o sistema tem mais uma contribuição “confinante”.

## Comentários:

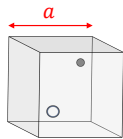
- Até o momento supomos que o poço de potencial é **infinito**, o que é um claro exagero. No poço de potencial 1D construído a partir de **GaAs/ AlGaAs**, or exemplo, a profundidade máxima do poço é da ordem da diferença dos “*gaps*” dos dois materiais:

$$\Delta V_{max} \approx E_{gap}^{AlGaAs} - E_{gap}^{GaAs} = (2.16 - 1.42) \text{ eV} = 0.74 \text{ eV}$$

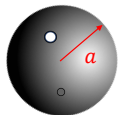
- Não é um problema muito complicado resolver a equação de Schroedinger em potenciais com descontinuidades finitas. É possível, e já foi feito, em diversas situações de interesse, em 1, 2 e 3D. A essência do que foi discutido até o momento não muda.
- No tratamento completo do problema, temos que incluir a energia potencial associada à interação coulombiana entre elétrons e buracos. Neste caso o sistema tem mais uma contribuição “confinante”.
- Há outras maneiras de confinar as cargas livres de um semiconductor. Um exemplo particularmente interessante é através da aplicação de campos magnéticos intensos. Combinando-os com heteroestruturas confinantes aumenta nossa capacidade de manipulação.

# Pontos quânticos

Pontos quânticos: confinamento 3D  $\rightarrow$  níveis discretos sintonizáveis.



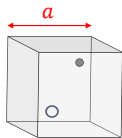
*cubo*



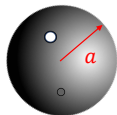
*esfera*

# Pontos quânticos

Pontos quânticos: confinamento 3D → níveis discretos sintonizáveis.



*cubo*



*esfera*

Potenciais confinantes **infinitos**:

**Cubo:**

$$E_{k,l,m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m_e a^2} [k^2 + \ell^2 + m^2]$$

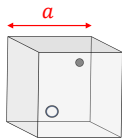
**Esfera:**

$$E_{n,\ell} = \frac{\hbar^2 k_{n,\ell}^2}{2 m_e} = z_{n,\ell}^2 \frac{\hbar^2}{2 m_e a^2}$$

$$j_\ell(z_{n,\ell}) = 0 \quad ; \quad z_{n,\ell} \equiv ka$$

# Pontos quânticos

Pontos quânticos: confinamento 3D → níveis discretos sintonizáveis.

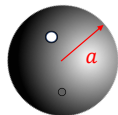


*cubo*

Potenciais confinantes **infinitos**:

**Cubo:**

$$E_{k,l,m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m_e a^2} [k^2 + l^2 + m^2]$$



*esfera*

**Esfera:**

$$E_{n,\ell} = \frac{\hbar^2 k_{n,\ell}^2}{2 m_e} = z_{n,\ell}^2 \frac{\hbar^2}{2 m_e a^2}$$

$$j_\ell(z_{n,\ell}) = 0 \quad ; \quad z_{n,\ell} \equiv ka$$

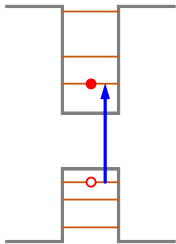


A quantum dot is a crystal that often consists of just a few thousand atoms. In terms of size, it has the same relationship to a football as a football has to the size of the Earth.

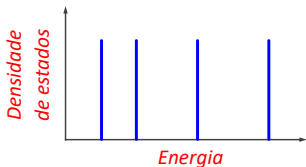


# Pontos quânticos

Propriedades ópticas de pontos quânticos:  
transições entre níveis discretos

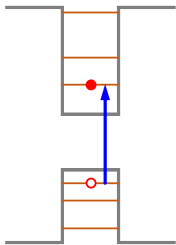


Densidade de estados - ponto quântico

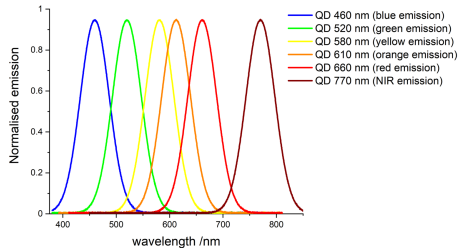
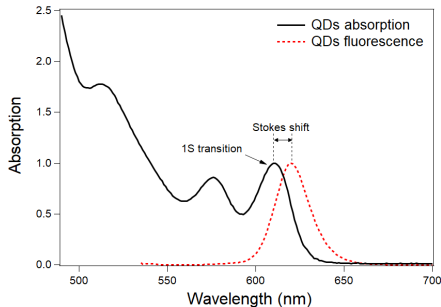
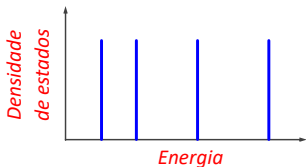


# Pontos quânticos

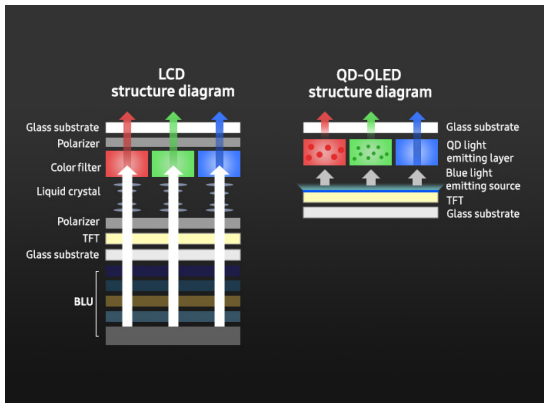
Propriedades ópticas de pontos quânticos:  
transições entre níveis discretos



Densidade de estados - ponto quântico



## OLED - “Organic Light Emitting Device”



TFT - “Thin film transistor”  $\Rightarrow$  fonte luminosa que excita QD.

# Propriedades ópticas de sólidos

## 1 Introdução

## 2 Propagação clássica de ondas eletromagnéticas

- Equações de Maxwell
- Processos ópticas
- Oscilador de Lorentz
- Susceptibilidade e índice de refração complexos
- Relações de Kramers-Kronig

## 3 Elétrons livres: modelo de Lorentz-Drude

- Refletividade de plasmas

## 4 Semicondutores: transições interbanda

- Bandas eletrônicas
- Densidade de estados
- Transições interbanda (gap direto)

## 5 Éxcitons

- Éxcitons livres

## 6 Confinamento quântico

- Estruturas com confinamento quântico 1, 2, 3D
- Poços quânticos
- Pontos quânticos

## 7 Finalizando...

Abordamos aqui algumas das propriedades ópticas da matéria condensada.

## **Eletromagnetismo e Mecânica Quântica**

Combinação produziu inúmeros desenvolvimentos científicos e tecnológicos desde o século XIX

### **Tópicos abordados**

- Processos ópticos e modelo de Lorentz;
- Elétrons livres, metais;
- Semicondutores, bandas de energia, transições interbanda, densidade de estados;
- Éxcitons
- Confinamento quântico, poços quânticos, pontos quânticos.