

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA E EXPERIMENTAL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

FILTROS ACÚSTICOS EM CRISTAIS FONÔNICOS

PAULO DANTAS SESION JÚNIOR

Orientador: **Prof. Dr. EUDENILSON LINS DE ALBUQUERQUE**

Tese de doutorado apresentada ao Departamento de Física Teórica e Experimental da Universidade Federal do Rio Grande do Norte como requisito parcial à obtenção do grau de **Doutor em FÍSICA**.

Natal, 3 de Abril de 2009

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Para Pessoas Especiais:

Meus Pais

**Paulo Dantas Sesion e
Francisca de Andrade Sesion**

Meus Irmãos

**Francisco de Andrade Sesion e
Emanuel de Andrade Sesion**

Minha Esposa

Luciana Cruz Barros Sesion

e Meu Filho

Pedro Lucas Cruz Barros Sesion.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por tudo.

A minha família.

Ao Professor Eudenilson Lins de Albuquerque pela orientação segura e competente. Sou muito grato pela confiança empenhada na minha capacidade.

Aos meus amigos, Carlos Antonio Barboza e José de Miranda Henriques Neto pela amizade sincera nos momentos difíceis.

Agradeço também aos Professores, Manoel S. Vasconcelos, Paulo Fulco, Gilvan Luiz Borba, José Alzimir, Luiz Carlos Jafelice, Luciano Rodrigues da Silva, Carlos Chesman, Janilo Santos, Francisco Alexandre, José Wilson, Rui Tertuliano, Enivaldo Bonelli, Dory Hélio, Umberto Fulco por suas contribuições à minha carreira científica.

Aos companheiros do Departamento de Física da UFRN em especial, Darlan Moreira, Ênia Paula, Samyr Jácome, Sharon Dantas, Thiago Ribeiro, Fábio Ferreira, Armando Araújo, Charlie Salvador, Francisco Carlos, Gustavo Gurgel, Hidalyn, João Maria, João Vital, Júlio César, Paulo Cavalcanti, Wivaldo Dantas, Neymar Pereira, Thatyara Freire, Tiago Pinheiro, Josenildo, Rodrigo Lira, Ricardo Sarmento, Sandro Giovani, Thiago Nobre, Igor Felipe dos Santos e Bruna Pereira e outros, por suas amizades.

Aos Funcionários do DFTE, Dona Benícia, Lindalva, Jacira, Celina, Nirvânia, Jalmir,
pelos serviços prestados.

Ao CNPq e a CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

Neste trabalho, estudamos a propagação de fônons acústicos no interior das super-redes periódicas e quasiperiódicas do tipo Fibonacci. Estas estruturas são constituídas por cristais fonônicos cuja periodicidade permite o surgimento de regiões conhecidas como “stop bands”, as quais impedem a propagação do fônons acústico na estrutura para determinados valores de frequências. Este fenômeno possibilita a construção de filtros acústicos de grande potencial tecnológico. O nosso modelo teórico baseia-se no método da matriz transferência, que descreve as propriedades de propagação dos modos normais e longitudinais no interior de uma célula unitária, relacionando-os com as propriedades da célula precedente na estrutura de multicamadas. A matriz transferência é construída levando-se em conta as condições de contorno elásticas e eletromagnéticas nas interfaces da super-rede, e corresponde às soluções das equações diferenciais acopladas (elásticas e eletromagnéticas) que descrevem cada modelo em estudo. Investigamos as propriedades piezoelétricas dos nitretos GaN e AlN, de grande importância na indústria dos dispositivos semicondutores. O cálculo das propriedades que caracterizam o sistema piezoelétrico, depende fortemente das simetrias cúbicas (zinc-bend) e hexagonal (wurtzite), descritas pela forma dos tensores elásticos e piezoelétricos. Uma abordagem dos sistemas líquidos Hg (mercúrio), Ga (gálio) e Ar (argônio) nas condições estáticas é feita, usando-se a teoria clássica da elasticidade, juntamente com a equação de Euler da mecânica dos fluidos no interior das interfaces sólido/líquido e líquido/líquido. Vários resultados são obtidos e discutidos, com ênfase novamente nos filtros acústicos obtidos a partir destas estruturas.

Abstract

In this work, we have studied the acoustic phonon wave propagation within the periodic and quasiperiodic superlattices of Fibonacci type. These structures are formed by phononic crystals, whose periodicity allows the raise of regions known as stop bands, which prevent the phonon propagation throughout the structure for specific frequency values. This phenomenon allows the construction of acoustic filters with great technological potential. Our theoretical model were based on the method of the transfer matrix, thery acoustics phonons which describes the propagation of the transverse and longitudinal modes within a unit cell, linking them with the precedent cell in the multilayer structure. The transfer matrix is built taking into account the elastic and electromagnetic boundary conditions in the superllattice interfaces, and it is related to the coupled differential equation solutions (elastic and electromagnetic) that describe each model under consideration. We investigated the piezoelectric properties of GaN and AlN the nitride semiconductors, whose properties are important to applications in the semiconductor device industry. The calculations that characterize the piezoelectric system, depend strongly on the cubic (zinc-bend) and hexagonal (wurtzite) crystal symmetries, that are described the elastic and piezoelectric tensors. The investigation of the liquid Hg (mercury), Ga (gallium) and Ar (argon) systems in static conditions also using the classical theory of elasticity. Together with the Euler's equation of fluid mechanics they one solved to the solid/liquid and the liquid/liquid interfaces to obtain and discuss several interesting physical results. In particular, the acoustical filters obtained from these structures are again presented and their features discussed.

Sumário

Agradecimentos	2
Resumo	4
Abstract	5
1 Introdução	9
2 Fônons	14
2.1 Introdução	14
2.2 Vibrações em Redes Monoatômicas	15
2.3 Rede com Dois Íons por Célula Primitiva	16
2.4 Momentum Linear dos Fônons	20
2.5 Função Dielétrica	21
2.6 Conclusão	25
3 Confinamento de Fônons Acústicos em Estruturas Piezoelétricas Fonônicas Cúbicas e Hexagonais	26
3.1 Introdução	26
3.2 Modelo Teórico para Simetria Cúbica	27
3.3 Modos de Volume	34
3.4 Modos de Superfície	35
3.5 Estrutura Quasiperiódica Tipo Fibonacci	37

3.6	Modelo Teórico para Simetria Hexagonal	39
3.7	Resultados Numéricos para as simetrias Cúbicas e Hexagonais	44
3.8	Conclusões	61
4	Estudo do Espectro de Transmitância em Super-	
	redes Fonônicas do tipo AlN/GaN	63
4.1	Introdução	63
4.2	Modelo Teórico para Simetria Hexagonal e Cúbica	66
4.3	Cálculo da Matriz Transferência para o modelo Hexagonal e Cúbico	71
4.4	Espectro de Transmissão do Fônon	77
4.5	Resultados Numéricos	79
4.6	Conclusões.	87
5	Propagação de Ondas Acústicas em Estruturas	
	Fonônicas do Tipo Sólido/Líquido.	89
5.1	Introdução.	89
5.2	Modelo Teórico para o Sistema Sólido com Simetria Cúbica. . .	92
5.3	Modelo Teórico para o Sistema Líquido.	95
5.4	Matriz Transferência para o Modelo.	96
5.5	Resultados Numéricos.	100
5.6	Conclusões.	107
6	Propagação de Ondas Acústicas em Estruturas	
	Fonônicas do Tipo Líquido/Líquido.	108
6.1	Introdução.	108
6.2	Modelo Teórico para o Sistema Líquido.	110
6.3	Matriz Transferência.	113
6.4	Resultados Numéricos.	117

6.5	Conclusões.	128
7	Conclusões e Perspectivas	130
A	Artigos Publicados Nesta Tese	135

CAPÍTULO 1

Introdução

Por volta de 1970, Esaki e Tsu [1] propuseram, pela primeira vez, um sistema formado por multi-camadas compostas por dois (ou mais) materiais diferentes (semicondutores ou outros materiais), construídos de forma periódica. Tais estruturas foram chamadas de *super-redes*. Desde então o interesse pela investigação de suas propriedades físicas tem aumentado consideravelmente, devido as suas inúmeras aplicações na área tecnológica.

Por outro lado nos últimos anos, devido aos avanços na fabricação de dispositivos eletrônicos, foi observado um grande interesse nos nitretos [2] devido ao seu grande potencial tecnológico [3]. Isto se deve principalmente porque os nitretos possuem bandas de energia com *gap* largo o suficiente para a fabricação de *lasers* de semicondutores com comprimentos de onda no azul e no ultra-violeta, bem como na produção de dispositivos eletrônicos capazes de trabalhar em condições de altas temperaturas. Esses nitretos ocorrem tanto em estruturas cúbicas tipo *zinc-blende* quanto em hexagonais tipo *wurtzite* [4, 5] (ver Fig. 1.1). A estrutura *wurtzite* possui uma ligação tetraédrica e pode ser gerada, a partir da estrutura *zinc-blende*, através de uma rotação de 60° nos eixos comuns entre elas [6].

Sabemos que é do conhecimento geral que a energia de vibração dos átomos numa rede cristalina é quantizada, e o quantum dessa vibração é chamado de fônon. Fônon, cuja denominação vem da analogia com o nome fóton (quantum da radiação eletromagnética), é o quantum do deslocamento iônico do campo eletromagnético que, para certas frequências, descreve o movimento dos átomos numa estrutura cristalina [7]. Os fônons podem ser observados por meio de uma experiência bem simples: considere um nêutron que incide

sob um cristal com dois ou mais átomos por célula primitiva. Essa interação fará com que o nêutron perca ou (ganhe) energia em forma de emissão ou (absorção) de fônons. Eles podem ser de dois tipos: fônons ópticos e fônons acústicos, sendo o segundo de fundamental importância em nosso trabalho devido ao fato deles possuírem vetores de onda incomparáveis aos da luz (não acoplando-se facilmente com esta).

Estas excitações coletivas possuem propriedades distintas em estruturas artificiais tipo super-rede, ou seja, considerando uma estrutura periódica formada por dois materiais diferentes. A excitação de um fônon na primeira camada do sistema produz campos elásticos que se propagam através das interfaces das camadas. Estes campos podem se acoplar com excitações das outras camadas produzindo assim excitações coletivas em toda a estrutura. Esses modos são caracterizados pelo vetor de onda de Bloch [8, 9] que se propaga na direção normal às interfaces, dando origem aos chamados *modos de volume*. Se considerarmos uma estrutura finita ou semi-infinita quebramos a simetria translacional do sistema, e isso faz com que apareçam os chamados *modos de superfície*.

Alguns cristais, quando submetidos a um gradiente de força por unidade de área (“stress”), geram correntes elétricas (devido a polarização). Esse fenômeno é denominado *piezoelectricidade* e permite a transformação da energia mecânica das ondas sonoras (no caso da utilização de tecnologia ultra-som) em energia elétrica (o funcionamento de alguns tipos de microfones se baseia neste efeito). Assim, quando atingidos pela pressão (“stress”) exercida por ultra-sons, esses cristais geram pequenas correntes elétricas, que, interpretadas por dispositivos eletrônicos, se transformam em imagens na tela de um monitor. Esse é o princípio da ultra-sonografia. Um feixe de ultra-sons, de frequência de cerca de MHz, propaga-se pelo corpo humano e reflete-se nos órgãos internos. O som refletido é interpretado eletronicamente, formando imagens passíveis de interpretação [10]

A propagação de ondas acústicas em materiais compostos periódicos e quasiperiódicos conhecidos como cristais fonônicos tem sido um tema de considerável interesse nos últimos anos[11, 12, 13, 14]. Devido a periodicidade da estrutura, podem surgir regiões de frequências (“stop bands”) em que a onda acústica não pode propagar-se. Estes cristais fonônicos (o material não precisa ser um cristal) são os análogos elásticos dos cristais fotônicos para a interação da luz com os pares elétron-buraco no interior do cristal fotônico. A origem do interesse pelos cristais fonônicos vem da física dos sistemas acústicos, em

que tanto a densidade e velocidade afetam a dispersão e a propagação das ondas na estrutura. Uma potencial aplicação dos cristais fonônicos é o controle dos ruídos sonoros com a construção de filtros para ondas acústicas. Vários trabalhos e experimentos envolvendo estruturas fonônicas dos tipos piezoelétricas [15], sólido-líquido [16, 17, 18] e líquido-líquido [19] foram feitos na literatura.

Neste trabalho estudamos o comportamento dos fônons acústicos no interior das super-redes fonônicas periódicas e quasiperiódicas de Fibonacci [20]. Consideramos as soluções de campo acoplado, usadas na construção da matriz transferência via condições de contorno elásticas e eletromagnéticas (no caso dos sistemas piezoelétricos). Este trabalho divide-se nos seguintes capítulos:

No capítulo 2, descrevemos de maneira sucinta a teoria do fônem tanto ótico como acústico dando uma descrição de sua teoria através do uso de sistemas simples envolvendo cadeias monoatômica e diatômicas de átomos, conduzindo aos cálculos das expressões para a relação de dispersão em cada caso. Também será discutido o fato de tais entidades (fônons) possuírem momentum linear associado a sua propagação nas estruturas, gerando regras de seleção para o caso da interação com cristais (espalhamento inelástico) dando origem a uma resposta contida inteiramente na função dielétrica.

No capítulo 3 [21], vamos estudar o confinamento dos fônons acústicos em semicondutores fonônicos da família dos nitretos, considerando suas estruturas cristalinas “*zinc-blend*” (cúbica) e “*wurtzite*” (hexagonal). Levamos em conta efeitos de “*strain-stress*” nos fônons acústicos, aqui caracterizados pela indução do acoplamento campo eletromagnético-campo elétrico via as componentes do tensor piezoelétrico de terceira ordem e_{ijk} .

Vamos considerar também dois tipos de estruturas: inicialmente consideraremos a super-rede periódica formada a partir de dois blocos de construção α e β , onde cada bloco é constituído por materiais diferentes A e B , sendo que um deles exibe propriedades piezoelétricas (material B), o outro (material A) sendo um isolante. Posteriormente iremos considerar um arranjo quasiperiódico dos blocos de construção α e β , segundo a seqüência constitucional de Fibonacci.

No capítulo 4 [22], investigaremos o espectro de transmissão do fônon acústico em estruturas de multicamadas compostas pela família III-V dos nitretos semicondutores AlN/GaN, onde o arranjo das camadas é feito de forma periódica e quasiperiódica de acordo com a seqüência de Fibonacci. Os nitretos III-V, como o GaN e AlN, exibem influentes campos de polarização piezoelétricos sob condições de stress e são de importância óbvia no estudo de diversos dispositivos piezoelétricos baseados nos nitretos e em estruturas de multicamadas. Em particular, o conhecimento destas propriedades nos permite compreender o tratamento da polarização e dos campos elétricos resultantes de stress nas super-redes compostas por nitretos. Estes podem cristalizar-se em duas estruturas cristalinas: hexagonal wurtzite ou cúbica zinc-blend

No capítulo 5 [23], descrevemos o espectro de transmissão para os fônons acústicos propagando-se em uma estrutura fonônica quasiperiódica de Fibonacci composta pelo sólido cristalino (cristal de quartzo) e o líquido Ar. A dinâmica dos fônons é descrita pelas equações diferenciais acopladas dentro do modelo de aproximação do campo estático, cujas soluções para os deslocamentos elásticos são obtidas e usadas na construção da matriz transferências que simplifica bastante os cálculos analíticos.

No capítulo 6 [24], resolvemos a equação de Euler da fluido-dinâmica no volume da célula unitária líquida composta dos materiais metálicos Hg e Ga (na temperatura ambiente) que compõe a nossa super-rede periódica e quasiperiódica de Fibonacci. Como foi descrito nos capítulos anteriores desenvolveremos os cálculos analíticos com o objetivo de obter a matriz transferência (neste caso 2×2) calculada com o auxílio das condições de fronteiras elásticas nas interfaces da nossa super-rede. Esta matriz relaciona as amplitudes dos campos elásticos presentes no meio líquido (Hg) com aqueles presentes no meio líquido (Ga), toda a informação elástica que se propaga através da super-rede é descrita por tal matriz

As nossas principais conclusões e perspectivas para futuros trabalhos estão no Capítulo 7.

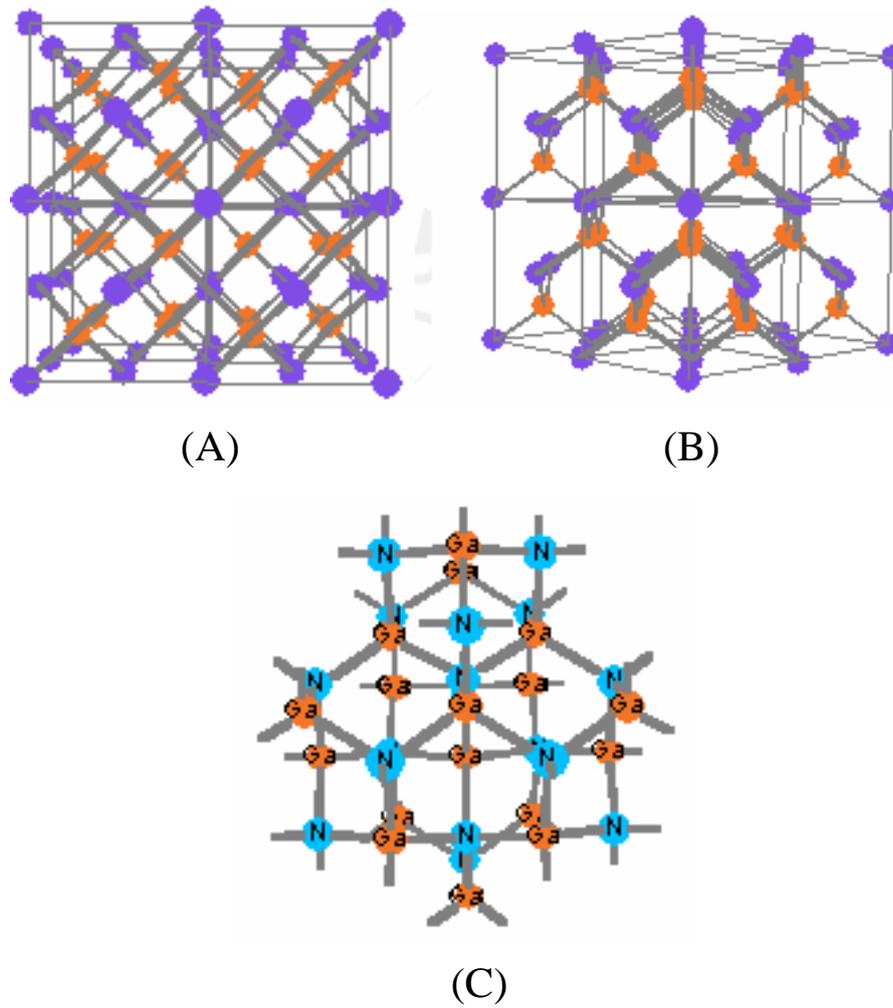


Figura 1.1: As estruturas cristalinas tipo *zinc-blende* e *wurtzite*. Em (A) temos a estrutura *zinc-blende*, em (B) temos a estrutura (A) girada de 60° e em (C) mostramos a estrutura *wurtzite*.

CAPÍTULO 2

Fônons

2.1 Introdução

Neste capítulo, apresentaremos considerações básicas e gerais sobre a teoria dos fônons bem como considerações teóricas sobre seu espalhamento que servirá de base conceitual para o andamento desta tese. Também discutiremos o conceito de função dielétrica que será amplamente utilizada nos cálculos dos próximos dois capítulos.

O espalhamento de ondas eletromagnéticas pela matéria é um assunto amplo, extensivamente descrito em livros textos e artigos científicos. Fundamentalmente, diversos processos de interação entre o campo eletromagnético e a matéria dão origem ao espalhamento devido às vibrações de rede em um sólido (fônons), caracterizado experimentalmente pelo espalhamento de luz tipo Raman e Brillouin [26]. O primeiro refere-se à interação da luz com fônons ópticos, e o segundo com fônons acústicos que serão descritos logo a seguir. A importância destes fenômenos ultrapassa os limites da ciência fundamental, sendo também amplamente aplicado em diversas áreas tecnológicas.

O espalhamento Brillouin também tem diversas aplicações práticas. Dispositivos como chaves e moduladores acusto-ópticos, lasers Brillouin e sensores de temperatura e pressão são alguns exemplos tecnológicos baseados neste efeito [27, 28, 29]. Os espalhamentos Raman e Brillouin são processos de espalhamento inelásticos, ou seja, a energia (ou a frequência) do fóton espalhado (Stokes ou anti-Stokes) é diferente da energia do fóton incidente. Esta diferença é, por conservação, exatamente igual à energia do fônon criado ou absorvido. A conservação de momentum linear também é necessária para o processo

ocorrer como será descrito a seguir.

2.2 Vibrações em Redes Monoatômicas

De uma maneira geral definimos o fônon como sendo o quantum de energia associado com a vibração da rede cristalina. Para exemplificar este conceito, consideraremos um conjunto de N íons idênticos, todos de massa m , distribuídos ao longo de uma rede unidimensional monoatômica, cujo vetor translação assume a forma $\vec{R} = na\hat{z}$, com n assumindo valores inteiros e a denotando a distância entre dois íons adjacentes. O movimento vibracional aqui está confinado ao longo da direção- z (ver Fig. 2.1). Assumimos u_n como sendo o deslocamento dos íons oscilantes em torno da posição de equilíbrio $z = na$ ao longo da cadeia linear. O número N é tomado como sendo suficientemente grande de tal forma que os efeitos de borda serão ignorados (i.e. a cadeia é efetivamente infinita). Assumindo que só os íons mais próximos interagem, a equação de movimento de Newton tem a seguinte forma [25]:

$$m d^2 u_n / dt^2 = C[(u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1})], \quad (2.1)$$

onde C é a constante de força elástica entre os íons (esta, depende do fato da onda gerada na cadeia linear ser longitudinal ou transversal).

Considerando agora somente os modos normais de propagação (com frequência angular ω) em uma cadeia, podemos encontrar as soluções para u_n que podem ser representadas em termos de ondas planas :

$$u_n = u \exp[i(kna - \omega t)], \quad (2.2)$$

de acordo com o teorema de Bloch unidimensional [30, 31]. Substituindo (2.2) em (2.1) encontraremos:

$$\omega^2 = (2C/m)(1 - \cos ka) = (4C/m) \sin^2(ka/2), \quad (2.3)$$

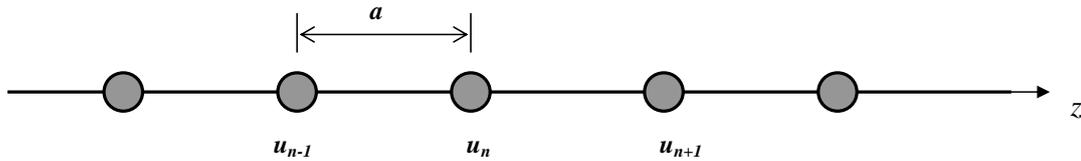


Figura 2.1: Cadeia linear monoatômica formada por N íons de massa m separados por uma distância a .

A Fig. 2.2 ilustra este espectro aqui representado pela frequência reduzida $\Omega = \omega/(4C/m)^{1/2}$ contra o vetor de onda ka .

De (2.2), a razão entre dois deslocamentos sucessivos é dado por:

$$\frac{u_{n+1}}{u_n} = \exp(ika). \quad (2.4)$$

Os valores de ka fisicamente significantes para ondas elásticas são aqueles que se encontram na primeira zona de Brillouin, pois o intervalo $-\pi \leq ka \leq \pi$, que a define na rede linear, cobre todos os valores fisicamente possíveis para o vetor de onda ka [32]. Neste caso não há necessidade de atribuir a dois íons uma diferença de fase maior que π . Perceba que os valores de ka fora da primeira zona reproduzem os movimentos da rede descritos pelos valores dentro dos limites $ka = \pm\pi$. Note também que quando ka tende a zero, ω é proporcional a $|k|$, e a velocidade de grupo definida como $d\omega/dk$, tende a zero nas fronteiras da primeira zona de Brillouin ($ka = \pm\pi$).

2.3 Rede com Dois Íons por Célula Primitiva

Consideramos agora uma rede unidimensional com dois tipos de íons alternados com massas m_1 e m_2 por célula primitiva, caracterizando a cadeia diatômica descrita na Fig. 2.3. Ela tem $2N$ íons (N para cada tipo de massa), e para todos os pares de íons assumimos a mesma constante de força elástica C . A equação de movimento é levemente diferente quando comparada ao caso anterior para cada tipo de íon, ou seja:

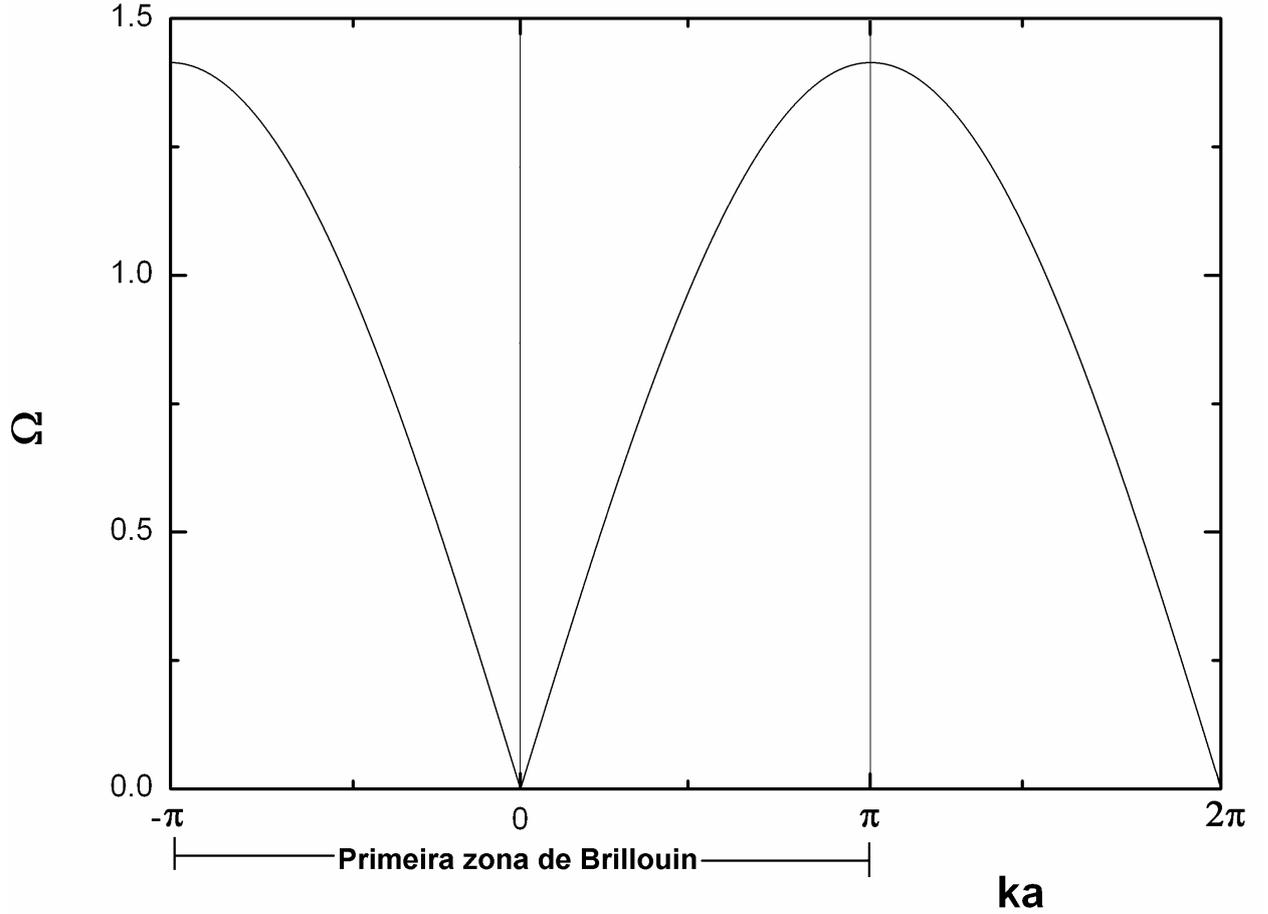


Figura 2.2: Relação de dispersão para fônons na primeira zona de Brillouin considerando uma cadeia linear monoatômica.

$$m_1 d^2 u_n / dt^2 = C[(v_n - u_n) - (u_n - v_{n-1})], \quad (2.5)$$

$$m_2 d^2 v_n / dt^2 = C[(u_{n+1} - v_n) - (v_n - u_n)]. \quad (2.6)$$

A simetria de cada par de íons tem um modo normal representado por uma onda plana similar a da Eq. (2.2), mas com diferentes amplitudes u e v para ambos os íons. Deste modo as Eqs. (2.5) e (2.6) assumem a forma:

$$-\omega^2 m_1 u = Cv[1 + \exp(-ika)] - 2Cu, \quad (2.7)$$

$$-\omega^2 m_2 v = Cu[1 + \exp(ika)] - 2Cv. \quad (2.8)$$

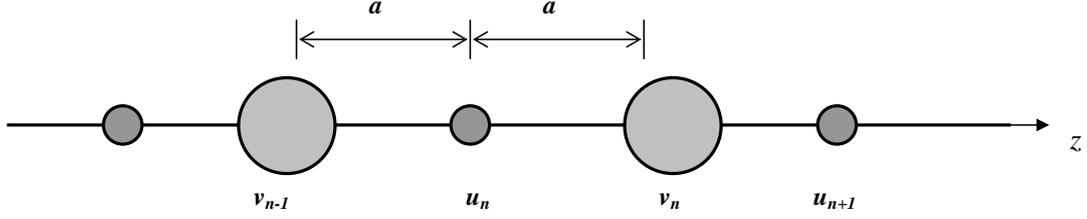


Figura 2.3: Cadeia linear diatômica formada por $2N$ íons com massas m_1 e m_2 separadas pela distância a .

Este par de equações para as amplitudes possui soluções encontradas igualando-se a zero o determinante secular. Este determinante nos fornece a seguinte equação para ω :

$$\omega^2 = C(m_1^{-1} + m_2^{-1}) \pm C[(m_1^{-1} + m_2^{-1})^2 - 4 \sin^2(ka/2)/m_1 m_2]^{1/2}. \quad (2.9)$$

A razão entre as amplitudes u e v é dada por:

$$\frac{u}{v} = \frac{2C \cos(ka)}{2C - m_1 \omega^2} = \frac{2C - m_2 \omega^2}{2C \cos(ka)}. \quad (2.10)$$

É fácil ver que quando $ka = \pm\pi$ (fronteiras da zona de Brillouin), as soluções para ω^2 na Eq.(2.9) são $2C/m_1$ e $2C/m_2$. Além disso, quando $ka \rightarrow 0$ (término da zona central de Brillouin), as duas soluções são aproximadamente:

$$\omega^2 = 2C(m_1^{-1} + m_2^{-1}), \quad (2.11)$$

$$\omega^2 = [2C/(m_1 + m_2)]k^2 a^2. \quad (2.12)$$

Para cada valor de ka temos duas soluções separadas, surgindo assim dois ramos. Estes ramos que aparecem na relação de dispersão são ilustrados na Fig 2.4. O ramo inferior tem a mesma forma qualitativa que o único ramo encontrado no caso anterior (a rede monoatômica unidimensional). O ramo inferior é conhecido como *ramo acústico* devido ao fato da relação de dispersão apresentar para pequenos valores de ka a forma $\omega = vk$, que é característica das ondas sonoras.

O ramo superior é conhecido como *ramo óptico* devido ao fato do longo comprimento de onda transversal do modo óptico nos cristais iônicos poder interagir com a radiação eletromagnética.

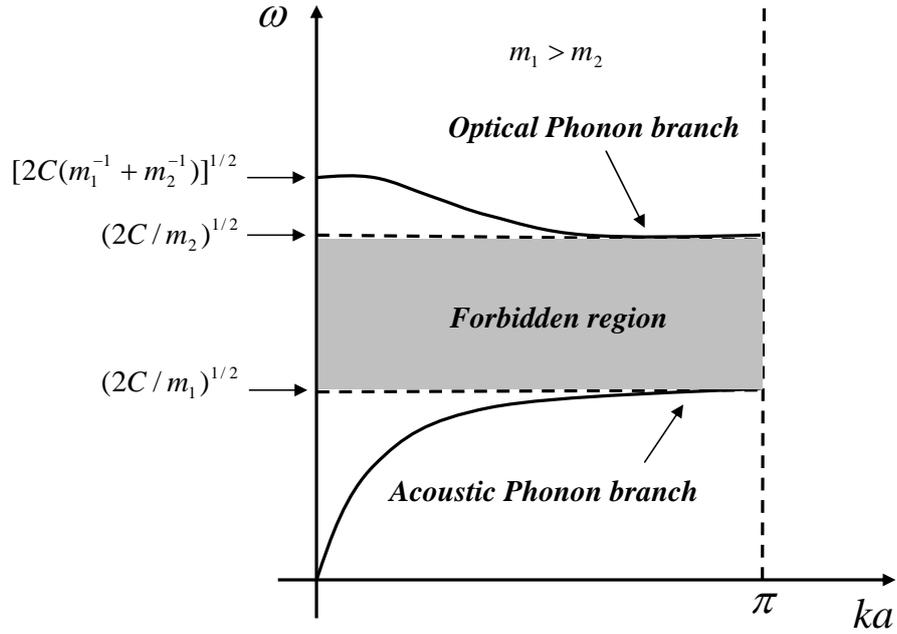


Figura 2.4: Fônons ópticos e acústicos na primeira zona de Brillouin para uma cadeia diatômica linear.

A classificação dos modos de vibração em *ramos acústico* e *óptico* pode ser estendido a um sólido em três dimensões com uma base poliatômica. Para um cristal com p átomos em cada célula primitiva, ocorrerão $3p$ ramos na relação de dispersão: 3 ramos acústicos e $3(p - 1)$ ramos ópticos. O número de ramos é função da quantidade de graus de liberdade dos átomos. Considerando N células primitivas e p átomos por célula primitiva, existirão pN átomos no sistema. Cada átomo possui três graus de liberdade, um para cada direção x , y , z , totalizando $3pN$ graus de liberdade para o cristal (desconsiderando-se rotações). O número de valores de k permitidos num único ramo é, portanto, N para uma zona de Brillouin. Assim o ramo longitudinal acústico (LA) e os dois ramos transversais acústicos (TA) possuem um total de $3N$ modos, respondendo por $3N$ do total de graus de liberdade do sistema. Os $(3p - 3)N$ graus de liberdade restantes são acomodados pelos ramos ópticos [transversais ópticos (TO) e longitudinais ópticos (LO)].

2.4 Momentum Linear dos Fônons

A energia de vibração da rede é quantizada e um quantum desta vibração denomina-se fônon. As vibrações térmicas nos cristais produzem fônons termicamente excitados, da mesma forma que a radiação eletromagnética no interior de uma cavidade é constituída por fótons termicamente excitados no corpo negro [33].

Um fônon com um vetor de onda \vec{k} em uma rede cristalina pode interagir com partículas tais como, fótons, nêutrons e elétrons como se ele tivesse momentum linear $\hbar\vec{k}$. Entretanto, um fônon não transporta momentum linear fisicamente devido ao fato de sua coordenada envolver somente posições relativas dos átomos. Por exemplo, em uma molécula de hidrogênio a coordenada vibracional internuclear $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ é uma coordenada relativa e não deve transportar momentum linear. Ao passo que a coordenada do centro de massa $\vec{r}_{CM} = (1/2)(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$ corresponde a um modo uniforme podendo assim transportar momentum linear. Para um cristal, o momentum linear físico assume a forma:

$$\vec{p} = m(d/dt) \sum \vec{u}_n. \quad (2.13)$$

Usando $\vec{u}_n = \vec{u} \exp(in\vec{k}a)$ teremos:

$$\vec{p} = m(d\vec{u}/dt) \left[\frac{1 - \exp(iN\vec{k}a)}{1 - \exp(i\vec{k}a)} \right], \quad (2.14)$$

onde usamos o seguinte resultado:

$$\sum x^s = \frac{(1 - x^N)}{(1 - x)}. \quad (2.15)$$

Podemos mostrar a partir de (2.14) que

$$\vec{p} = 0, \quad (2.16)$$

excetuando-se o caso em que $\vec{k} = 0$, para o qual $\vec{u}_n = \vec{u}$, de modo que $\vec{p} = Nm(\partial\vec{u}/\partial t)$. Este modo representa a translação uniforme de um cristal como um todo, e esta translação transporta momentum linear. De modo análogo, para muitos propósitos práticos, um fônon atua como se seu momentum linear fosse $\hbar\vec{k}$, algumas vezes denominamos de *momentum linear do cristal*. Nos cristais existem regras de seleção para os vetores de onda e

para as transições permitidas entre os estados quânticos. Por exemplo, a regra de seleção para o espalhamento elástico de um fóton de raio X por um cristal assume a forma:

$$\vec{K}' = \vec{K} + \vec{G}, \quad (2.17)$$

onde \vec{G} é um vetor da rede recíproca, \vec{K} é o vetor de onda de um fóton incidente, e \vec{K}' é o vetor de onda do fóton espalhado. Neste processo, o cristal recua como um todo com momentum linear $-\hbar\vec{G}$. Um fato importante é que momentum linear como um todo deve ser rigorosamente conservado no processo.

Se o espalhamento do fóton for inelástico, com a criação de um fônon com vetor de onda \vec{k} , a regra de seleção tornar-se:

$$\vec{K}' + \vec{k} = \vec{K} + \vec{G}. \quad (2.18)$$

Se um fônon com vetor de onda \vec{k} for absorvido no processo, a regra de seleção assume a forma:

$$\vec{K}' = \vec{K} + \vec{G} + \vec{k}. \quad (2.19)$$

A informação inerentemente contida no espalhamento está presente na função dielétrica que funciona basicamente como uma resposta à interação eletromagnética da luz com o sólido em estudo. Esta resposta, que é descrita matematicamente por um tensor será discutida em detalhes a seguir.

2.5 Função Dielétrica

A função dielétrica é a resposta de um sistema a um campo elétrico externo, e a sua interpretação possui um importante papel no estudo dos modos eletromagnéticos acoplados, tais como polaritons de fônons, plasmons e excitons [34, 35]. Para um meio com invariância translacional, a dependência na posição e no tempo da função dielétrica

é definida em termos do campo elétrico $\vec{E}(\vec{r}, t)$ e do vetor deslocamento elétrico $\vec{D}(\vec{r}, t)$ por:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \varepsilon_0 \int \varepsilon(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \vec{E}(\vec{r}', t') d^3\vec{r}' dt', \quad (2.20)$$

em que ε é função da diferença $\vec{r} - \vec{r}'$ e não de \vec{r} e \vec{r}' separadamente. A Eq. (2.20) pode ser escrita de uma maneira mais conveniente em termos da transformada de Fourier para o vetor de onda \vec{k} e frequência ω como:

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega). \quad (2.21)$$

Portanto, em geral ε é uma função do vetor de onda \vec{k} e da frequência ω . O regime de polariton corresponde a pequenos vetores de onda (ou grandes comprimentos de onda), devido essencialmente ao fato de que, o fóton e a excitação cristalina possuem energias comparáveis (como necessário para a formação do modo acoplado) somente para pequenos valores de $|\vec{k}|$, por causa da grande velocidade de fase da luz. Este regime eletromagnético é descrito pelas equações de Maxwell [36] com *retardamento* (tipicamente com $|\vec{k}| \leq 10^3 m^{-1}$). Neste caso, a dependência da função dielétrica ε sobre o vetor de onda \vec{k} (denominada dependência espacial) pode ser usualmente desprezada. Assim podemos trocar $\varepsilon(\vec{k}, \omega)$ por $\varepsilon(0, \omega)$, assumindo a forma simples $\varepsilon(\omega)$. Além disso, nos casos de anisotropia onde os vetores \vec{D} e \vec{E} não têm a mesma direção, $\varepsilon(\omega)$ é descrita por um tensor (ou matriz) em vez de um escalar. Em particular, para um material uniaxial, ela tem a seguinte forma:

$$\bar{\varepsilon}(\omega) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx}(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{xx}(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz}(\omega) \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

em termos dos eixos principais. As funções $\varepsilon_{xx}(\omega)$ e $\varepsilon_{zz}(\omega)$ descrevem, respectivamente a resposta dielétrica para um campo elétrico transversal e longitudinal ao eixo z , respectivamente.

Determinaremos agora a função dielétrica para um cristal iônico [37, 38] através de um modelo simples. Consideraremos uma rede diatômica infinita unidimensional com massas m_1 e m_2 alternadas como mostrado na seção anterior. O vetor polarização \vec{P} envolve um termo proporcional ao deslocamento relativo \vec{u} e outro proporcional ao campo elétrico \vec{E} , i.e.

$$\vec{P} = \varepsilon_0(\alpha\vec{u} + \chi\vec{E}), \quad (2.23)$$

onde χ é a susceptibilidade eletrônica. Aqui \vec{E} é o campo elétrico macroscópico médio, cujo valor é encontrado tomando uma média local \vec{E}_{loc} sobre muitas células unitárias. Os cálculos das constantes de proporcionalidade α e χ depende de detalhes da dinâmica da rede. Logo a equação de movimento para \vec{u} tem a forma:

$$(-\omega^2 - i\omega\Gamma)\vec{u} = -\omega_T^2\vec{u} + \beta\vec{E}_{loc}, \quad (2.24)$$

onde incluímos o termo de amortecimento Γ . Aqui ω_T denota a frequência transversal óptica (TO) dos fônons (é nesta frequência que o polariton surge) e ω_L é a frequência longitudinal óptica (LO) que não se acopla com a luz no interior do cristal. Como a relação entre \vec{E} e \vec{E}_{loc} é linear [39], a Eq. (2.24) assume a forma:

$$(\omega^2 + i\omega\Gamma)\vec{u} = \omega_T^2\vec{u} - \gamma\vec{E}. \quad (2.25)$$

Resolvendo as Eqs. (2.23) e (2.25) em relação a \vec{P} encontraremos:

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \left[\frac{\alpha\gamma\vec{E}}{\omega_T^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma} + \chi\vec{E} \right]. \quad (2.26)$$

Usando (2.26) juntamente com a equação para o deslocamento elétrico

$$\vec{D} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0\varepsilon(\omega)\vec{E}, \quad (2.27)$$

encontraremos a forma de $\varepsilon(\omega)$ para cristais iônicos:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \left(1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma} \right), \quad (2.28)$$

onde

$$\varepsilon_\infty = 1 + \chi, \quad (2.29)$$

e

$$\omega_L^2 - \omega_T^2 = \frac{\alpha\gamma}{1 + \chi}. \quad (2.30)$$

O valor da função dielétrica para frequência nula é:

$$\varepsilon(0) = \varepsilon_\infty \frac{\omega_L^2}{\omega_T^2}, \quad (2.31)$$

conhecida como relação de Lyddane-Sachs-Teller (LST) [40]. Para o limite $\Gamma \rightarrow 0$, o zero de $\varepsilon(\omega)$ define sua frequência longitudinal-óptica ω_L do fônon, ao passo que no limite $\omega \rightarrow \infty$ definimos a frequência transversal óptica ω_T . A Fig. 2.5 mostra o comportamento de $\varepsilon(\omega)$ em função da frequência reduzida (ω/ω_T) para $\varepsilon(0) = 4$ e $\varepsilon_\infty = 1$.

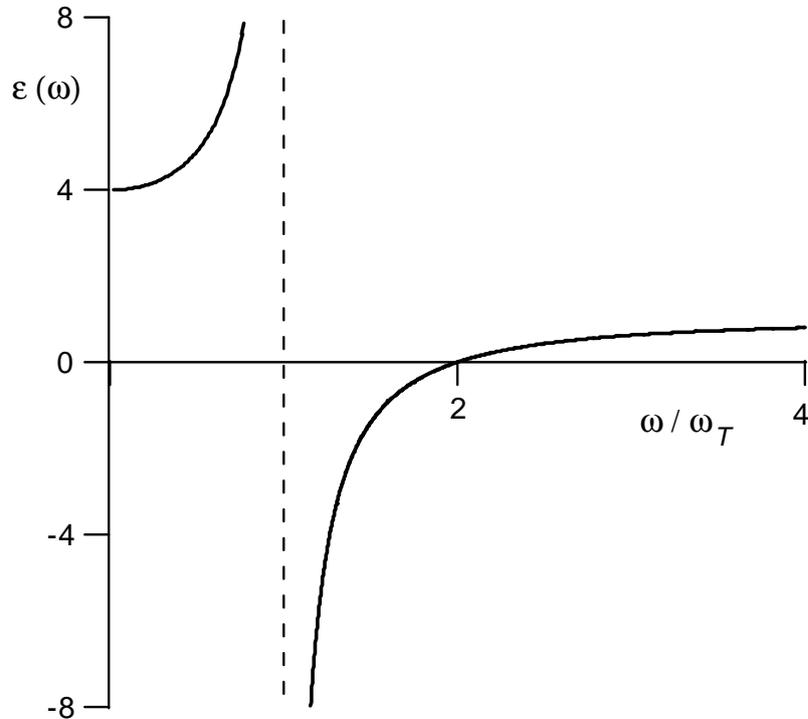


Figura 2.5: Gráfico de $\varepsilon(\omega)$ para cristais iônicos com $\Gamma = 0$ (sem amortecimento)

2.6 Conclusão

Em resumo, neste capítulo descrevemos de maneira sucinta a teoria do fônon tanto ótico como acústico dando uma descrição de sua teoria através do uso de sistemas simples envolvendo cadeias monoatômica e diatômicas de átomos, conduzindo aos cálculos das expressões para a relação de dispersão em cada caso. Também foi discutido o fato de tais entidades (fônons) possuírem momentum linear associado a sua propagação em estruturas, gerando regras de seleção para o caso da interação com cristais (espalhamento inelástico) dando origem a uma resposta contida inteiramente na função dielétrica. Consideraremos nesta tese apenas a propagação dos modos de baixa frequência (fônons acústicos) cujos cálculos para os nossos modelos levarão em conta sua teoria, bem como o uso da função dielétrica nos dois primeiros capítulos. A cada novo capítulo surgirão novos conceitos que serão ali discutidos quando necessário. Esperamos que este capítulo 2 sirva de introdução aos demais.

CAPÍTULO 3

Confinamento de Fônons Acústicos em Estruturas Piezoelétricas Fonônicas Cúbicas e Hexagonais

3.1 Introdução

O início da década de 70 foi surpreendido com o surgimento de estruturas artificiais conhecidas como super-redes, estruturas compostas de camadas alternadas de diferentes materiais [42]. Nos anos 80, as propriedades vibracionais em super-redes atraíram muita atenção, e foram extensivamente investigadas em trabalhos teóricos e experimentais [43, 44, 45, 46, 47]. Entre outras coisas, foi observado que as propriedades dessas vibrações não dependem só de parâmetros físicos como a frequência e a constante dielétrica dos materiais utilizados para formar a super-rede, mas também de propriedades estruturais, tais como suas densidades e espessuras.

Neste capítulo, estudamos o confinamento de fônons acústicos em super-redes periódicas e quasiperiódicas (Fibonacci) levando em conta a influência piezoelétrica (*strain*) no sistema. Nossa super-rede é composta pelo isolante SiO₂ (material *A*) e os nitretos GaN e AlN (material *B*), caracterizados por estruturas cristalinas *zinc-blende* (cúbica) e wurtzita (hexagonal).

3.2 Modelo Teórico para Simetria Cúbica

Nesta seção, introduzimos o modelo teórico para a simetria cúbica do nosso trabalho. Vamos considerar dois blocos de construção distintos (ver Fig. 3.1), e arranjá-los de

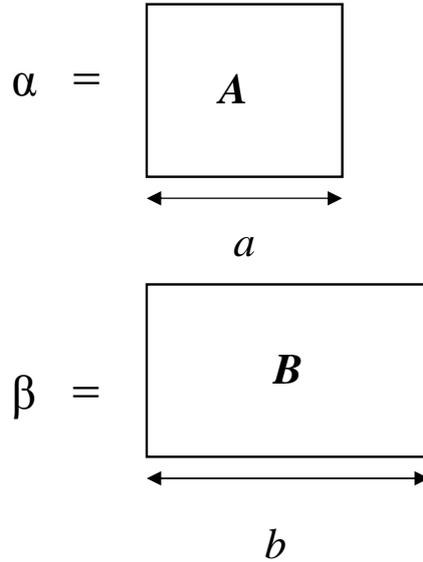


Figura 3.1: Os blocos de construção α e β .

maneira periódica $\alpha\beta\alpha\beta\cdots$.

Estes blocos de construção, α e β , são representados pelos materiais SiO_2 (representando o bloco A) e os nitretos GaN e AlN (representando cada um separadamente, o bloco B) caracterizados pelas funções dielétricas $\varepsilon_A(\omega)$ e $\varepsilon_B(\omega)$, e espessuras a e b , respectivamente.

Com o objetivo de estudar os modos de volume para fônons acústicos confinados, consideraremos uma estrutura infinita de células unitárias $\alpha\beta$, onde os eixos cartesianos são escolhidos de tal forma que o eixo z esteja na direção normal ao plano das camadas (ver Fig. 3.2).

Os nitretos, quando submetidos a um *stress* externo, desenvolvem um potencial elétrico ϕ proporcional a magnitude do *stress* aplicado, devido a influência piezoelétrica.

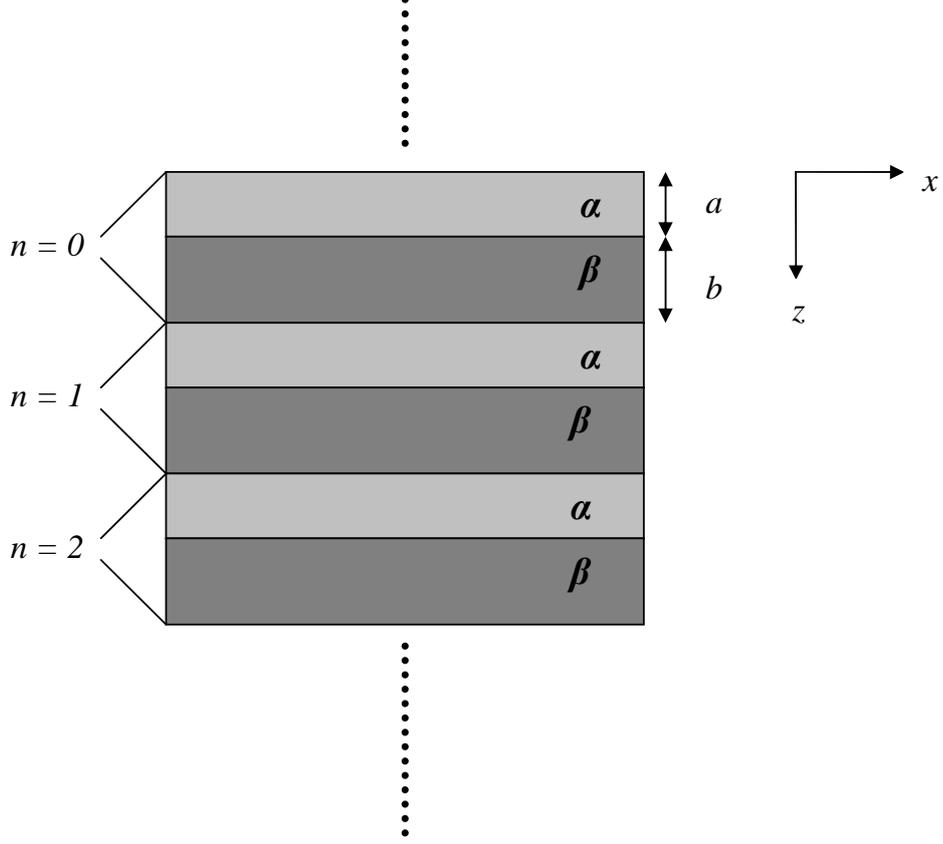


Figura 3.2: Representação esquemática de uma super-rede periódica cuja célula unitária tem espessura $L=a+b$.

Sua equação de movimento é descrita pelo conjunto de equações [48, 49, 50]:

$$\rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} - C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial r_i \partial r_l} - e_{kij} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_i \partial r_k} = 0, \quad (3.1)$$

$$e_{ikl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial r_i \partial r_l} - \varepsilon_{ik} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_i \partial r_k} = 0, \quad (3.2)$$

onde i, j, k e l podem ser x, y ou z e u_k denota o deslocamento elástico. Além disso, C_{ijkl} é o tensor elástico de quarta ordem, e_{ikl} é o tensor piezoelétrico de terceira ordem, ε_{ik} a constante dielétrica e ρ a densidade do material. A solução das equações (3.1) e (3.2) podem ser dadas por:

$$u_j = \alpha_j \exp(ikz) \exp(iq_x x - i\omega t), \quad j = x, y, z \quad (3.3)$$

$$\phi = \alpha_4 \exp(ikz) \exp(iq_x x - i\omega t), \quad (3.4)$$

onde α representa as amplitudes para as diferentes componentes e q_x é a componente x do vetor de onda.

Para um meio piezoelétrico com simetria *cúbica* [70], as Eqs. (3.1) e (3.2) juntamente com a Eq. (3.3) dão o seguinte par de equações diferenciais acopladas:

$$-\rho\omega^2 u_y - C_{44} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} \right) - 2e_{x4} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial z} = 0, \quad (3.5)$$

$$2e_{x4} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial z} - \varepsilon_{xx} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) = 0, \quad (3.6)$$

onde C_{44} e e_{x4} são respectivamente as componentes dos tensores elástico e piezoelétrico para a simetria *cúbica* do cristal piezoelétrico envolvido. Aqui usamos a notação abreviada C_{IJ} e e_{iJ} para o tensor elástico e piezoelétrico [70, 51]. O termo ε_{xx} é a função dielétrica dos fônons no meio piezoelétrico.

Usando (3.3), a Eq. (3.5) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} + q_{Tz}^2 u_y = -2iq_x \frac{e_{x4}}{C_{44}} \frac{\partial \phi}{\partial z}, \quad (3.7)$$

onde

$$q_{Tz}^2 = \left(\frac{\omega}{v_T} \right)^2 - q_x^2, \quad (3.8)$$

é a componente z do vetor de onda e $v_T = \sqrt{C_{44}/\rho}$ a velocidade transversal no meio considerado. A Eq. (3.6) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - q_x^2 \phi = 2iq_x \frac{e_{x4}}{\varepsilon_{xx}} \frac{\partial u_y}{\partial z}. \quad (3.9)$$

Derivando-se (3.9) encontramos:

$$\frac{\partial^3 \phi}{\partial z^3} - q_x^2 \frac{\partial \phi}{\partial z} = 2iq_x \frac{e_{x4}}{\varepsilon_{xx}} \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2}. \quad (3.10)$$

Substituindo a E.q. (3.7) em (3.10) obteremos

$$\frac{\partial^3 \phi}{\partial z^3} - q_x^2 \frac{\partial \phi}{\partial z} - 4q_x^2 p \frac{\partial \phi}{\partial z} = -2iq_x q_{Tz}^2 \frac{e_{x4}}{\varepsilon_{xx}} u_y, \quad (3.11)$$

onde

$$p = \frac{e_{x4}^2}{\varepsilon_{xx} C_{44}}. \quad (3.12)$$

Derivando a Eq. (3.11) e usando:

$$\frac{\partial u_y}{\partial z} = \frac{\varepsilon_{xx}}{2iq_x e_{x4}} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - q_x^2 \phi \right), \quad (3.13)$$

obtida de (3.9), encontramos:

$$\frac{\partial^4 \phi}{\partial z^4} + \left[q_{Tz}^2 - q_x^2(1 + 4p) \right] \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - q_{Tz}^2 q_x^2 \phi = 0. \quad (3.14)$$

A equação diferencial acima tem como solução geral:

$$\begin{aligned} \phi_\beta = (e_{x4}/\varepsilon_{xx}) [& B_1 \exp(ik_1 z) + B_2 \exp(-ik_1 z)] \\ & + B_3 \exp(ik_2 z) + B_4 \exp(-ik_2 z) \end{aligned}, \quad (3.15)$$

onde $k_1 = \pm(k_+)$ e $k_2 = \pm(k_-)$, com

$$k_\pm^2 = \left[q_{Tz}^2 - q_x^2(1 + 4p) \pm \Delta \right] / 2, \quad (3.16)$$

e Δ dado por

$$\Delta = \left[(q_{Tz}^2 + q_x^2)^2 + 8q_x^2 p(2q_x^2 p - q_{Tz}^2 + q_x^2) \right]^{1/2}. \quad (3.17)$$

A Eq. (3.15) é o potencial elétrico para a camada piezoelétrica com simetria *cúbica*. A solução para u_y é determinada isolando-se u_y em (3.11), ou seja:

$$u_y = \frac{1}{2iq_x q_{Tz}^2 e_{x4}} \varepsilon_{xx} \left[-\frac{\partial^3 \phi}{\partial z^3} + q_x^2(1 + 4p) \frac{\partial \phi}{\partial z} \right]. \quad (3.18)$$

Substituindo ϕ dado pela equação (3.15) em (3.18), encontraremos a forma do deslocamento elástico no cristal piezoelétrico com simetria *cúbica*:

$$\begin{aligned} u_y = L(k_1) [& B_1 \exp(ik_1 z) - B_2 \exp(-ik_1 z)] \\ & + (\varepsilon_{xy}/e_{x4}) L(k_2) [B_3 \exp(ik_2 z) - B_4 \exp(-ik_2 z)] \end{aligned}, \quad (3.19)$$

onde

$$L(k) = \frac{k[k^2 + q_x^2(1 + 4p)]}{2q_x q_{Tz}^2}. \quad (3.20)$$

Dentro da camada isolante (não piezoelétrica) da n -ésima célula, os campos elástico e eletromagnético são desacoplados, cujas equações diferenciais tem soluções bem conhecidas:

$$u_y = A_1^n \exp(iq_{Tz} z) + A_2^n \exp(-iq_{Tz} z), \quad (3.21)$$

$$\phi_\alpha = A_3^n \exp(-q_x z) + A_4^n \exp(q_x z). \quad (3.22)$$

O tensor de *stress* S_{ij} é definido por [70]:

$$S_{ij} = C_{ijkl}s_{kl} - e_{kij}E_k, \quad i, j, k, l = x, y, z \quad (3.23)$$

onde C_{ijkl} é o tensor elástico, e_{kij} é o tensor piezoelétrico, E_k é o campo elétrico e s_{kl} é o *strain* definido como:

$$s_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial r_l} + \frac{\partial u_l}{\partial r_k} \right), \quad (3.24)$$

de modo que na condição de fronteira o tensor S_{32} assume a forma:

$$S_{32} = C_{44} \frac{\partial u_y}{\partial z} - iq_x e_{x4} \phi. \quad (3.25)$$

O vetor deslocamento elétrico é definido como:

$$D_i = \varepsilon_{ik} E_k + e_{ikl} s_{kl}, \quad (3.26)$$

de modo que na condição de contorno a componente normal do deslocamento elétrico D_z assume a forma:

$$D_z = -\varepsilon_c \frac{\partial \phi}{\partial z} \quad c = (\alpha, \beta). \quad (3.27)$$

Aplicando-se as condições de contorno elásticas e eletromagnéticas nas duas interfaces da n -ésima célula unitária, isto é, nas interfaces $z = nL + a$ e $z = (n + 1)L$ da Fig. 3.2, sendo L a espessura da célula unitária, teremos:

(a) continuidade do deslocamento transversal u_y :

$$A_1^{(n)} f_a + A_2^{(n)} \bar{f}_a = L(k_1)[B_1^{(n)} - B_2^{(n)}] + p_2^{-1} L(k_2)[B_3^{(n)} - B_4^{(n)}], \quad (3.28)$$

$$A_1^{(n+1)} + A_2^{(n+1)} = L(k_1)[B_1^{(n)} f_{b1} - B_2^{(n)} \bar{f}_{b1}] + p_2^{-1} L(k_2)[B_3^{(n)} f_{b2} - B_4^{(n)} \bar{f}_{b2}]. \quad (3.29)$$

(b) continuidade do potencial elétrico ϕ :

$$A_3^{(n)} f_x + A_4^{(n)} \bar{f}_x = p_2[B_1^{(n)} + B_2^{(n)}] + B_3^{(n)} + B_4^{(n)}, \quad (3.30)$$

$$A_3^{(n+1)} + A_4^{(n+1)} = p_1[B_1^{(n)} f_{b1} - B_2^{(n)} \bar{f}_{b1}] + B_3^{(n)} f_{b2} + B_4^{(n)} \bar{f}_{b2}. \quad (3.31)$$

(c) continuidade do tensor de *stress* transversal S_{32} :

$$\begin{aligned} q_{Tz}\mu[A_1^{(n)}f_a - A_2^{(n)}\bar{f}_a] - q_x p_1[A_3^{(n)}f_x + A_4^{(n)}\bar{f}_x] = \\ L(k_1)k_1[B_1^{(n)} + B_2^{(n)}] + p_2^{-1}L(k_2)k_2[B_3^{(n)} + B_4^{(n)}], \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} q_{Tz}\mu[A_1^{(n+1)} - A_2^{(n+1)}] - q_x p_1[A_3^{(n+1)} + A_4^{(n+1)}] = \\ L(k_1)k_1[B_1^{(n)}f_{b1} + B_2^{(n)}\bar{f}_{b1}] + p_2^{-1}L(k_2)k_2[B_3^{(n)}f_{b2} + B_4^{(n)}\bar{f}_{b2}]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

(d) continuidade da componente normal do deslocamento elétrico D_z :

$$A_3^{(n)}f_x - A_4^{(n)}\bar{f}_x = -\frac{i\varepsilon_\beta}{q_x\varepsilon_\alpha}[p_2k_1(B_1^{(n)} - B_2^{(n)}) + k_2(B_3^{(n)} - B_4^{(n)})], \quad (3.34)$$

$$A_3^{(n+1)} - A_4^{(n+1)} = -\frac{i\varepsilon_\beta}{q_x\varepsilon_\alpha}[p_2k_1(B_1^{(n)}f_{b1} - B_2^{(n)}\bar{f}_{b1}) + k_2(B_3^{(n)}f_{b2} - B_4^{(n)}\bar{f}_{b1})]. \quad (3.35)$$

Nas equações acima definimos os termos:

$$f_m = \exp(iq_{Tz}m) = 1/\bar{f}_m, \quad m = a, b \quad (3.36)$$

$$f_x = \exp(-q_x a) = 1/\bar{f}_x, \quad (3.37)$$

$$f_{bj} = \exp(ik_j b) = 1/\bar{f}_{bj}, \quad (j = 1, 2) \quad (3.38)$$

$$p_1 = e_{x4}/C_{44\beta}, \quad (3.39)$$

$$p_2 = e_{x4}/\varepsilon_\beta, \quad (3.40)$$

$$\mu = C_{44\alpha}/C_{44\beta}. \quad (3.41)$$

Definindo os kets:

$$|A^{(n)}\rangle = \begin{pmatrix} A_1^{(n)} \\ A_2^{(n)} \\ A_3^{(n)} \\ A_4^{(n)} \end{pmatrix}, \quad (3.42)$$

e

$$|B^{(n)}\rangle = \begin{pmatrix} B_1^{(n)} \\ B_2^{(n)} \\ B_3^{(n)} \\ B_4^{(n)} \end{pmatrix}, \quad (3.43)$$

e usando-se as equações (3.28), (3.30), (3.32) e (3.34), podemos construir uma equação matricial da forma:

$$M_1|A^{(n)}\rangle = N_1|B^{(n)}\rangle, \quad (3.44)$$

onde

$$M_1 = \begin{pmatrix} f_a & \bar{f}_a & 0 & 0 \\ q_{Tz}^\alpha \mu f_a & -q_{Tz}^\alpha \mu \bar{f}_a & -q_x p_1 f_x & -q_x p_1 \bar{f}_x \\ 0 & 0 & f_x & \bar{f}_x \\ 0 & 0 & f_x & -\bar{f}_x \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

e

$$N_1 = \begin{pmatrix} L(k_1) & -L(k_1) & L(k_2)/p_2 & -L(k_2)/p_2 \\ k_1 L(k_1) & k_1 L(k_1) & k_2 L(k_2)/p_2 & -k_2 L(k_2)/p_2 \\ p_2 & p_2 & 1 & 1 \\ -\frac{i\varepsilon_\beta k_1 p_2}{\varepsilon_\alpha q_x} & \frac{i\varepsilon_\beta k_1 p_2}{\varepsilon_\alpha q_x} & -\frac{i\varepsilon_\beta k_2}{\varepsilon_\alpha q_x} & \frac{i\varepsilon_\beta k_2}{\varepsilon_\alpha q_x} \end{pmatrix}. \quad (3.46)$$

De maneira análoga as equações (3.29), (3.31), (3.33) e (3.35), podem ser escritas na forma:

$$M_2|A^{(n+1)}\rangle = N_2|B^{(n)}\rangle. \quad (3.47)$$

onde

$$M_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ q_{Tz}^\alpha \mu & -q_{Tz}^\alpha \mu & -q_x p_1 & -q_x p_1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.48)$$

e

$$N_2 = \begin{pmatrix} L(k_1) f_{b1} & -L(k_1) \bar{f}_{b1} & L(k_2) p_2^{-1} & -L(k_2) p_2^{-1} \\ L(k_1) k_1 & L(k_1) k_1 & L(k_2) p_2^{-1} k_2 & L(k_2) p_2^{-1} k_2 \\ p_2 & p_2 & 1 & 1 \\ -\frac{i\varepsilon_\beta k_1 p_2}{\varepsilon_\alpha q_x} & \frac{i\varepsilon_\beta k_1 p_2}{\varepsilon_\alpha q_x} & -\frac{i\varepsilon_\beta k_1}{\varepsilon_\alpha q_x} & \frac{i\varepsilon_\beta k_1}{\varepsilon_\alpha q_x} \end{pmatrix}. \quad (3.49)$$

Aqui M_j e N_j ($j = 1, 2$), são matrizes 4×4 obtidas das condições de contorno.

Usando-se as equações (3.42) e (3.45), encontraremos

$$|A^{(n+1)}\rangle = T|A^{(n)}\rangle, \quad (3.50)$$

onde T é dada por:

$$T = M_2^{-1}N_2N_1^{-1}M_1. \quad (3.51)$$

A equação (3.50) relaciona os coeficientes do potencial elétrico e do deslocamento elástico (estes coeficientes formam um vetor coluna do tipo 1×4) de uma célula unitária com os de sua precedente através de uma matriz T (chamada *matriz transferência*) de modo que $\det(T)=1$ (unimodular).

3.3 Modos de Volume

Para encontrarmos a relação de dispersão para os fônons acústicos no volume, devemos considerar a Eq. (3.50) escrita na forma:

$$|A^{(n+m)}\rangle = T^m|A^{(n)}\rangle. \quad (3.52)$$

Levando em conta a periodicidade do sistema podemos aplicar o teorema de Bloch [52].

$$|A^{(n+1)}\rangle = T|A^{(n)}\rangle = \exp(iQ_iL)|A^{(n)}\rangle, \quad (3.53)$$

satisfazendo a seguinte equação de autovalores

$$[T - \exp(iQ_iL)I]|A^{(n)}\rangle = 0, \quad (3.54)$$

onde I é a matriz identidade.

Como $\det(T)=1$, os autovalores de T devem satisfazer a relação

$$t_1t_2t_3t_4 = 1. \quad (3.55)$$

Esta relação é satisfeita quando $t_2 = t_1^{-1}$ e $t_4 = t_3^{-1}$ de tal forma que o vetor de onda de Bloch toma a forma simplificada:

$$\exp(iQ_i L) = t_i, \quad i = 1, 2. \quad (3.56)$$

Resolvendo (3.54), encontraremos uma equação característica da forma:

$$t^4 + (XX)t^3 + (BB)t^2 + (YY)t + (CC) = 0, \quad (3.57)$$

onde

$$XX = YY = -Tr(T), \quad (3.58)$$

$$BB = T_{11}T_{22} + T_{33}T_{44} + (T_{11} + T_{22})(T_{33} + T_{44}) - T_{24}T_{42} - T_{34}T_{43} - T_{23}T_{32} - T_{12}T_{21} - T_{13}T_{31} - T_{14}T_{41}, \quad (3.59)$$

$$CC = 1. \quad (3.60)$$

Aqui, T_{ij} são os elementos da matriz transferência. Dividindo (3.57) por t^2 e reagrupando os termos, encontraremos:

$$H^2 + (XX)H + (BB - 2) = 0, \quad (3.61)$$

onde $H_i = t_i + t_i^{-1}$. Este fato juntamente com a Eq. (3.53) nos fornece as bandas de volume para a propagação dos fônons acústicos na super-rede, isto é:

$$\cos(Q_1 L) = H_1/2 \quad e \quad \cos(Q_2 L) = H_2/2, \quad (3.62)$$

onde

$$H_1 = \frac{-XX + \sqrt{XX^2 - 4(BB - 2)}}{2}, \quad (3.63)$$

e

$$H_2 = \frac{-XX - \sqrt{XX^2 - 4(BB - 2)}}{2}. \quad (3.64)$$

3.4 Modos de Superfície

O cálculo da relação de dispersão para os modos de superfície dos fônons acústicos, é feito considerando-se um truncamento da estrutura infinita de células unitárias em $z = 0$. Como pode ser visualizado na Fig. 3.2, este plano está na interface da célula unitária rotulada por $n = 0$. A região $z < 0$ é considerada ser ocupada por um meio transparente à luz (vácuo), cuja constante dielétrica é $\varepsilon_V = 1$.

Esta super-rede semi-infinita não possui simetria translacional na direção z e, portanto, não podemos considerar o teorema de Bloch como no caso dos fônons ópticos de volume [25].

O potencial no vácuo é dado por:

$$\phi_{vac} = C \exp(q_x z), \quad (3.65)$$

onde C é uma constante. Aplicando-se as condições de contorno em $z = 0$, teremos:

(a) continuidade do potencial: ϕ

$$C = A_3^0 + A_4^0, \quad (3.66)$$

(b) continuidade de D_z :

$$\varepsilon_V C = -\varepsilon_\alpha (A_3^0 + A_4^0), \quad (3.67)$$

(c) continuidade de S_{32} :

$$A_1^0 - A_2^0 = 0. \quad (3.68)$$

A substituição de (3.66) em (3.67), nos dá:

$$\frac{A_4^0}{A_3^0} = \lambda = \frac{\varepsilon_A + \varepsilon_V}{\varepsilon_A - \varepsilon_V}. \quad (3.69)$$

Por outro lado a equação matricial

$$T|A^{(0)}\rangle = \exp(-\beta L)|A^{(0)}\rangle, \quad (3.70)$$

com $\beta = iQ$ e $\text{Re } \beta > 0$ (condição necessária para que haja modos localizados), nos fornece:

$$(T_{31} + T_{32})\frac{A_1^0}{A_3^0} - (T_{41} + T_{42})\frac{A_1^0}{A_4^0} + T_{33} - T_{44} + T_{34}\lambda - T_{43}\lambda^{-1} = 0, \quad (3.71)$$

juntamente com

$$\frac{A_1^0}{A_3^0} = - \left[\frac{(T_{13} - T_{23}) + (T_{14} - T_{24})\lambda}{(T_{11} + T_{12} - T_{21} - T_{22})} \right], \quad (3.72)$$

e

$$\frac{A_1^0}{A_4^0} = - \left[\frac{(T_{13} - T_{23})\lambda^{-1} + (T_{14} - T_{24})}{(T_{11} + T_{12} - T_{21} - T_{22})} \right]. \quad (3.73)$$

Substituindo as Eq. (3.72) e (3.73) em (3.71) encontraremos:

$$\begin{aligned} & (T_{11} + T_{12} - T_{21} - T_{22})(T_{33} - T_{44} + T_{34}\lambda - T_{43}\lambda^{-1}) \\ & \quad + (T_{41} + T_{42})[(T_{13} - T_{23})\lambda^{-1} + (T_{14} - T_{24})] \\ & \quad - (T_{31} + T_{32})[T_{13} - T_{23} + (T_{14} - T_{24})\lambda] = 0, \end{aligned} \quad (3.74)$$

que é a equação para os modos de superfície dos fônons. Estes modos de superfície encontram-se localizados nos planos das interfaces entre os materiais dielétricos, e são caracterizados por uma decaimento exponencial com fator de atenuação β . Deste modo o número de modos de superfície depende do número de interfaces na célula unitária.

3.5 Estrutura Quasiperiódica Tipo Fibonacci

Em nosso trabalho usaremos uma super-rede tipo Fibonacci usando o isolante SiO_2 (representado aqui por α), e os nitretos GaN e AlN (representados aqui por β). A estrutura de Fibonacci pode ser crescida experimentalmente pela superposição dos blocos de construção α e β , de modo que o n -ésimo estágio da super-rede S_n é dado pela regra de recorrência $S_n = S_{n-1}S_{n-2}$, sendo $n \geq 2$, com $S_0 = \beta$ e $S_1 = \alpha$. A estrutura de Fibonacci é também invariante sob as transformações $\alpha \rightarrow \alpha\beta$ e $\beta \rightarrow \alpha$. As gerações da super-rede de Fibonacci são:

$$S_0 = [\beta], S_1 = [\alpha], S_2 = [\alpha\beta], S_3 = [\alpha\beta\alpha], \text{ etc.} \quad (3.75)$$

O número de blocos de construção desta estrutura aumenta de acordo com o número de Fibonacci, cuja relação de recorrência é:

$$F_l = F_{l-1} + F_{l-2}, \quad (3.76)$$

com $F_0 = F_1 = 1$. A razão entre o número de blocos de construção α e o número de blocos de construção β , tende para o chamado “golden mean number” $\tau = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$, quando o número de geração tende para infinito [53].

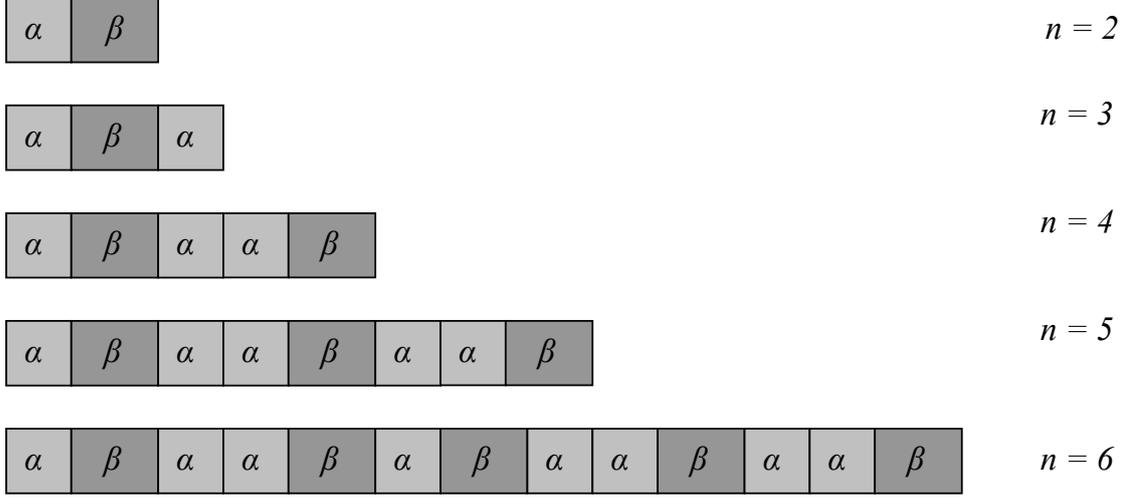


Figura 3.3: Evolução da célula unitária da super-rede de Fibonacci em função do número de geração n .

As matrizes transferência para as gerações da super-rede de Fibonacci podem ser determinadas através do método indutivo. Deste modo, observando o crescimento da célula unitária na Fig. (3.3), podemos calcular estas matrizes da seguinte forma:

(1) para $S_0 = [\beta]$ ou $S_1 = [\alpha]$, temos que

$$T_{S_0} = M_2^{-1}N_2 \quad e \quad T_{S_1} = N_1^{-1}M_1; \quad (3.77)$$

(2) para $S_2 = [\alpha\beta]$

$$T_{S_2} = M_2^{-1}N_2N_1^{-1}M_1; \quad (3.78)$$

(3) para $S_3 = [\alpha\beta\alpha]$

$$T_{S_3} = N_1^{-1}M_1M_2^{-1}N_2N_1^{-1}M_1; \quad (3.79)$$

(3) generalizando para ($n \geq 1$), temos

$$T_{S_{n+2}} = T_{S_n}T_{S_{n+1}}. \quad (3.80)$$

De posse destas três matrizes T_{S_0} , T_{S_1} e T_{S_2} podemos determinar qualquer geração Fibonacci para a matriz transferência [54].

3.6 Modelo Teórico para Simetria Hexagonal

Para um meio piezoelétrico com simetria *hexagonal*, as Eqs. (3.1) e (3.2) juntamente com a Eq. (3.3) dão o seguinte par de equações diferenciais acopladas:

$$-\rho\omega^2 u_y - C_{44} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} \right) - e_{x5} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) = 0, \quad (3.81)$$

$$e_{x5} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} \right) - \varepsilon_{xx} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) = 0, \quad (3.82)$$

onde C_{44} e e_{x5} são respectivamente as componentes dos tensores elástico e piezoelétrico para a simetria *hexagonal* do cristal piezoelétrico envolvido. Aqui usamos a notação abreviada C_{IJ} e e_{iJ} para o tensor elástico e piezoelétrico. O termo ε_{xx} é a função dielétrica dos fônons no meio piezoelétrico.

Derivando-se as Eqs. (3.3) e (3.4) e substituindo-se em (3.81) e (3.82), teremos:

$$-\rho\omega^2 u_y - C_{44} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} - q_x^2 u_y \right) - e_{x5} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - q_x^2 \phi \right) = 0, \quad (3.83)$$

$$e_{x5} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} - q_x^2 u_y \right) - \varepsilon_{xx} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - q_x^2 \phi \right) = 0. \quad (3.84)$$

Podemos organizar os termos em (3.83) e (3.84) para obter

$$\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} + q_{Tz}^2 u_y = -\frac{e_{x5}}{C_{44}} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q_x^2 \right) \phi, \quad (3.85)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - q_x^2 \phi = \frac{e_{x5}}{\varepsilon_{xx}} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q_x^2 \right) u_y, \quad (3.86)$$

onde

$$q_{Tz}^2 = \left(\frac{\omega}{v_T} \right)^2 - q_x^2, \quad (3.87)$$

é a componente z do vetor de onda e $v_T = C_{44}/\rho$ a velocidade transversal no meio considerado.

A equação diferencial (3.86) pode ser escrita como:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q_x^2\right)\phi = \frac{e_{x5}}{\varepsilon_{xx}}\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q_x^2\right)u_y, \quad (3.88)$$

onde podemos encontrar

$$\phi = \frac{e_{x5}}{\varepsilon_{xx}}u_y. \quad (3.89)$$

Substituindo (3.89) em (3.85) e organizando os termos encontramos:

$$\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} + k^2 u_y = 0, \quad (3.90)$$

onde

$$k^2 = \frac{q_{Tz}^2 - p'q_x^2}{1 + p'}, \quad (3.91)$$

e

$$p' = \frac{e_{x5}^2}{\varepsilon_{xx}C_{44}}. \quad (3.92)$$

A solução geral de (3.90) é:

$$u_y = B_1 \exp(ikz) + B_2 \exp(-ikz). \quad (3.93)$$

Esta solução dá o deslocamento elástico das partículas na camada piezoelétrica com simetria hexagonal.

Resolvendo a equação homogênea em (3.86) e usando (3.89), encontramos a solução para o potencial elétrico dado por:

$$\phi_\beta = \frac{e_{x5}}{\varepsilon_{xx}}[B_1 \exp(ikz) + B_2 \exp(-ikz)] + B_3 \exp(q_x z) + B_4 \exp(-q_x z). \quad (3.94)$$

Esta solução descreve o potencial na camada piezoelétrica hexagonal.

Dentro da camada isolante (não piezoelétrica) da n -ésima célula, o desacoplamento elástico e eletromagnético das equações diferenciais dão as soluções conhecidas:

$$u_y = A_1^n \exp(iq_{Tz}z) + A_2^n \exp(-iq_{Tz}z), \quad (3.95)$$

$$\phi_\alpha = A_3^n \exp(-q_x z) + A_4^n \exp(q_x z). \quad (3.96)$$

Aplicando-se as condições de contorno elásticas e eletromagnéticas nas duas interfaces da n -ésima célula unitária, isto é, nas interfaces $z = nL + a$ e $z = (n + 1)L$ da Fig. 3.2, sendo L a espessura da célula unitária, teremos: (a) continuidade do deslocamento transversal u_y :

$$A_1^{(n)} f_a + A_2^{(n)} \bar{f}_a = B_1^{(n)} + B_2^{(n)}, \quad (3.97)$$

$$A_1^{(n+1)} + A_2^{(n+1)} = B_1^{(n)} f_b + B_2^{(n)} \bar{f}_b. \quad (3.98)$$

(b) continuidade do potencial elétrico ϕ :

$$A_3^{(n)} f_x + A_4^{(n)} \bar{f}_x = p'_1 [B_1^{(n)} + B_2^{(n)}] + B_3^{(n)} + B_4^{(n)}, \quad (3.99)$$

$$A_3^{(n+1)} + A_4^{(n+1)} = p'_1 [B_1^{(n)} f_b + B_2^{(n)} \bar{f}_b] + B_3^{(n)} f_x + B_4^{(n)} \bar{f}_x. \quad (3.100)$$

(c) continuidade do tensor de *stress* transversal S_{32} :

$$\begin{aligned} q_{Tz} \mu [A_1^{(n)} f_a - A_2^{(n)} \bar{f}_a] = \\ k(1 + p') [B_1^{(n)} - B_2^{(n)}] - iq_x p'_1 [-B_3^{(n)} + B_4^{(n)}], \end{aligned} \quad (3.101)$$

$$\begin{aligned} q_{Tz} \mu [A_1^{(n+1)} - A_2^{(n+1)}] = \\ k(1 + p') [B_1^{(n)} f_b - B_2^{(n)} \bar{f}_b] - ip'_1 q_x [-B_3^{(n)} f_x + B_4^{(n)} \bar{f}_x]. \end{aligned} \quad (3.102)$$

(d) continuidade da componente normal do deslocamento elétrico D_z :

$$A_3^{(n)} f_x - A_4^{(n)} \bar{f}_x = \frac{\varepsilon_\beta}{\varepsilon_\alpha} (B_3^{(n)} - B_4^{(n)}), \quad (3.103)$$

$$A_3^{(n+1)} - A_4^{(n+1)} = \frac{\varepsilon_\beta}{\varepsilon_\alpha} (B_3^{(n)} f_x - B_4^{(n)} \bar{f}_x). \quad (3.104)$$

Nas equações acima usamos os termos:

$$p'_1 = e_{x5}/C_{44\beta}, \quad (3.105)$$

$$p'_2 = e_{x5}/\varepsilon_\beta, \quad (3.106)$$

$$\mu = C_{44\alpha}/C_{44\beta}. \quad (3.107)$$

Definindo, como no capítulo anterior, os kets $|A^{(n)}\rangle$ e $|B^{(n)}\rangle$ e usando as equações (3.97), (3.99), (3.101) e (3.103), podemos construir uma equação matricial da forma:

$$M'_1|A^{(n)}\rangle = N'_1|B^{(n)}\rangle, \quad (3.108)$$

onde

$$M'_1 = \begin{pmatrix} f_a & \bar{f}_a & 0 & 0 \\ q_{Tz}^\alpha \mu f_a & -q_{Tz}^\alpha \mu \bar{f}_a & -q_x p_1 f_x & -q_x p_1 \bar{f}_x \\ 0 & 0 & f_x & \bar{f}_x \\ 0 & 0 & f_x & -\bar{f}_x \end{pmatrix}, \quad (3.109)$$

e

$$N'_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ k(1+p') & -k(1+p') & iq_x p'_1 & -iq_x p'_1 \\ p'_2 & p'_2 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{\varepsilon_\beta}{\varepsilon_\alpha} & -\frac{\varepsilon_\beta}{\varepsilon_\alpha} \end{pmatrix}. \quad (3.110)$$

De maneira análoga as equações (3.98), (3.100), (3.102) e (3.104), podem ser escritas na forma:

$$M'_2|A^{(n+1)}\rangle = N'_2|B^{(n)}\rangle. \quad (3.111)$$

onde

$$M'_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ q_{Tz}^\alpha \mu & -q_{Tz}^\alpha \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.112)$$

e

$$N'_2 = \begin{pmatrix} f_b & \bar{f}_b & 0 & 0 \\ k(1+p')f_b & -k(1+p')\bar{f}_b & iq_x p'_1 f_x & -iq_x p'_1 \bar{f}_x \\ p'_2 f_b & p'_2 \bar{f}_b & f_x & \bar{f}_x \\ 0 & 0 & \frac{\varepsilon_\beta}{\varepsilon_\alpha} f_x & -\frac{\varepsilon_\beta}{\varepsilon_\alpha} \bar{f}_x \end{pmatrix}. \quad (3.113)$$

Aqui M'_j e N'_j ($j = 1, 2$), são matrizes 4×4 obtidas das condições de contorno.

Usando-se as equações (4.40) e (4.43), encontraremos

$$|A^{(n+1)}\rangle = T'|A^{(n)}\rangle, \quad (3.114)$$

onde T' é dada por:

$$T' = M'_2{}^{-1}N'_2N'_1{}^{-1}M'_1, \quad (3.115)$$

definindo a matriz transferência para o caso hexagonal.

3.7 Resultados Numéricos para as simetrias Cúbicas e Hexagonais

Nesta seção vamos apresentar alguns resultados numéricos do espectro dos fônons confinados em uma super-rede tipo Fibonacci. Vamos considerar que a função dielétrica dependente da frequência no meio β é dada por:

$$\varepsilon_{xx}(\omega) = \varepsilon_{\infty} \left(1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma} \right). \quad (3.116)$$

e consideraremos a razão entre as camadas da nossa super-rede $a/b = 2.0$. Por simplicidade vamos desprezar o fator de amortecimento, Γ . Os valores de frequências são mostrados na tabela abaixo juntamente com outros parâmetros físicos de importância [55, 56, 57, 58]:

	ω_{LO}	ω_{TO}	ε_{∞}	ρ	C_{44}	e_{x4}
AlN	916	673	4.68	3.32	2.00	1.46
GaN	743	561	5.29	6.25	1.54	0.73
SiO ₂	—	—	—	2.20	3.12	—

Aqui as unidades de frequências são cm^{-1} , as constantes elásticas estão em unidades de $10^9 N/m^2$, as densidades estão em $10^3 Kg/m^2$ e as constantes piezoelétricas estão em C/m^2 .

Consideramos a constante dielétrica do meio α (meio isolante) assumindo o valor $\varepsilon_{\alpha} = 3.8$. Nos resultados numéricos que apresentamos aqui, em vez de utilizarmos a frequência ω , preferimos substituí-la pela frequência reduzida ω/Ω com a intenção de facilitar os cálculos numéricos. Aqui Ω é dado por:

$$\Omega = v_{T\alpha}/a, \quad (3.117)$$

onde $v_{T\alpha}$ é a velocidade transversal no meio α .

Nas figuras a seguir apresentamos os espectros dos fônons acústicos para a super-rede de Fibonacci considerando os nitretos AlN (Figs. 3.4 e 3.5) e GaN (Figs. 3.6 e 3.7).

Comparamos os espectros com *strain* com aqueles sem *strain*, ou seja primeiro consideramos a influência piezoelétrica e comparamos os resultados com aqueles espectros onde foi desconsiderada a influência piezoelétrica. Os espectros são representados graficamente como funções da frequência reduzida ω/Ω versus o vetor de onda adimensional $q_x a$. Nestes espectros os modos de superfície são representados por linhas pontilhadas, enquanto que os modos de volume são representados por áreas sombreadas, que são limitadas pelas curvas correspondentes aos valores de $Q_i L = 0$ e $Q_i L = \pi$ ($i=1, 2$). Em ordem crescente na frequência, estas curvas são limitadas em valores de $Q_i L$ arranjados da seguinte maneira: $Q_i L = \pi, 0, 0, \pi, \pi, 0, \dots, 0$, sempre iniciando-se com $Q_{i=1} L = \pi$ e terminando com $Q_{i=1} L = 0$ para todas as gerações. Note que os modos de superfície estão na maioria dos espectros, muito próximos as bandas de volume de tal forma que em alguns casos, tais modos não podem ser visualizados. Comparando os espectros mostrados para o material AlN, podemos observar que no caso periódico ilustrado na Fig. 3.4(a) existe uma ligeira separação das bandas a medida que $q_x a$ aumenta. Já na Fig. 3.4(b) percebemos uma junção completa das bandas assim como uma acentuada curvatura. Podemos notar também um aumento na espessura da primeira banda na Fig. 3.4(b) com o aumento de $q_x a$. No caso quasiperiódico podemos observar os mesmos efeitos que o caso periódico nas figuras 3.4(a) e 3.4(b), diferenciado destas apenas pela quantidade de bandas no mesmo intervalo de frequências.

Comparando os espectros para o material GaN, podemos observar uma nítida separação das bandas. Além disso, observa-se também uma curvatura dos espectros sobre a influência do strain evidenciado ser esta uma característica de todos os espectros. Comparando as Figuras 3.6(a) e 3.6(b), observamos o acentuado aparecimento do modo de superfície (Fig. 3.6(b)) em relação ao modo de superfície na Fig. 3.6(a). Notamos ainda o surgimento de outro modo de superfície próximo a segunda banda na Fig. 3.6(b). Para o caso quasiperiódico, representados nas Figuras 3.7(a) e 3.7(b), podemos destacar além das características observadas nos espectros anteriores (curvatura, aumento das espessuras das camadas com $q_x a$, etc.) um maior número de bandas no mesmo intervalo de frequências, e a falta de visibilidade dos modos de superfícies na figura 3.7(b).

Podemos dizer que um espectro de energia fractal é a assinatura básica de sistemas

quasiperiódicos. Vamos descrever esta fractalidade de forma quantitativa investigando a localização das bandas de volume dos fônons acústicos. Para altas energias elas formam um conjunto de Cantor, tradicionalmente conhecido pela retirada do terço central de um segmento unitário, e em seguida o terço central dos segmentos restantes *ad infinitum*.

As figuras 3.8(a) e 3.8(b) mostram as frequências (energias) permitidas e proibidas das larguras de banda, do espectro dos fônons acústicos na super-rede de Fibonacci, versus o número de geração N , até a sexta geração da sequência de Fibonacci, para um valor fixo do vetor de onda no plano $q_x a = 1.0$. Uma estrutura de bandas muito semelhante a esta foi obtida nos trabalhos de Hofstadter [59], Kadanoff, et. al [60, 61], e Ostlund et. al [62].

Notamos claramente que a medida que avançamos na geração da sequência, as regiões de bandas se tornam mais e mais limitadas, com um aspecto típico de um conjunto de Cantor, indicando uma localização cada vez mais forte.

As figuras 3.9(a) e 3.9(b) são obtidas de 3.8(a) e 3.8(b) somando-se as larguras das regiões permitidas (ou bandas). De fato esta soma, que representamos por Δ , escala de acordo com a lei de potência $\Delta \sim F_N^{-\delta}$, onde F_N é o número de Fibonacci e δ é um índice de escala, que é função de $q_x a$, e que pode ser interpretado como uma medida do grau de localização da excitação [63, 64].

Vamos apresentar agora alguns resultados numéricos do espectro dos fônons acústicos confinados em super-redes para a simetria hexagonal. Os parâmetros físicos são os mesmos utilizados na tabela anterior com exceção dos valores do tensor e_{x5} que assume o valor $0.60C/m^2$ para o AlN e $0.49C/m^2$ para o GaN.

De maneira análoga, apresentamos os espectros dos fônons acústicos para a super-rede de Fibonacci considerando os nitretos AlN (Figs. 3.10 e 3.11) e GaN (Figs. 3.12 e 3.13). Novamente comparamos os espectros com *strain* com aqueles sem *strain*, ou seja primeiro consideramos a influência piezoelétrica e comparamos os resultados com aque-

les espectros onde foi desconsiderada a influência pizoelétrica. Podemos perceber que desconsiderando a influência do strain, os espectros tanto no caso cúbico como no caso hexagonal são iguais. Isto se deve ao fato de considerarmos em nossos cálculos apenas a função dielétrica transversal ε_{xx} . Como no caso cúbico as bandas são limitadas pelas curvas correspondentes aos valores de $Q_i L = 0$ e $Q_i L = \pi$ ($i=1, 2$). Em ordem crescente na frequência, estas curvas são limitadas em valores de $Q_i L$ arranjados da seguinte maneira: $Q_i L = \pi, 0, 0, \pi, \pi, 0, \dots, 0$, sempre iniciando-se com $Q_{i=1} L = \pi$ e terminando com $Q_{i=1} L = 0$ para todas as gerações. Para $i = 2$ constatamos que as bandas se formam para altos valores de frequências ($\omega/\Omega \rightarrow 18.5$). O modo de superfície, que é visível no final da primeira banda na Fig 3.10(a) ($q_x a \rightarrow 1.5$), desaparece na Fig 3.10(b). Na Fig 3.10(b), o início da primeira banda ($q_x a \rightarrow 0.0$) sofre um relativo aumento de tamanho para valores maiores de frequências e quando o valor de $q_x a$ aumenta notamos um grande aumento na inclinação das bandas. Para o espectro quasiperiódico mostrado para o mesmo intervalo de frequências na Fig 3.11(b), temos um número de bandas menor em relação à Fig 3.11(a). Podemos perceber ainda na Fig 3.11(a) uma nítida separação das bandas no mesmo intervalo de frequências em relação à Fig 3.11(b). O modo de superfície que é praticamente invisível no final da primeira banda na Fig 3.11(a) ($q_x a \rightarrow 1.5$) é bem perceptivo na Fig 3.11(b). Vemos ainda claramente um maior número de bandas no mesmo intervalo de frequência na Fig 3.12(a) em relação à Fig 3.12(b). Além disso há o surgimento de um modo de superfície entre as duas bandas de volume na Fig 3.12(b). Comparando as figuras 3.13(a) e 3.13(b) podemos observar para o mesmo intervalo de frequências a diminuição do número de bandas na Fig 3.13(b) em relação à Fig 3.13(a). Observamos também na Fig 3.13(b) um alto grau de afastamento no intervalo de frequências que vai de 1.0 a 2.5. Além da curvatura que é característica de todos os espectros, observa-se o surgimento de um modo de superfície no intervalo de frequências que vai de 1.75 a 2.5 em $q_x a = 1.0$.

As figuras 3.14(a) e 3.14(b) mostram a distribuição das larguras de bandas para $q_x a = 1.0$. Nela podemos observar as regiões de frequências permitidas e proibidas para a propagação dos fônons acústicos no volume, em função do número de geração N , até a sexta geração da seqüência de Fibonacci. Notamos claramente que a medida que avançamos

na geração da seqüência, as gerações de bandas permitidas se tornam mais e mais limitadas, com um aspecto típico de um conjunto de Cantor, indicando uma localização cada vez mais forte.

As figuras 3.15(a) e 3.15(b) são obtidas de 3.14(a) e 3.14(b) somando-se as larguras das regiões permitidas (ou bandas). Como havíamos discutido acima, a fractalidade é a assinatura de sistemas quasiperiódicos, e portanto possui uma lei de escala bem definida. Esta lei é obtida quando somamos as regiões de freqüências permitidas nas figuras 3.14(a) e 3.14(b), e se deve ao fato de nas figuras 3.14(a) e 3.14(b), o sistema se desfragmentar para altas gerações do número de Fibonacci, fazendo com que tal sistema convirja para um conjunto de Cantor. De fato esta soma, que representamos por Δ , escala de acordo com a lei de potência $\Delta \sim F_N^{-\delta}$, onde F_N é o número de Fibonacci e δ é um índice de escala, que é função de $q_x a$, e que pode ser interpretado como um tipo de coeficiente de difusão ou uma medida do grau de localização da excitação. Nas figuras 3.15(a) e 3.15(b) mostramos dois gráficos log-log para demonstrar esta lei de escala para três valores diferentes de $q_x a$, (para os materiais AlN e GaN) considerando a influência piezoelétrica.

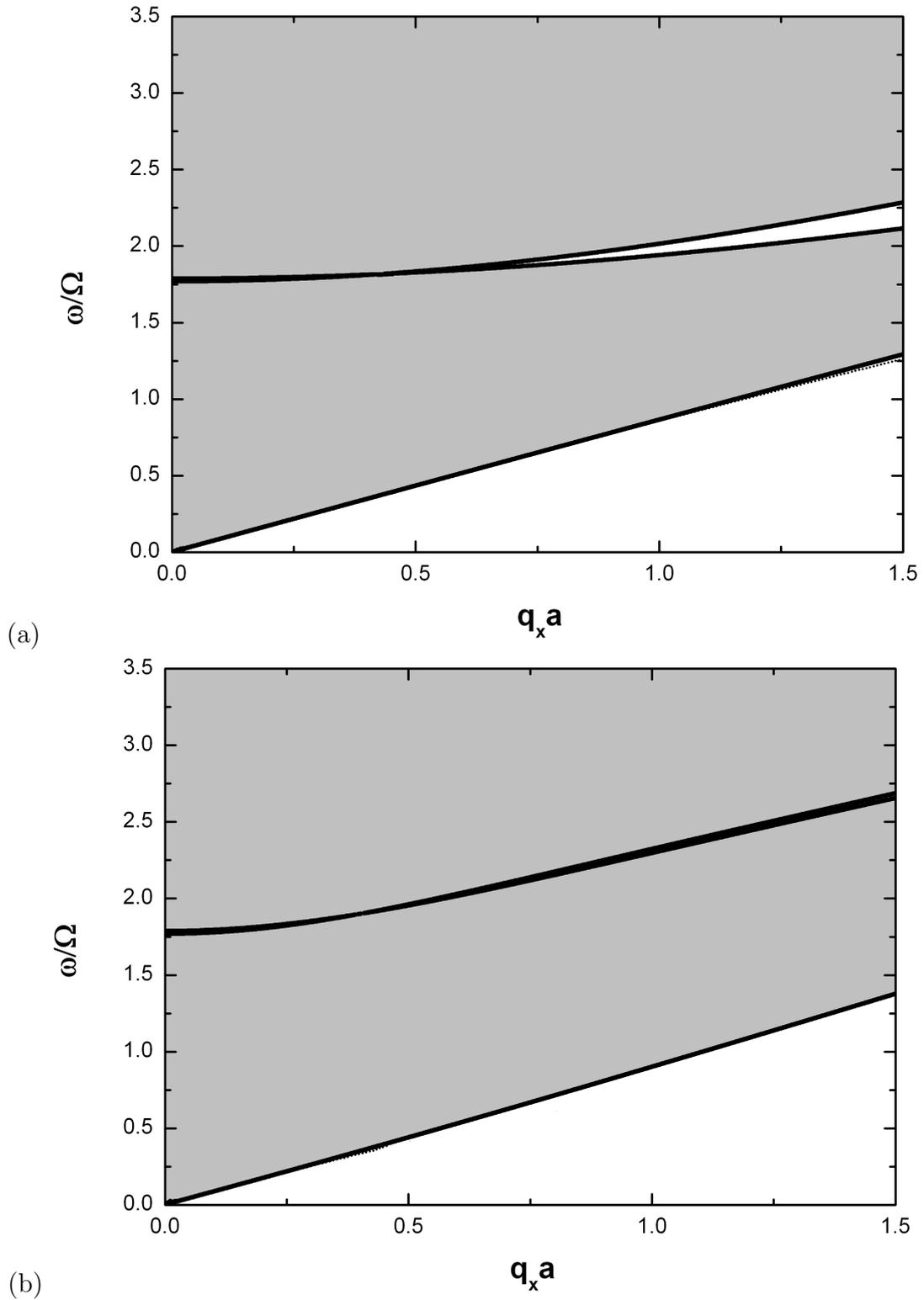
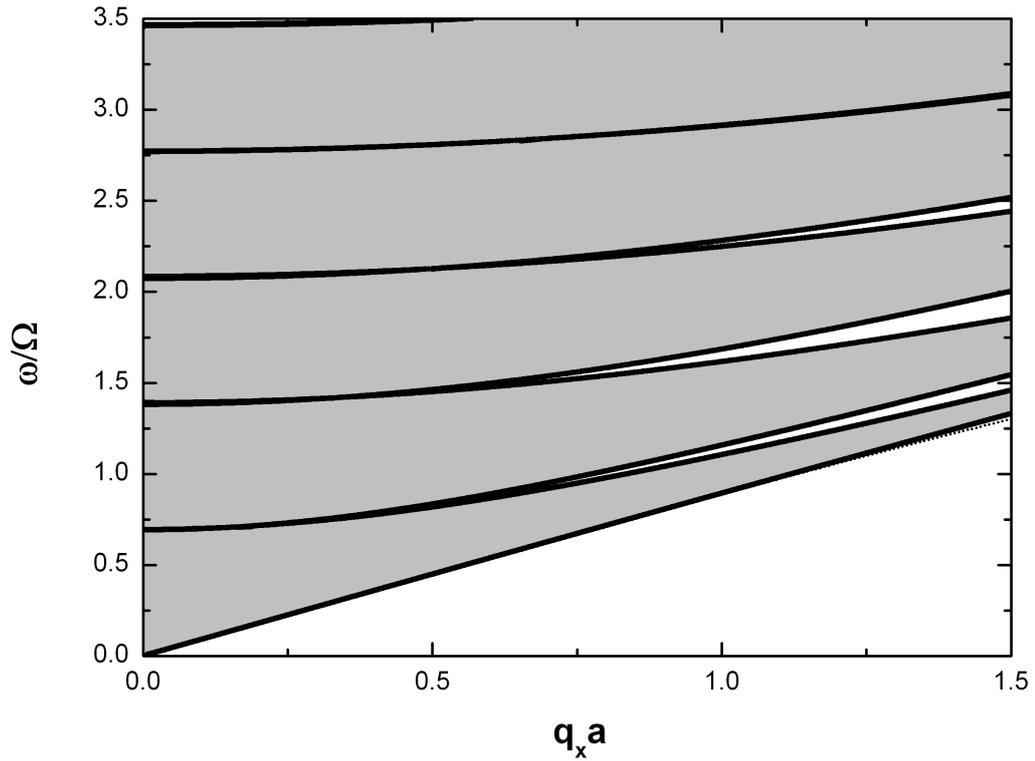
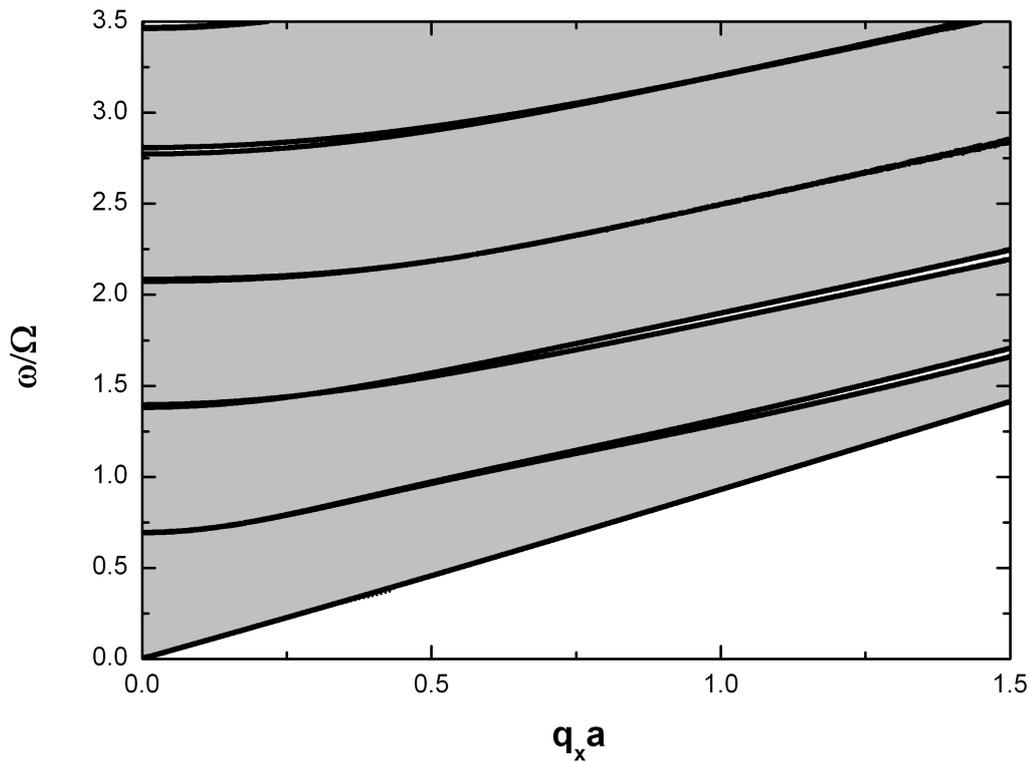


Figura 3.4: (a) Espectro de fônons acústicos para a simetria cúbica considerando a frequência reduzida ω/Ω versus $q_x a$, para uma super-rede periódica. Aqui usamos o nitreto de alumínio (AlN) desconsiderando a influência piezoelétrica (*strain*). (b) O mesmo que em (a), considerando a influência piezoelétrica.

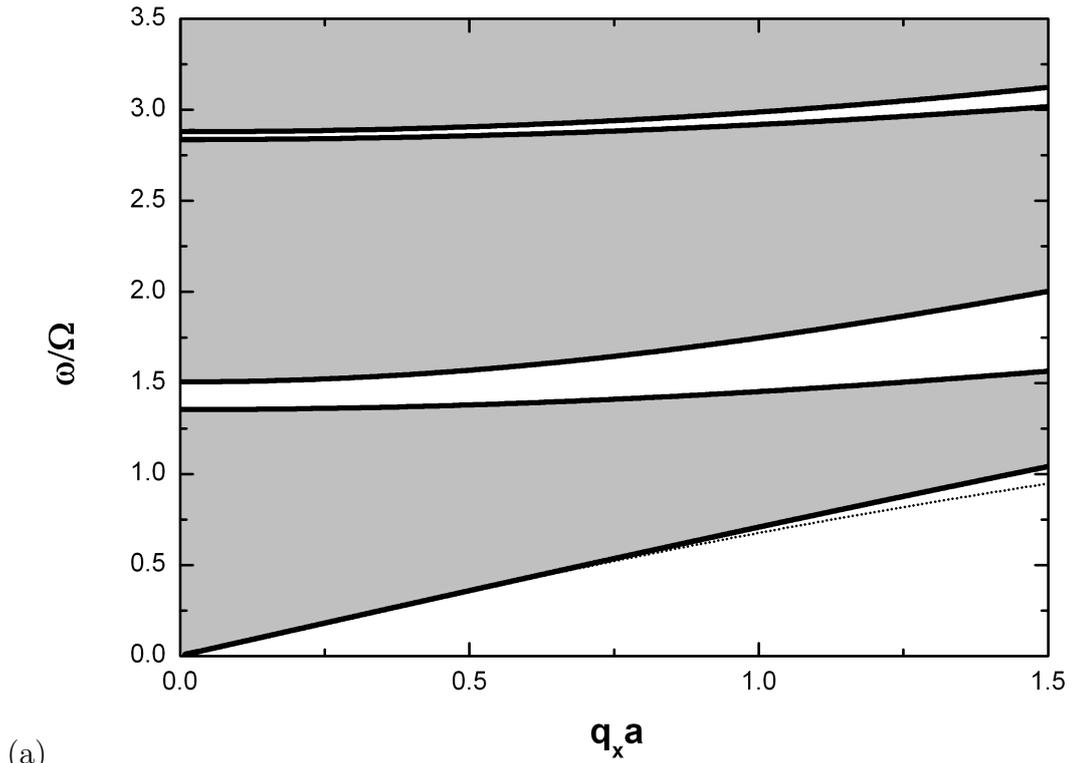


(a)

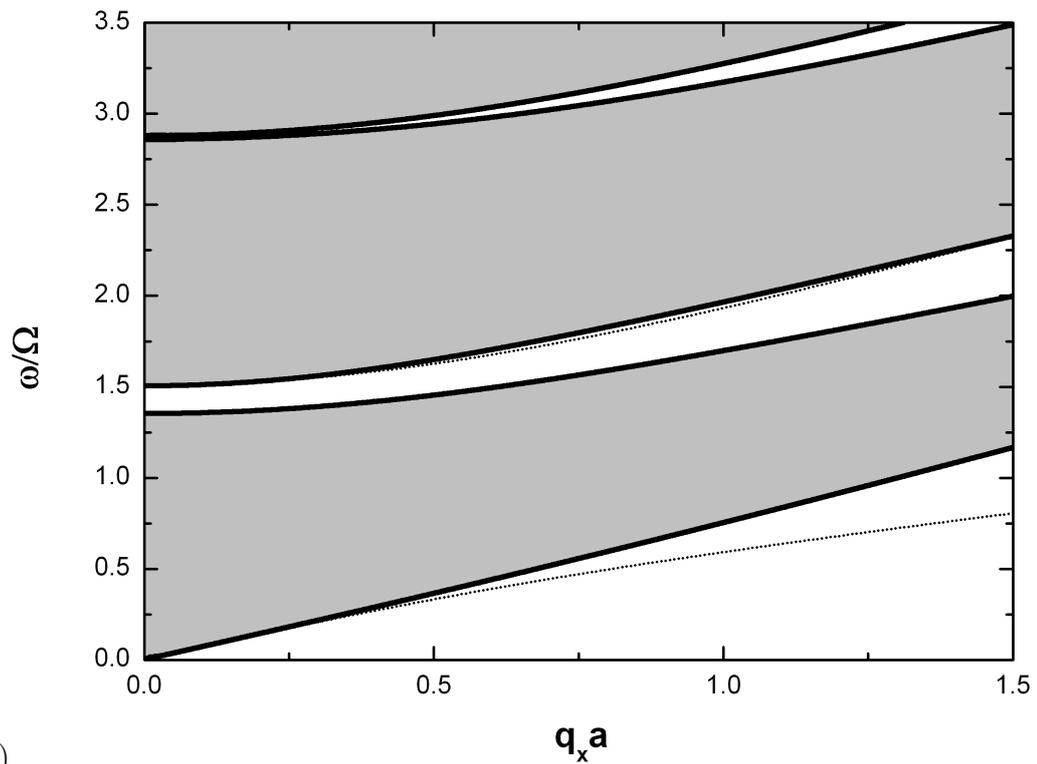


(b)

Figura 3.5: (a) Espectro de fônons acústicos para a simetria cúbica considerando a frequência reduzida ω/Ω versus $q_x a$, para uma super-rede de Fibonacci na quarta geração, desconsiderando a influência piezoelétrica. (b) O mesmo que em (a), considerando a influência piezoelétrica.



(a)



(b)

Figura 3.6: (a) Espectro de fônons acústicos para a simetria cúbica considerando a frequência reduzida ω/Ω versus $q_x a$, para uma super-rede periódica. Aqui usamos o nitreto GaN desconsiderando a influência piezoelétrica (*strain*). (b) O mesmo que em (a), considerando a influência piezoelétrica.

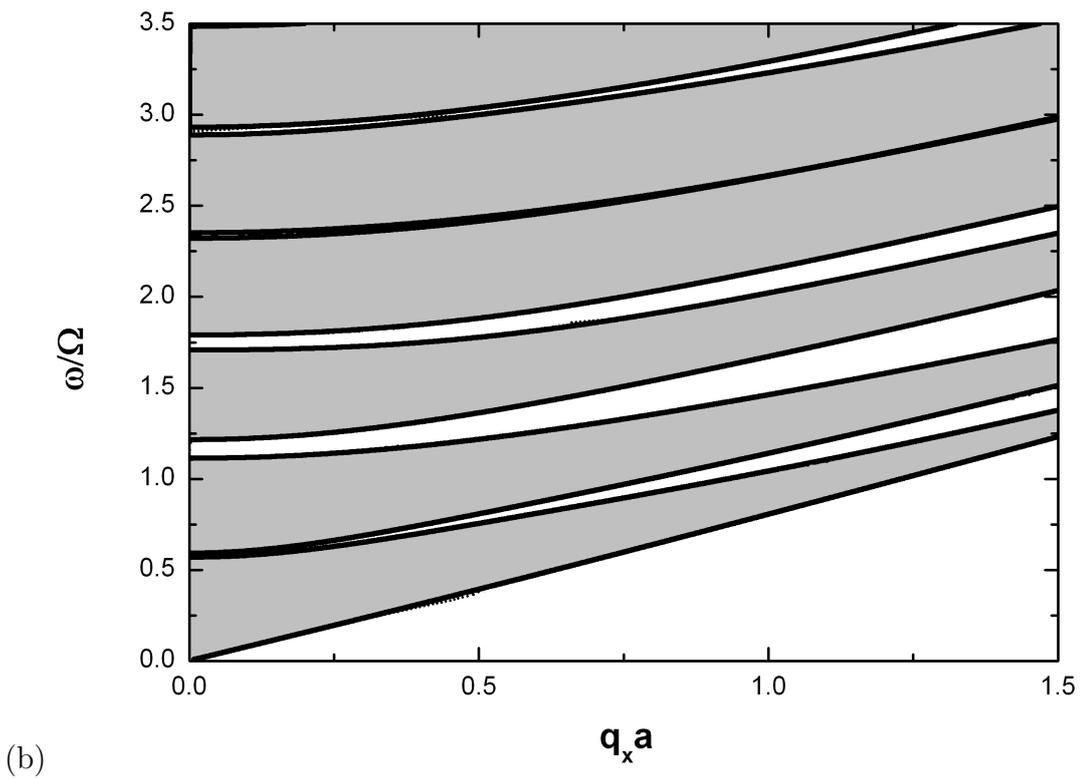
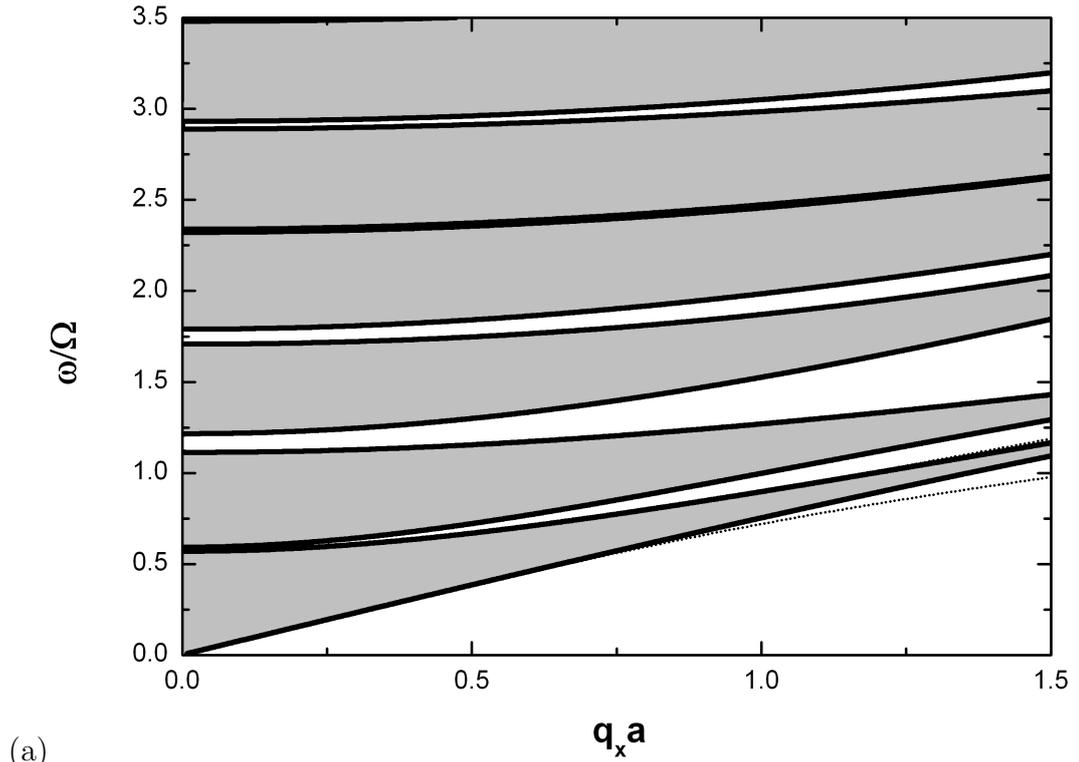
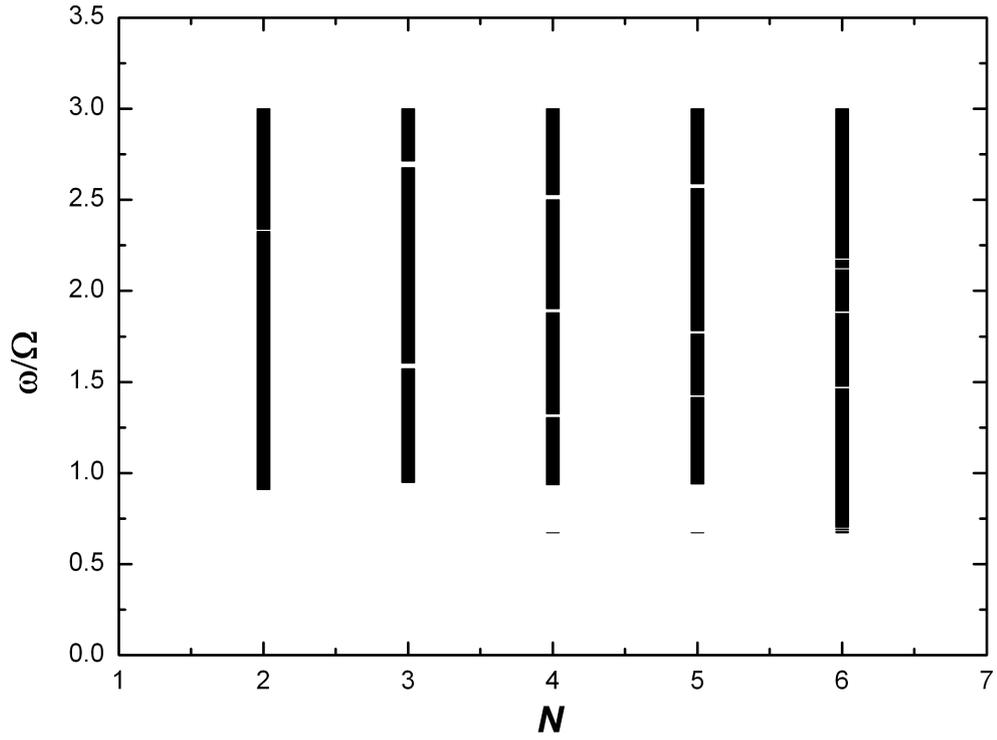
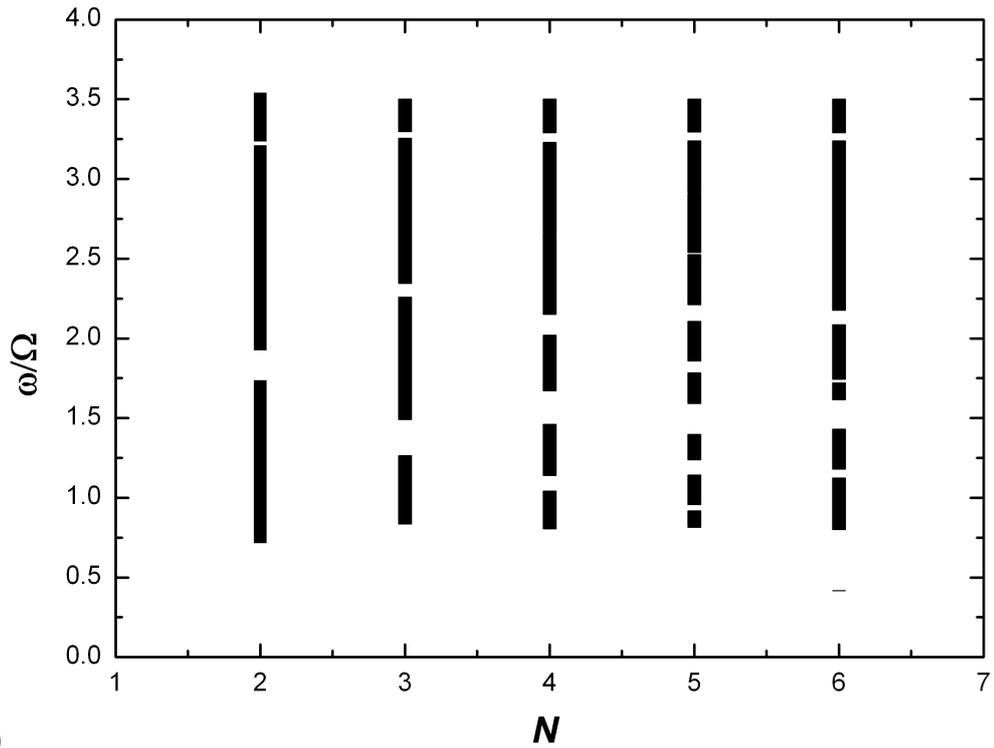


Figura 3.7: (a) Espectro de fônons acústicos para a simetria cúbica considerando a frequência reduzida ω/Ω versus $q_x a$, para uma super-rede de Fibonacci na quarta geração. Aqui usamos o nitreto GaN desconsiderando a influência piezoelétrica (*strain*). (b) O mesmo que em (a), considerando a influência piezoelétrica.

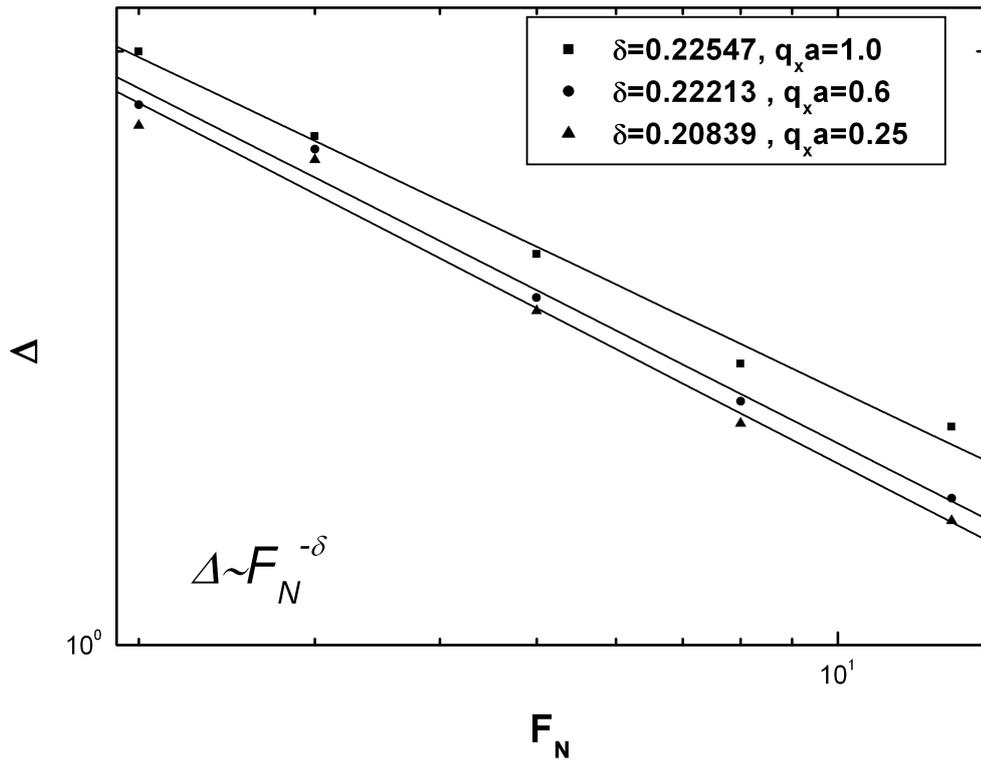


(a)

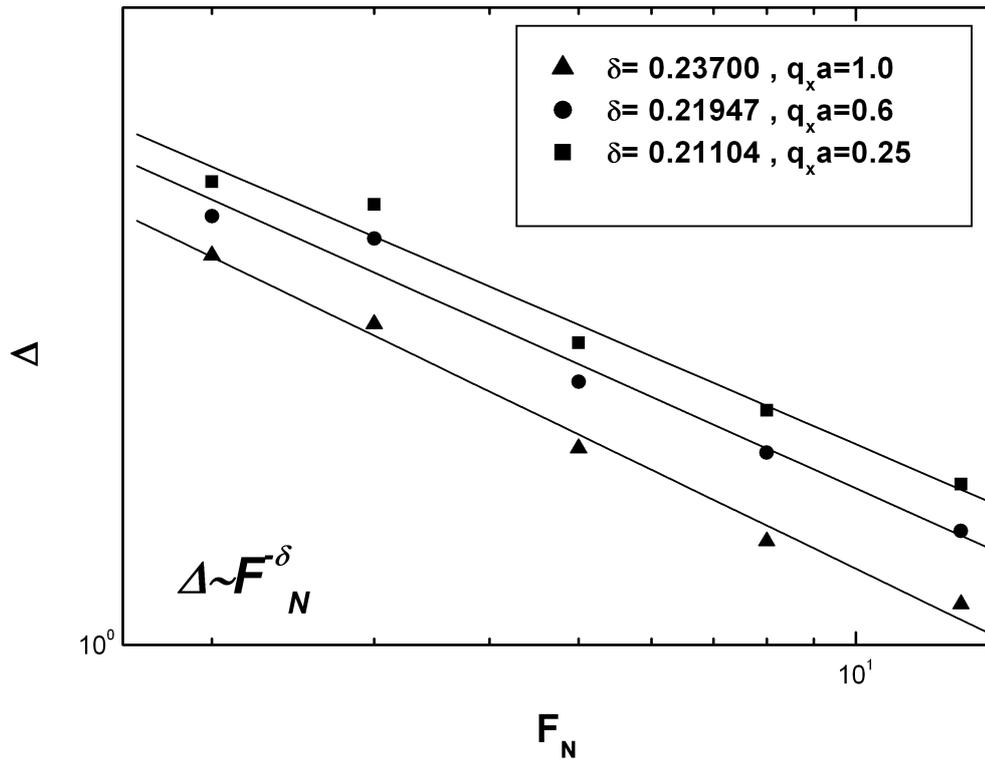


(b)

Figura 3.8: (a) Distribuição das larguras de bandas para os fônons acústicos em função do número de geração da estrutura de Fibonacci considerando a simetria cúbica do nitreto AlN ($q_x a = 1$). (b) Distribuição das larguras de bandas para os fônons acústicos em função do número de geração da estrutura de Fibonacci considerando a simetria cúbica do nitreto GaN ($q_x a = 1$).

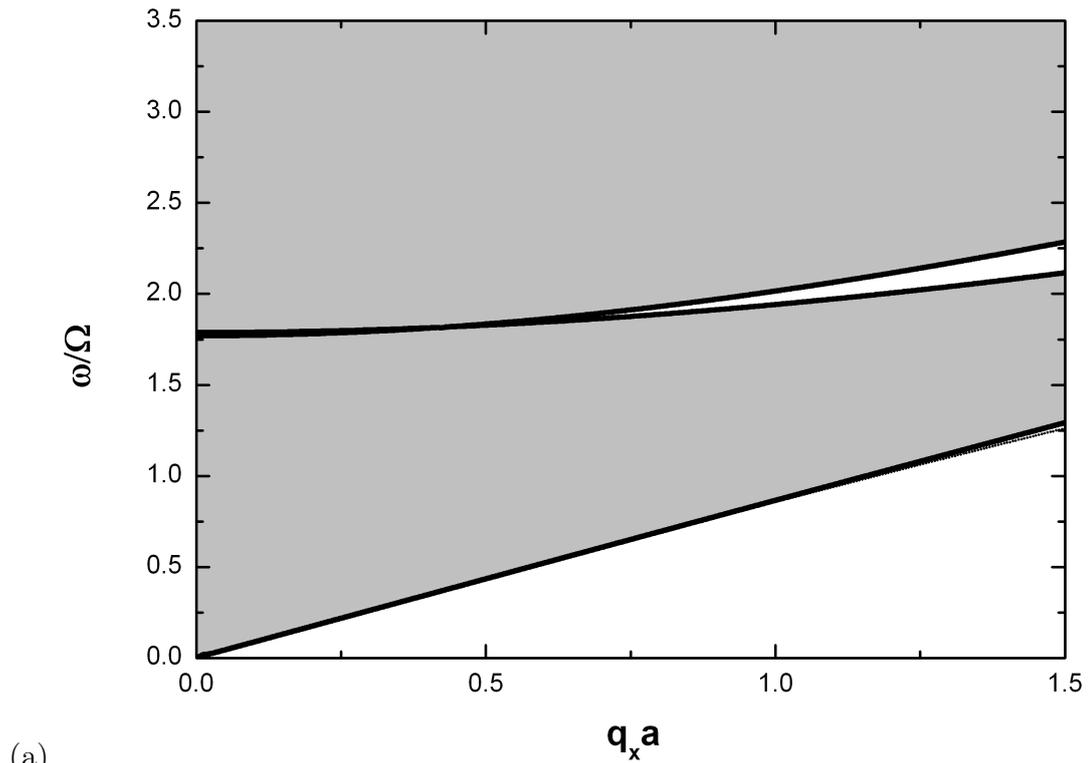


(a)

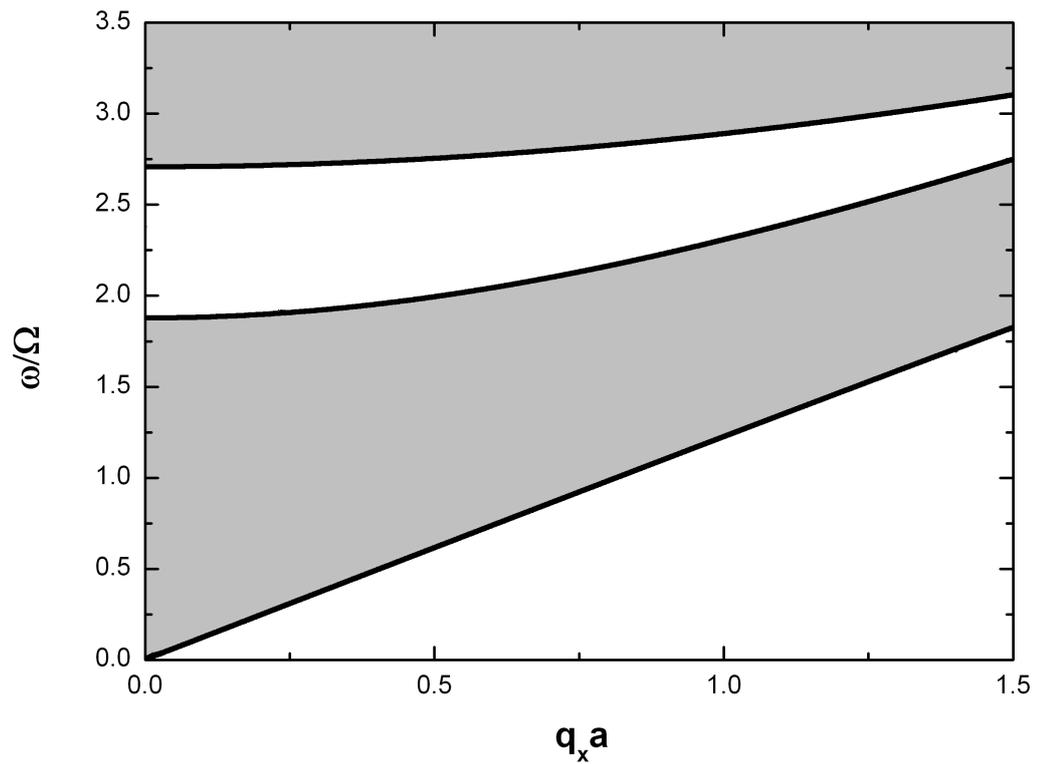


(b)

Figura 3.9: (a) Gráfico log-log para a largura total das regiões permitidas Δ versus o número de Fibonacci. Este gráfico é obtido para a simetria cúbica do nitreto AlN. (b) Gráfico log-log para a largura total das regiões permitidas Δ versus o número de Fibonacci. Este gráfico é obtido para a simetria cúbica do nitreto GaN. ⁵⁴



(a)



(b)

Figura 3.10: (a) Espectro de fônons acústicos para a simetria hexagonal considerando a frequência reduzida ω/Ω versus $q_x a$, para uma super-rede periódica. Aqui usamos o nitreto AlN desconsiderando a influência piezoelétrica (*strain*). (b) O mesmo que em (a), considerando a influência piezoelétrica.

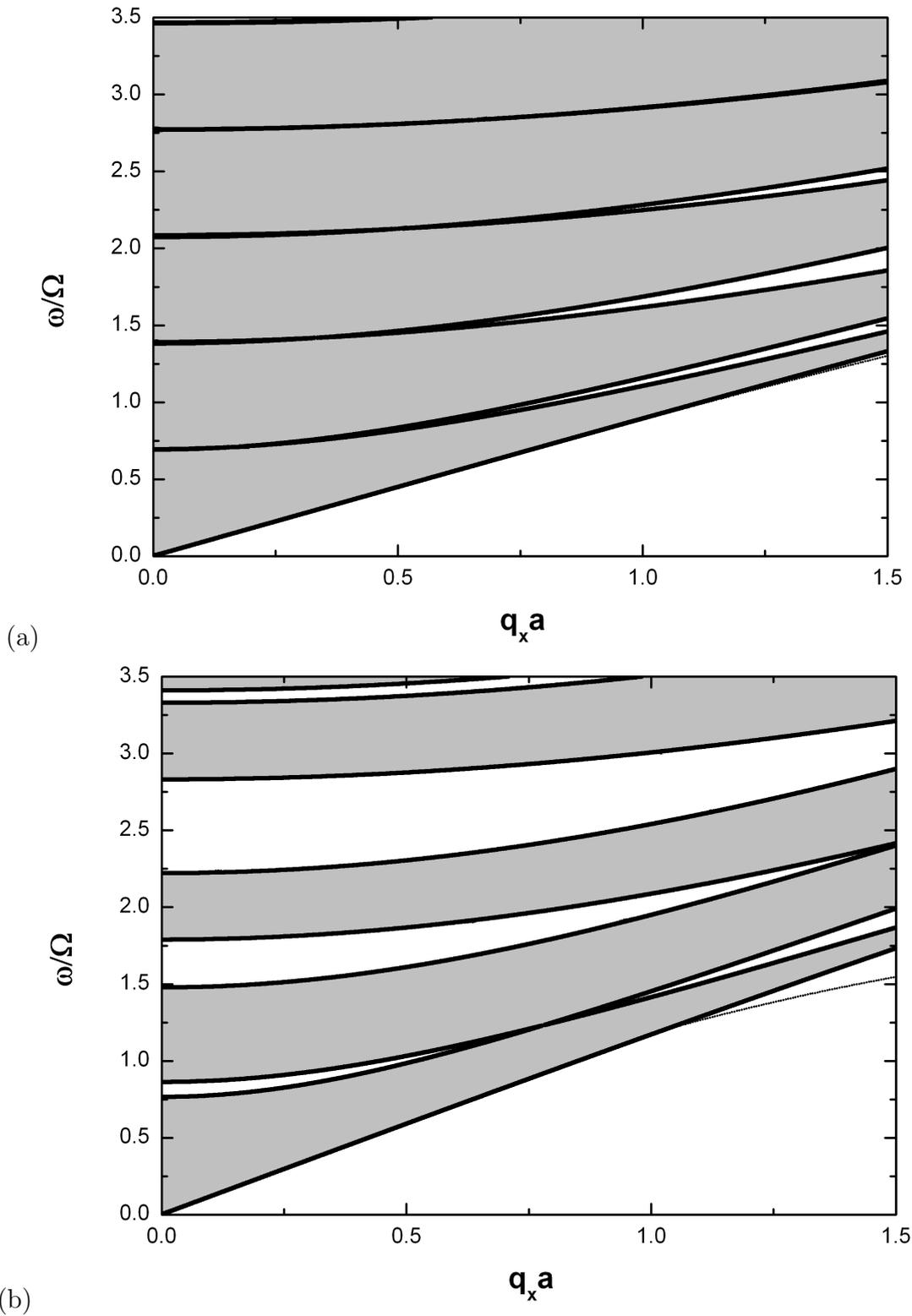
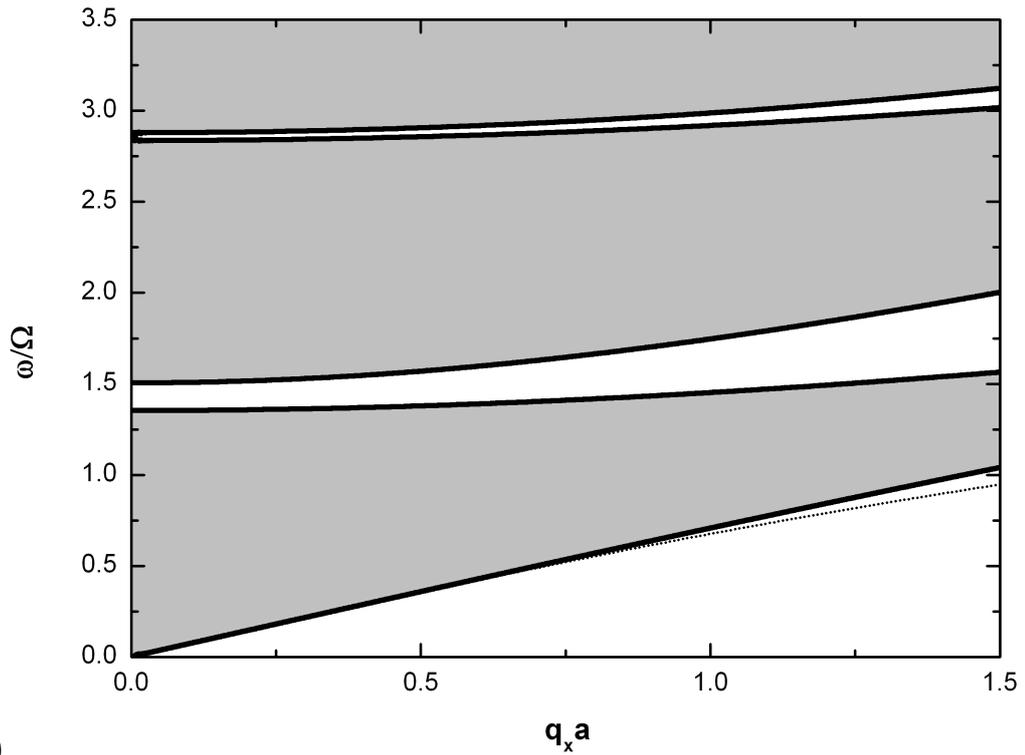
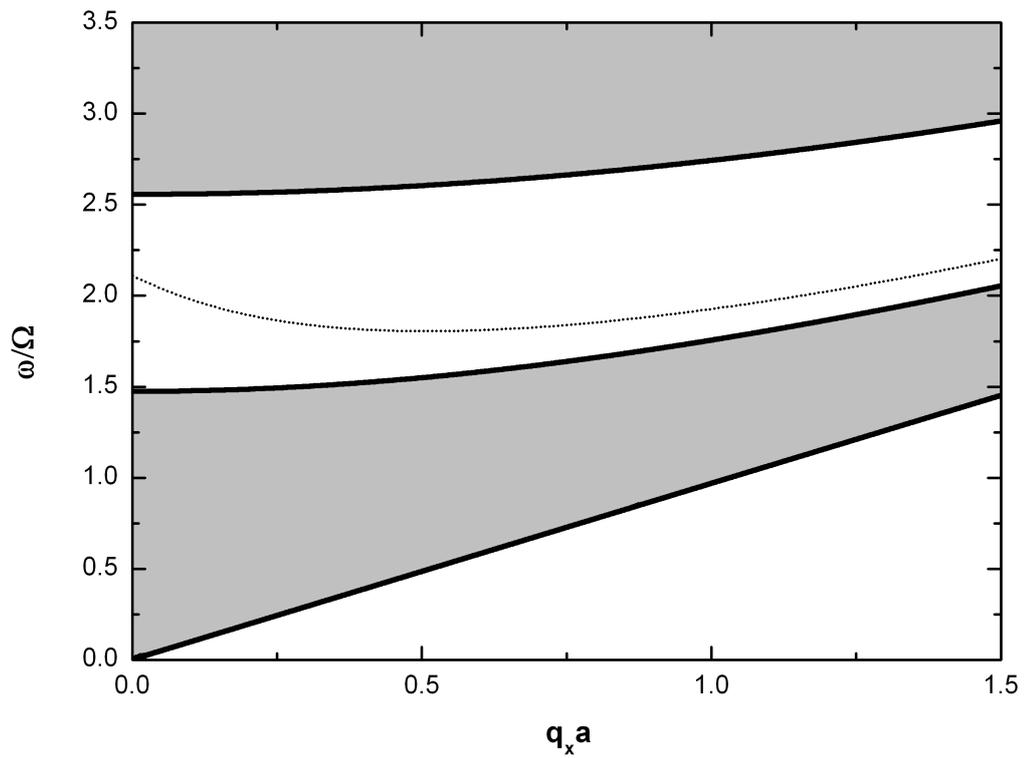


Figura 3.11: (a) Espectro de fônons acústicos para a simetria hexagonal considerando a frequência reduzida ω/Ω versus $q_x a$, para uma super-rede de Fibonacci na quarta geração, desconsiderando a influência piezoelétrica. (b) O mesmo que em (a), considerando a influência piezoelétrica.

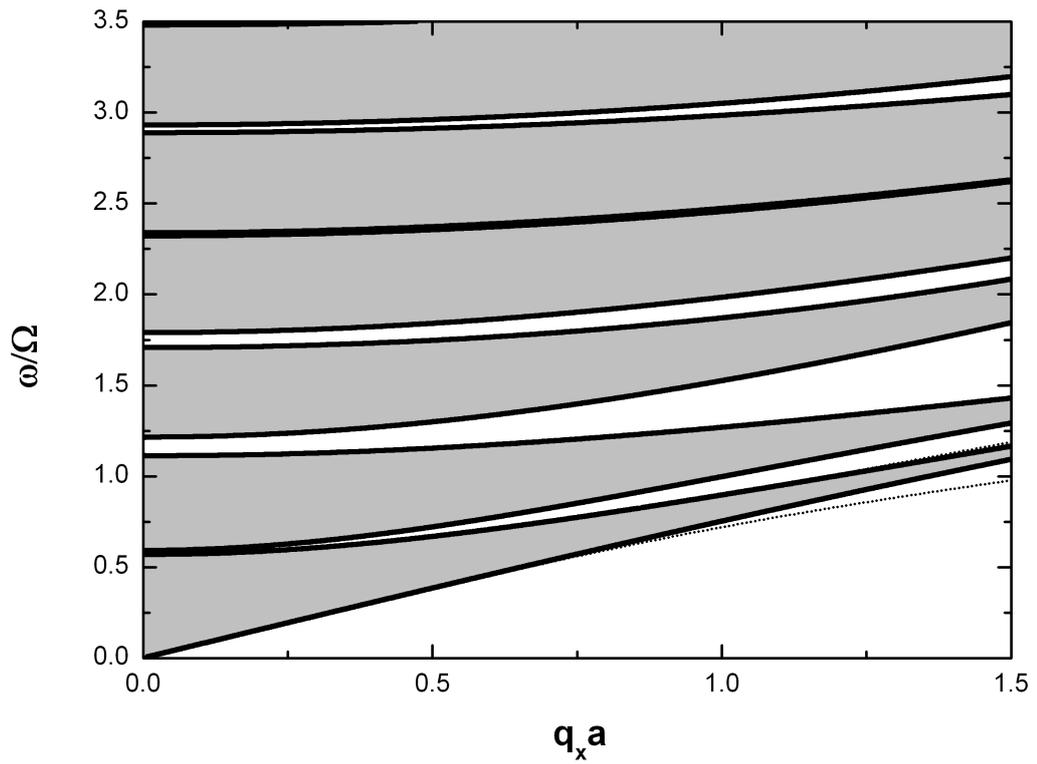


(a)

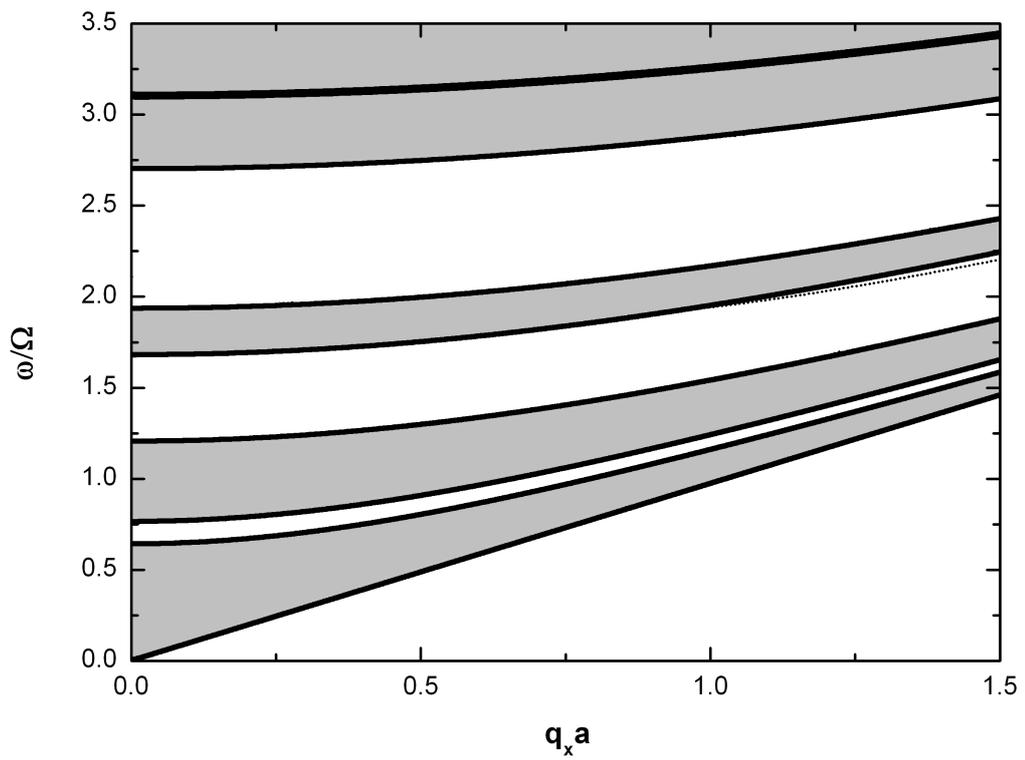


(b)

Figura 3.12: (a) Espectro de fônons acústicos para a simetria hexagonal considerando a frequência reduzida ω/Ω versus $q_x a$, para uma super-rede periódica. Aqui usamos o nitreto GaN desconsiderando a influência piezoelétrica (*strain*). (b) O mesmo que em (a), considerando a influência piezoelétrica.

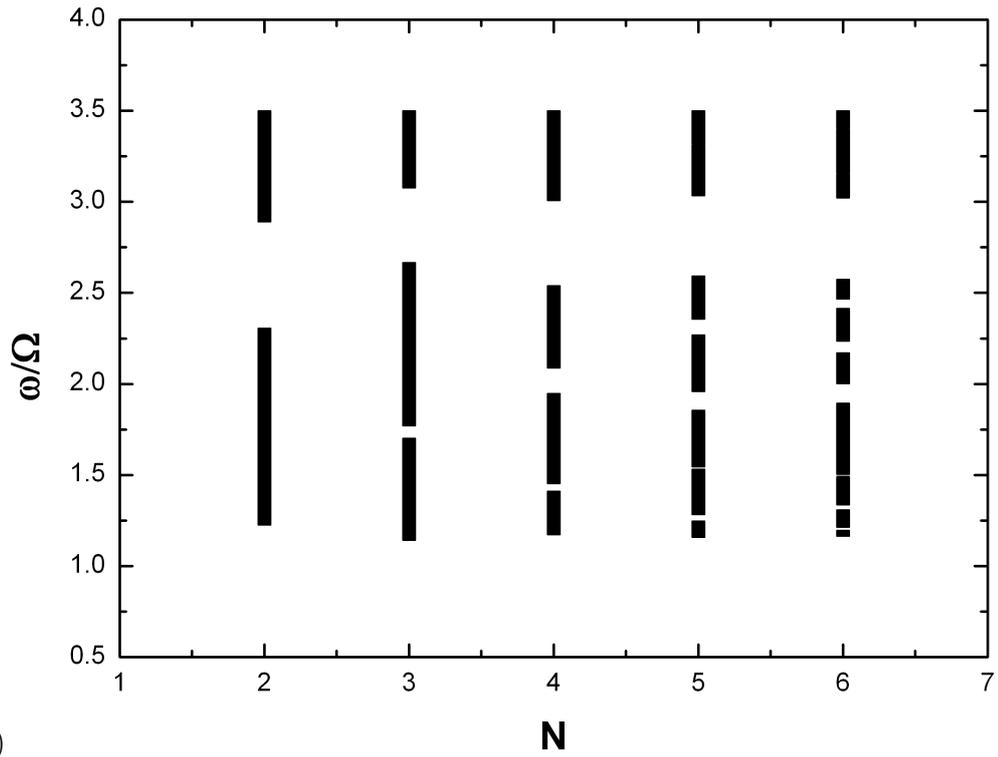


(a)

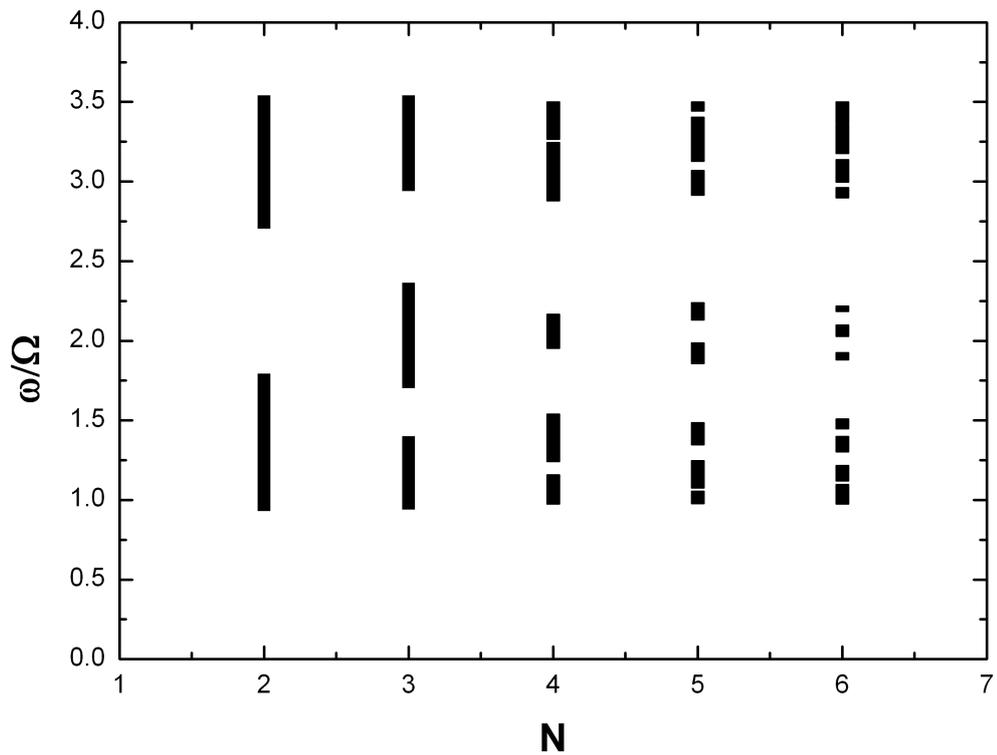


(b)

Figura 3.13: (a) Espectro de fônons acústicos para a simetria hexagonal considerando a frequência reduzida ω/Ω versus $q_x a$, para uma super-rede de Fibonacci na quarta geração. Aqui usamos o nitreto GaN desconsiderando a influência piezoelétrica (*strain*). (b) O mesmo que em (a), considerando a influência piezoelétrica.

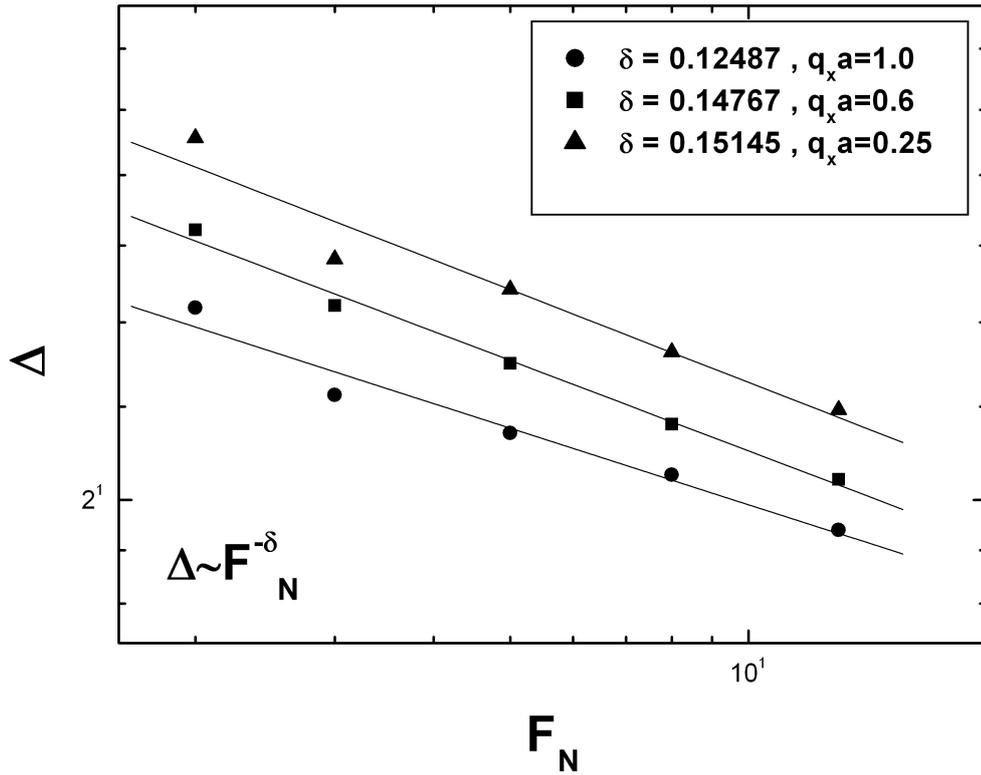


(a)

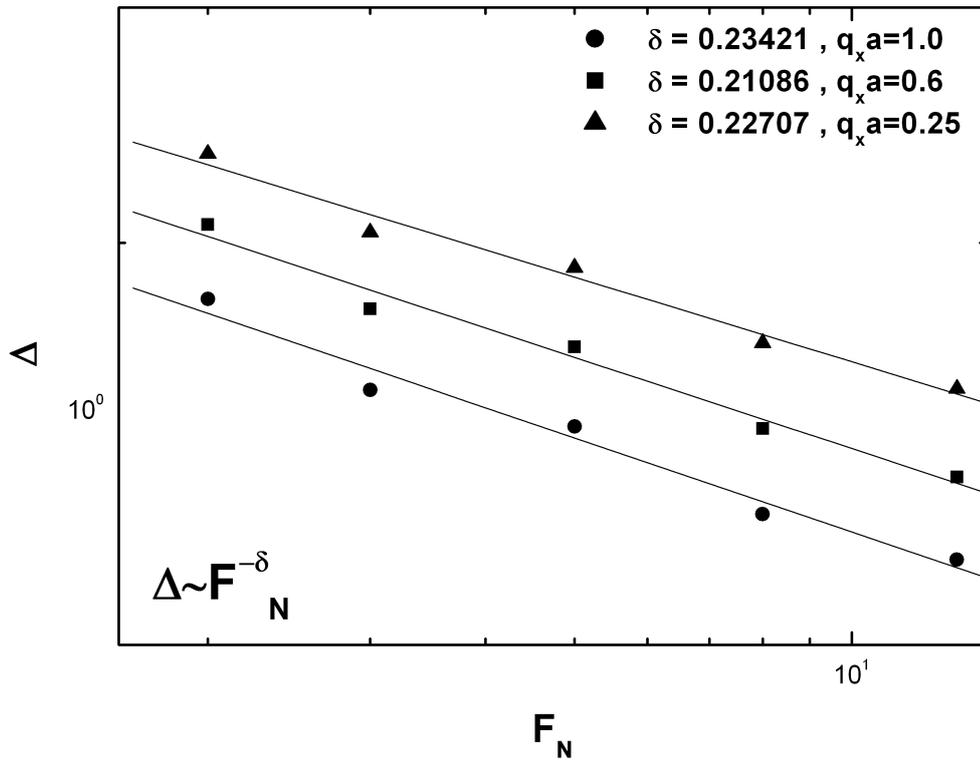


(b)

Figura 3.14: (a) Distribuição das larguras de bandas para os fônons acústicos em função do número de geração da estrutura de Fibonacci considerando a simetria hexagonal do nitreto AlN ($q_x a = 1$). (b) Distribuição das larguras de bandas para os fônons acústicos em função do número de geração da estrutura de Fibonacci considerando a simetria hexagonal do nitreto GaN ($q_x a = 1$).



(a)



(b)

Figura 3.15: (a) Gráfico log-log para a largura total das regiões permitidas Δ versus o número de Fibonacci. Este gráfico é obtido considerando a simetria hexagonal do nitreto AlN. (b) Gráfico log-log para a largura total das regiões permitidas Δ versus o número de Fibonacci. Este gráfico é obtido considerando a simetria hexagonal do nitreto GaN.

3.8 Conclusões

Neste capítulo apresentamos uma teoria geral para a propagação dos fônons acústicos confinados em super-redes periódicas e quasiperiódicas obedecendo à seqüência de Fibonacci levando-se em conta a influência piezoelétrica (*strain*) dos nitretos AlN e GaN envolvidos. Utilizamos o material isolante SiO₂ como um dos constituintes da super-rede. Além disso, consideramos as duas estruturas cristalinas dos nitretos a saber: cúbicas tipo *zinc-blende* e hexagonal tipo *würtzite*. O nosso resultado teórico fornece a relação de dispersão para os modos de volume e de superfície, encontrados no presente capítulo para os sistemas cúbico e hexagonal respectivamente. Com efeito, uma vez que a matriz transferência T foi obtida nos dois casos para a seqüência de Fibonacci, todo o espectro de geração foi obtido sem dificuldades.

Neste capítulo mostramos os espectros dos fônons acústicos confinados em estruturas cristalinas fonônicas cúbicas e hexagonais considerando o efeito piezoelétrico no sistema e comparando tais espectros com aqueles obtidos para o mesmo sistema sem a influência piezoelétrica. Fizemos ainda uma análise das leis de escala das bandas de volume do espectro de fônons acústicos nas super-redes periódicas e quasiperiódicas. Mostramos que a medida que o número da geração de cada seqüência aumenta, as bandas de volume se tornam mais e mais limitadas, indicando uma forte localização, e no limite $N \gg 1$ estas bandas formam um conjunto de Cantor. Além disso, a largura total de bandas permitidas, para um valor fixo de $q_x a$, obedece a uma lei de escala cujo expoente não possui dependência com $q_x a$. O comportamento deste expoente pode prontamente indentificar a seqüência quasiperiódica em questão, como também pode ser interpretado como uma medida da localização da excitação. Podemos ainda concluir que:

- a) Para o espectro dos fônons acústicos confinados nas estruturas cúbicas, observou-se uma acentuada curvatura dos espectros em relação aqueles sem *strain*, o que nos leva a concluir que as excitações sobre a influência piezoelétrica são confinadas com energias maiores em comparação com as excitações sem influência do *strain*.
- b) Para o espectro dos fônons acústicos confinados nas estruturas hexagonais, observou-se

além de uma acentuada curvatura dos espectros, um afastamento das bandas para maiores valores de frequências. Portanto as excitações neste tipo de estrutura são confinadas com valores ainda maiores de energia.

c) Podemos ainda observar neste capítulo, que o gráfico log-log obtido da soma das espessuras das bandas permitidas nos espectros de energia em função do número de Fibonacci tem uma característica linear. Sendo assim, podemos inferir que a influência piezoelétrica não “*quebra*” a fractalidade dos sistemas.

d) Desconsiderando a influência do strain, podemos observar que os espectros de bandas tanto para simetria cúbica como para hexagonal são os mesmos. Isto se deve porque em nossos cálculos consideramos apenas a função dielétrica transversal $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{zz}$ ou seja, estamos apenas considerando as propriedades no plano xy .

CAPÍTULO 4

Estudo do Espectro de Transmitância em Super-redes Fonônicas do tipo AlN/GaN

4.1 Introdução

O estudo dos cristais fonônicos, que são materiais compostos periódicos com espaçamentos comparáveis aos comprimentos de onda da onda acústica que se propaga pelo seu interior, recebeu crescente atenção na última década devido à construção de dispositivos acústicos eletrônicos aplicados a sistemas de comunicação modernos [66]. Eles oferecem um controle da propagação de ondas acústicas ou elásticas em escala com seus comprimentos de onda, sendo os análogos acústicos para os cristais fotônicos no estudo da óptica e no caso de ondas eletromagnéticas. Eles consistem de dois ou mais arranjos periódicos tridimensionais de materiais com diferentes constantes elásticas, podendo dar origem a absoluta inexistência de bandas devido as condições geométricas presentes na estrutura. Estes materiais compostos podem exibir várias propriedades físicas interessantes para os fônons acústicos, como a filtragem de ondas sonoras, construção de transformadores e sistemas acústicos [67].

Além disso, estas camadas compostas podem suportar novos tipos de ondas, com frequências dependentes não encontradas em substratos homogêneos, um assunto antigo em física do estado sólido [68]. Está claro, em substratos gerais, que em um modelo constituído de camadas alternadas com espessura a para um material A e espessura b para um material B, a periodicidade produz no limite da zona de Brillouin um vetor

de onda recíproco do tipo $Q = \pi/(a + b)$. Um efeito do limite da zona de Brillouin é que a curva de dispersão do fônon acústico torna-se dobrada em um zig-zag no interior da primeira zona, surgindo assim gaps de frequências na relação de dispersão do fônon, permitindo assim a ação de filtragem de fônons para cada intervalo de frequência nula (stop band). Como os valores típicos dos espaçamentos das camadas são da ordem de 20 nm, as extremidades da zona de Brillouin ocorrem a valores de $Q/2\pi = [2(a + b)]^{-1}$ em torno de 10^{-5} cm^{-1} , evidenciando que uma fração significativa da zona de Brillouin é acessível a técnica de espalhamento inelástico da luz. Entretanto, foram propostos recentemente cristais fonônicos hipersônicos para controlar a emissão e propagação de fônons de alta frequência usando litografia de interferência, cuja medida direta das estruturas de banda fonônicas é possível devido ao espalhamento da luz Brillouin [69].

Dispositivos fonônicos baseados em materiais piezoelétricos são extensivamente usados como filtros de rádio frequência em sistemas de telecomunicação: a integração dos “band gaps” fonônicos na estrutura para tais dispositivos aumentaria suas características bem como alargaria sua gama de aplicações. De um ponto de vista fundamental, os cristais fonônicos piezoelétricos permitem experimentos em que as fontes e os detectores de ondas acústicas podem ser embutidos com o próprio cristal fonônico [70]. A intensa anisotropia de propagação da onda acústica inerente ao material piezoelétrico, combinada com uma mistura das polarizações longitudinais e transversais, afeta fortemente a onda espalhada, abrindo assim uma nova perspectiva para a construção de uma geração de cristais fonônicos baseados em diversos processos de sinais acústicos. Por outro lado, os cristais quasiperiódicos formam um único tipo de estrutura com falta de simetria translacional de longo alcance mas possuindo uma certa ordem de orientação. Uma motivação para o estudo destas estruturas é que a sua ordem estrutural situa-se no limite entre a invariância translacional do cristal e sua estrutura randômica vítrea. Além disso, estes exibem um espectro de energia altamente fragmentado apresentando um padrão de auto-similaridade.

De fato, de uma perspectiva estritamente matemática, foi provado que estes espectros formam um conjunto de Cantor no limite termodinâmico. Recentemente, estados polariônicos em estruturas piezoelétricas quasiperiódicas de Fibonacci e Thue-Morse foram

investigadas, considerando-se a dinâmica das ondas eletromagnéticas e acústicas tratadas em condição de igualdade [71].

Neste capítulo investigaremos o espectro de transmissão do fônon acústico em estruturas de multicamadas compostas pela família III-V dos nitretos semicondutores AlN/GaN, onde o arranjo das camadas é feito de forma periódica e quasiperiódica de acordo com a seqüência de Fibonacci. Os nitretos III-V, como o GaN e AlN, exibem influentes campos de polarização piezoelétricos sob condições de stress e são de importância óbvia no estudo de diversos dispositivos piezoelétricos baseados nos nitretos e em estruturas de multicamadas [72]. Em particular, o conhecimento destas propriedades nos permite compreender o tratamento da polarização e dos campos elétricos resultantes de stress nas superredes compostas por nitretos. Estes podem cristalizar-se em duas estruturas cristalinas: hexagonal wurtzite ou cúbica zinc-blend [73].

Os cristais wurtzite tem uma diferente estrutura de célula unitária (quatro átomos por célula unitária com nove fônons ópticos e três fônons acústicos para um dado vetor de onda), bem como uma baixa simetria quando comparada com a estrutura cúbica zinc-blend, conduzindo a diferentes interações entre fônons e portadores. Embora avanços significantes no crescimento, dopagem e aplicações diversas dos nitretos do grupo III-V foram obtidos com a fase estável da estrutura hexagonal wurtzite [74], menos progresso foi alcançado por sua estrutura metaestável cúbica zinc-blend. Porém, dispositivos construídos levando-se em conta a estrutura zinc-blend são também importantes. Isto é particularmente verdade para o GaN devido a alta velocidade de arraste dos elétrons de saturação, facilmente divididos, e reduzidos nas bandas de energia [75, 76]. Espera-se também que os nitretos com simetria cúbica tenham uma alta mobilidade, devido a uma diminuição do número de fônons para uma alta simetria estrutural. Conseqüentemente, a informação das propriedades vibracionais de ambas as simetrias (hexágona e cúbica) são de grande interesse.

As estruturas hexagonais do tipo wurtzite são cristais uniaxiais com o eixo óptico coincidindo com o eixo z cartesiano, que é perpendicular aos hexágonos que formam o plano xy . É a estrutura com maior simetria compatível e sua polarização, como no caso da estrutura cúbica, possui um campo piezoelétrico induzido $\delta\vec{P}$ pela deformação (strain),

dado por [77]

$$\delta P_i = e_{ijk}s_{jk}, \quad (4.1)$$

o qual deverá ser considerado também a polarização espontânea no equilíbrio estrutural. Na expressão acima, bem como em todas as equações tensoriais vistas adiante, consideramos uma soma dos índices repetidos ijk que representam nada mais que as componentes cartesianas x, y, z . Além disso, e_{ijk} é o tensor piezoelétrico de terceira ordem, e s_{kl} , é tensor de deformação (strain), que é definido pela equação:

$$s_{jk} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial r_k} + \frac{\partial u_k}{\partial r_j} \right), \quad (4.2)$$

onde u_k é o deslocamento elástico presente ao longo dos eixos coordenados r_k . A presença dos componentes de polarização piezoelétricos sugere o uso de equações de continuidade mais simples

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial S_{ij}}{\partial r_j} \quad (4.3)$$

para a descrição da dinâmica do fônon acústico. Na equação (4.3), ρ é a densidade do material que no presente capítulo trata-se dos nitretos GaN e AlN, e S_{ij} é tensor de stress (gradiente de força por unidade de área), representado por $S_{ij} = C_{ijkl}s_{kl}$, onde C_{ijkl} é tensor elástico de quarta ordem. Empregamos neste capítulo a técnica da matriz transferência que simplifica bastante os cálculos, e também calculamos as expressões analíticas para o coeficiente de transmissão do fônon acústico na super-rede. Trabalhos anteriores neste assunto consideraram a estrutura de banda elástica [78] e o coeficiente de acoplamento eletromecânico das ondas acústicas de superfície [79] em um cristal fonônico bidimensional contendo material piezoelétrico.

4.2 Modelo Teórico para Simetria Hexagonal e Cúbica

Nesta seção utilizamos os fundamentos vistos no capítulo anterior, melhorando o nosso modelo, ou seja, nós consideramos o componente do tensor dielétrico $\varepsilon_{zz} \neq \varepsilon_{xx}$. Neste caso o conjunto de equações tensoriais (3.1) e (3.2) podem ser reescritas nas formas vistas abaixo para o meio elástico piezoelétrico fonônico (com simetria *hexagonal*):

$$-\rho\omega^2 u_y - C_{44} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} \right) - e_{x5} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) = 0, \quad (4.4)$$

$$e_{x5} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} \right) - \varepsilon_{xx} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \varepsilon_{zz} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0. \quad (4.5)$$

O nosso objetivo é encontrar as soluções deste conjunto de equações acopladas como visto no capítulo anterior, procuramos soluções do tipo onda plana nas formas:

$$u_j = \alpha_j \exp(ikz) \exp(iq_x x - i\omega t), \quad j = x, y, z \quad (4.6)$$

$$\phi = \alpha_4 \exp(ikz) \exp(iq_x x - i\omega t). \quad (4.7)$$

As soluções acima substituídas nas equações (4.4) e (4.5) nos fornece um novo sistema de equações acopladas:

$$-\rho\omega^2 u_y - C_{44} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} - q_x^2 u_y \right) - e_{x5} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} - q_x^2 \phi \right) = 0, \quad (4.8)$$

$$e_{x5} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} - q_x^2 u_y \right) - \varepsilon_{zz} \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + \varepsilon_{xx} q_x^2 \phi = 0. \quad (4.9)$$

Podemos organizar os termos em (4.8) e (4.9) para obter

$$\left(\frac{d^2 u_y}{dz^2} + q_{Tz}^2 u_y \right) + \frac{e_{x5}}{C_{44}} \left(\frac{d^2 \phi}{dz^2} - q_x^2 \phi \right) = 0 \quad (4.10)$$

$$-\frac{e_{x5}}{e_{zz}} \left(\frac{d^2 u_y}{dz^2} - q_x^2 u_y \right) + \left(\frac{d^2 \phi}{dz^2} - k_x^2 \phi \right) = 0 \quad (4.11)$$

onde

$$q_{Tz}^2 = \left(\frac{\omega}{v_T} \right)^2 - q_x^2, \quad (4.12)$$

e

$$k_x^2 = \frac{e_{zz}}{e_{xx}} q_x^2, \quad (4.13)$$

são respectivamente o componente z do vetor de onda com $v_T = \sqrt{C_{44}/\rho}$ sendo a velocidade transversal no meio considerado e k_x uma função do vetor de onda q_x .

Utilizando o sistema de equações (4.10) e (4.11) juntamente com a solução tipo onda plana (equações (4.6) e (4.7)) chegamos a uma relação matricial do tipo:

$$Ax = 0, \quad (4.14)$$

onde

$$A = \begin{pmatrix} [-k^2 + q_{Tz}^2] & \frac{e_{x5}}{C_{44}}[-k^2 - q_x^2] \\ -\frac{e_{x5}}{\varepsilon_{zz}}[-k^2 - q_x^2] & [-k^2 - k_x^2] \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

e

$$x = \begin{pmatrix} u_y \\ \phi \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

A solução não trivial de (4.14) é encontrada, quando o determinante da matriz A for igual a zero, ou seja,

$$\det(A) = 0, \quad (4.17)$$

esta operação nos leva a obter uma equação característica na seguinte forma:

$$[k^2 - q_{Tz}^2][k^2 + k_x^2] + p'[k^2 + q_x^2]^2 = 0, \quad (4.18)$$

onde

$$p = \frac{e_{x5}^2}{\varepsilon_{zz}C_{44}}. \quad (4.19)$$

O desenvolvimento algébrico da relação característica acarreta o surgimento de uma equação do tipo biquadrática:

$$k^4(1 + p') - k^2(q_{Tz}^2 - k_x^2 - 2q_x^2 p') + q_x^4 p' - k_x^2 q_{Tz}^2 = 0, \quad (4.20)$$

Esta equação biquadrática possui quatro soluções da forma:

$$k_1 = \pm \sqrt{k_+}, \quad (4.21)$$

$$k_2 = \pm \sqrt{k_-}, \quad (4.22)$$

e

$$k_{\pm} = \frac{(q_{Tz}^2 - k_x^2 - 2q_x^2 p') \pm \sqrt{\Delta}}{2(1 + p')}, \quad (4.23)$$

com

$$\Delta = (k_x^2 + q_{Tz}^2)^2 + 4p'(q_x^2 + q_{Tz}^2)(k_x^2 - q_x^2). \quad (4.24)$$

Com o intuito de obter as soluções para o potencial elétrico e para o deslocamento elástico no meio piezoelétrico fonônico, devemos substituir as soluções (4.21) e (4.22) na relação matricial (4.14) e escrever as soluções de ϕ e u_y (para o sistema com simetria hexagonal) como segue:

$$\phi = \frac{e_{x5}}{\varepsilon_{zz}} L(k_1) [B_1 \exp(ik_1 z) + B_2 \exp(-ik_1 z)] + B_3 \exp(ik_2 z) + B_4 \exp(-ik_2 z), \quad (4.25)$$

$$u_y = B_1 \exp(ik_1 z) + B_2 \exp(-ik_1 z) - \frac{e_{x5}}{C_{44}} L(k_2) [B_3 \exp(ik_2 z) + B_4 \exp(-ik_2 z)], \quad (4.26)$$

onde os fatores $L(k_1)$ e $L(k_2)$ são respectivamente escritos como:

$$L(k_1) = \frac{k_1^2 + q_x^2}{k_1^2 + k_x^2}, \quad (4.27)$$

$$L(k_2) = \frac{k_2^2 + q_x^2}{k_1^2 - q_{Tz}^2}. \quad (4.28)$$

Para o modelo cúbico não esboçaremos os cálculos, pois, estes são efetuados de maneira semelhante aos feitos no capítulo anterior, com a ressalva de que $\varepsilon_{xx} \neq \varepsilon_{zz}$. Assim, as soluções para o nosso modelo são (sistema cúbico):

$$\phi = \frac{e_{x4}}{\varepsilon_{zz}} L(k'_1) [B'_1 \exp(ik'_1 z) + B'_2 \exp(-ik'_1 z)] + B'_3 \exp(ik'_2 z) + B'_4 \exp(-ik'_2 z), \quad (4.29)$$

$$u_y = L(k'_1)[B'_1 \exp(ik'_1 z) - B'_2 \exp(-ik'_1 z)] + \frac{L(k'_2)}{p'_2}[B'_3 \exp(ik'_2 z) - B'_4 \exp(-ik'_2 z)], \quad (4.30)$$

onde

$$L(k'_i) = \frac{k_i'^3 + k_i' q_x^2 \left(\frac{\varepsilon_{xx}}{\varepsilon_{zz}} + 4p' \right)}{2q_x q_{Tz}^2}. \quad (4.31)$$

Note que o índice i assume os valores (1, 2) e de forma análoga ao sistema hexagonal, resolvemos uma equação do tipo biquadrática cujas soluções são do tipo:

$$k'_1 = \pm \sqrt{k'_+}, \quad (4.32)$$

$$k'_2 = \pm \sqrt{k'_-}, \quad (4.33)$$

e

$$k'_\pm = \frac{(q_{Tz}^2 - k_x^2 - 4q_x^2 p') \pm \sqrt{\Delta'}}{2}, \quad (4.34)$$

com

$$\Delta' = (q_{Tz}^2 + k_x^2)^2 + 8q_x^2 p' (k_x^2 + 2q_x^2 - q_{Tz}^2). \quad (4.35)$$

Nas equações apresentadas para o sistema cúbico os termos p' , p'_1 e p'_2 são obtidos de p , p_1 e p_2 pela simples troca das componentes e_{x5} por e_{x4} . Observe que todas as soluções e equações do capítulo anterior são recuperadas no limite em que $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{zz}$

4.3 Cálculo da Matriz Transferência para o modelo Hexagonal e Cúbico

De maneira idêntica ao capítulo anterior, podemos aplicar as condições de contorno elásticas e eletromagnéticas nas duas interfaces da n -ésima célula unitária, isto é, nas interfaces $z = nL + a$ e $z = (n + 1)L$ da Fig. 3.2, sendo L a espessura da célula unitária. Assumimos agora $\alpha = \text{AlN}$, $\beta = \text{GaN}$. Para a simetria hexagonal teremos:

(a) Continuidade do deslocamento transversal u_y :

$$\begin{aligned} A_1^n f_{1a} + A_2^n \bar{f}_{1a} - p_{1a} L_{2a} A_3^n f_{2a} - p_{1a} L_{2a} A_4^n \bar{f}_{2a} = \\ B_1^n + B_2^n - p_{1b} L_{2b} B_3^n - p_{1b} L_{2b} B_4^n, \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned} A_1^{n+1} + A_2^{n+1} - p_{1a} L_{2a} A_3^{n+1} - p_{1a} L_{2a} A_4^{n+1} = \\ B_1^n f_{1b} + B_2^n \bar{f}_{1b} - p_{1b} L_{2b} B_3^n f_{2b} - p_{1b} L_{2b} B_4^n \bar{f}_{2b}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

(b) Continuidade do potencial elétrico ϕ :

$$\begin{aligned} p_{2a} L_{1a} (A_1^n f_{1a} + A_2^n \bar{f}_{1a}) + A_3^n f_{2a} + A_4^n \bar{f}_{2a} = \\ p_{2b} L_{1b} (B_1^n + B_2^n) + B_3^n + B_4^n, \end{aligned} \quad (4.38)$$

$$\begin{aligned} p_{2a} L_{1a} (A_1^{n+1} + A_2^{n+1}) + A_3^{n+1} + A_4^{n+1} = \\ p_{2b} L_{1b} (B_1^n f_{1b} + B_2^n \bar{f}_{1b}) + B_3^n f_{2b} + B_4^n \bar{f}_{2b}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

(c) Continuidade do tensor de *stress* transversal S_{32} :

$$\begin{aligned} uk_{1a} \Gamma_{1a} [A_1^n f_{1a} - A_2^n \bar{f}_{1a}] + p_{1a} uk_{2a} \beta_{2a} [A_3^n f_{2a} - A_4^n \bar{f}_{2a}] = \\ k_{1b} \Gamma_{1b} [B_1^n - B_2^n] + p_{1b} k_{2b} \beta_{2b} [B_3^n - B_4^n], \end{aligned} \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} uk_{1a} \Gamma_{1a} [A_1^{n+1} - A_2^{n+1}] + p_{1a} uk_{2a} \beta_{2a} [A_3^{n+1} - A_4^{n+1}] = \\ k_{1b} \Gamma_{1b} [B_1^n f_{1b} - B_2^n \bar{f}_{1b}] + p_{1b} k_{2b} \beta_{2b} [B_3^n f_{2b} - B_4^n \bar{f}_{2b}]. \end{aligned} \quad (4.41)$$

(d) Continuidade da componente normal do deslocamento elétrico D_z :

$$\begin{aligned} p_{2a} \frac{k_{1a}}{k_{2b}} \alpha_{1a} [A_1^n f_{1a} - A_2^n \bar{f}_{1a}] + \frac{k_{2a}}{k_{2b}} \Gamma_{2a} [A_3^n f_{2a} - A_4^n \bar{f}_{2a}] = \\ p_{2b} \frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}} \frac{k_{1b}}{k_{2b}} \alpha_{1b} [B_1^n - B_2^n] + \frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}} \Gamma_{2b} [B_3^n - B_4^n], \end{aligned} \quad (4.42)$$

$$\begin{aligned} p_{2a} \frac{k_{1a}}{k_{2b}} \alpha_{1a} [A_1^{n+1} - A_2^{n+1}] + \frac{k_{2a}}{k_{2b}} \Gamma_{2a} [A_3^{n+1} - A_4^{n+1}] = \\ p_{2b} \frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}} \frac{k_{1b}}{k_{2b}} \alpha_{1b} [B_1^n f_{1b} - B_2^n \bar{f}_{1b}] + \frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}} \Gamma_{2b} [B_3^n f_{2b} - B_4^n \bar{f}_{2b}]. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Nas equações acima usamos os termos:

$$p_a = \frac{e_{x5a}^2}{C_{44a} \varepsilon_{zza}}, \quad (4.44)$$

$$p_b = \frac{e_{x5b}^2}{C_{44b} \varepsilon_{zzb}}, \quad (4.45)$$

$$u = C_{44a} / C_{44b}, \quad (4.46)$$

$$p_{1a} = \frac{e_{x5a}}{C_{44a}}, \quad (4.47)$$

$$p_{2a} = \frac{e_{x5a}}{\varepsilon_{zza}}, \quad (4.48)$$

$$p_{2b} = \frac{e_{x5b}}{\varepsilon_{zzb}}, \quad (4.49)$$

$$p_{1b} = \frac{e_{x5b}}{C_{44b}}, \quad (4.50)$$

$$f_{1a} = \exp(ik_{1a}a), \quad (4.51)$$

$$f_{2a} = \exp(ik_{2a}a), \quad (4.52)$$

$$f_{1b} = \exp(ik_{1b}b), \quad (4.53)$$

$$f_{2b} = \exp(ik_{2b}b), \quad (4.54)$$

$$\bar{f}_{1a} = \exp(-ik_{1a}a), \quad (4.55)$$

$$\bar{f}_{2a} = \exp(-ik_{2a}a), \quad (4.56)$$

$$\bar{f}_{1b} = \exp(-ik_{1b}b), \quad (4.57)$$

$$\bar{f}_{2b} = \exp(-ik_{2b}b), \quad (4.58)$$

$$\Gamma_{1a} = 1 + p_a L_{1a}, \quad (4.59)$$

$$\Gamma_{1b} = 1 + p_b L_{1b}, \quad (4.60)$$

$$\Gamma_{2a} = 1 + p_a L_{2a}, \quad (4.61)$$

$$\Gamma_{2b} = 1 + p_b L_{2b}, \quad (4.62)$$

$$\beta_{2a} = 1 - L_{2a}, \quad (4.63)$$

$$\beta_{2b} = 1 - L_{2b}, \quad (4.64)$$

$$\alpha_{1a} = L_{1a} - 1, \quad (4.65)$$

$$\alpha_{1b} = L_{1b} - 1, \quad (4.66)$$

onde nas equações, os termos a e b denotam as camadas $\alpha = \text{AlN}$ e $\beta = \text{GaN}$ respectivamente.

Definindo, como no capítulo anterior, os kets $|A^{(n)}\rangle$ e $|B^{(n)}\rangle$ e usando respectivamente as equações (4.36), (4.38), (4.40) e (4.42), podemos construir uma equação matricial da forma:

$$M_1 |A^{(n)}\rangle = N_1 |B^{(n)}\rangle, \quad (4.67)$$

onde

$$M_1 = \begin{pmatrix} f_{1a} & \bar{f}_{1a} & -p_{1a} L_{2a} f_{2a} & -p_{1a} L_{2a} \bar{f}_{2a} \\ uk_{1a} \Gamma_{1a} f_{1a} & -uk_{1a} \Gamma_{1a} \bar{f}_{1a} & up_{1a} k_{2a} \beta_{2a} f_{2a} & -up_{1a} k_{2a} \beta_{2a} \bar{f}_{2a} \\ p_{2a} L_{2a} f_{1a} & p_{2a} L_{2a} \bar{f}_{1a} & f_{2a} & \bar{f}_{2a} \\ p_{2a} \frac{k_{1a}}{k_{2b}} \alpha_{1a} f_{1a} & -p_{2a} \frac{k_{1a}}{k_{2b}} \alpha_{1a} \bar{f}_{1a} & \frac{k_{2a}}{k_{2b}} \Gamma_{2a} f_{2a} & -\frac{k_{2a}}{k_{2b}} \Gamma_{2a} \bar{f}_{2a} \end{pmatrix}, \quad (4.68)$$

e

$$N_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -p_{1b} L_{2b} & -p_{1b} L_{2b} \\ k_{1b} \Gamma_{1b} & -k_{1b} \Gamma_{1b} & p_{1b} k_{2b} \beta_{2b} & -p_{1b} k_{2b} \beta_{2b} \\ p_{2b} L_{1b} & p_{2b} L_{1b} & 1 & 1 \\ p_{2b} \frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}} \frac{k_{1b}}{k_{2b}} \alpha_{1b} & -p_{2b} \frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}} \frac{k_{1b}}{k_{2b}} \alpha_{1b} & \frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}} \Gamma_{2b} & -\frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}} \Gamma_{2b} \end{pmatrix}, \quad (4.69)$$

De maneira análoga, as equações (4.37), (4.39), (4.41) e (4.43) podem ser escritas na forma:

$$M_2|A^{(n+1)}\rangle = N_2|B^{(n)}\rangle, \quad (4.70)$$

onde

$$M_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -p_{1a}L_{2a} & -p_{1a}L_{2a} \\ uk_{1a}\Gamma_{1a} & -uk_{1a}\Gamma_{1a} & up_{1a}k_{2a}\beta_{2a} & -up_{1a}k_{2a}\beta_{2a} \\ p_{2a}L_{2a} & p_{2a}L_{2a} & 1 & 1 \\ p_{2a}\frac{k_{1a}}{k_{2b}}\alpha_{1a} & -p_{2a}\frac{k_{1a}}{k_{2b}}\alpha_{1a} & \frac{k_{2a}}{k_{2b}}\Gamma_{2a} & -\frac{k_{2a}}{k_{2b}}\Gamma_{2a} \end{pmatrix}, \quad (4.71)$$

e

$$N_2 = \begin{pmatrix} f_{1b} & \bar{f}_{1b} & -p_{1b}L_{2b}f_{2b} & -p_{1b}L_{2b}\bar{f}_{2b} \\ k_{1b}\Gamma_{1b}f_{1b} & -k_{1b}\Gamma_{1b}\bar{f}_{1b} & p_{1b}k_{2b}\beta_{2b}f_{2b} & -p_{1b}k_{2b}\beta_{2b}\bar{f}_{2b} \\ p_{2b}L_{1b}f_{1b} & p_{2b}L_{1b}\bar{f}_{1b} & f_{2b} & \bar{f}_{2b} \\ p_{2b}\frac{\epsilon_{zzb}}{\epsilon_{zza}}\frac{k_{1b}}{k_{2b}}\alpha_{1b}f_{1b} & -p_{2b}\frac{\epsilon_{zzb}}{\epsilon_{zza}}\frac{k_{1b}}{k_{2b}}\alpha_{1b}\bar{f}_{1b} & \frac{\epsilon_{zzb}}{\epsilon_{zza}}\Gamma_{2b}f_{2b} & -\frac{\epsilon_{zzb}}{\epsilon_{zza}}\Gamma_{2b}\bar{f}_{2b} \end{pmatrix}, \quad (4.72)$$

Aqui M_j e N_j ($j = 1, 2$), são matrizes 4×4 obtidas das condições de contorno.

Usando-se as equações (4.67) e (4.70), encontraremos

$$|A^{(n+1)}\rangle = T|A^{(n)}\rangle, \quad (4.73)$$

onde T , dada por:

$$T = M_2^{-1}N_2N_1^{-1}M_1, \quad (4.74)$$

define a matriz transferência para o sistema hexagonal.

Para obter a matriz transferência do sistema cúbico devemos seguir os mesmos passos anteriormente vistos, ou seja, partindo das condições de contorno (a), (b), (c) e (d) aplicadas às soluções (4.29) e (4.30), podemos obter semelhantemente as seguintes equações matriciais

$$M'_1|A^{(n)}\rangle = N'_1|B^{(n)}\rangle, \quad (4.75)$$

$$M'_2|A^{(n+1)}\rangle = N'_2|B^{(n)}\rangle, \quad (4.76)$$

onde

$$M'_1 = \begin{pmatrix} L'_{1b}f'_{1b} & -L'_{1a}\bar{f}'_{1a} & \frac{L'_{2a}}{p'_{2a}}f'_{2a} & -\frac{L'_{2a}}{p'_{2a}}\bar{f}'_{2a} \\ u'\Theta_{1a}f'_{1a} & u'\Theta_{1a}\bar{f}'_{1a} & u'\Theta_{2a}f'_{2a} & u'\Theta_{2a}\bar{f}'_{2a} \\ p'_{2a}f'_{1a} & p'_{2a}\bar{f}'_{1a} & f'_{2a} & \bar{f}'_{2a} \\ p'_{2a}k'_{1a}f'_{1a} & -p'_{2a}k'_{1a}\bar{f}'_{1a} & k'_{2a}f'_{2a} & -k'_{2a}\bar{f}'_{2a} \end{pmatrix}, \quad (4.77)$$

$$N'_1 = \begin{pmatrix} L'_{1b} & -L'_{1b} & \frac{L'_{2b}}{p'_{2b}} & -\frac{L'_{2b}}{p'_{2b}} \\ \Theta_{1b} & \Theta_{1b} & \Theta_{2b} & \Theta_{2b} \\ p'_{2b} & p'_{2b} & 1 & 1 \\ \frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}}p'_{2b}k'_{1b} & -\frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}}p'_{2b}k'_{1b} & \frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}}k'_{2b} & -\frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}}k'_{2b} \end{pmatrix}, \quad (4.78)$$

$$M'_2 = \begin{pmatrix} L'_{1b} & -L'_{1a} & \frac{L'_{2a}}{p'_{2a}} & -\frac{L'_{2a}}{p'_{2a}} \\ u'\Theta_{1a} & u'\Theta_{1a} & u'\Theta_{2a} & u'\Theta_{2a} \\ p'_{2a} & p'_{2a} & 1 & 1 \\ p'_{2a}k'_{1a} & -p'_{2a}k'_{1a} & k'_{2a} & -k'_{2a} \end{pmatrix}, \quad (4.79)$$

e

$$N'_2 = \begin{pmatrix} L'_{1b}f'_{1b} & -L'_{1b}\bar{f}'_{1b} & \frac{L'_{2b}}{p'_{2b}}f'_{2b} & -\frac{L'_{2b}}{p'_{2b}}\bar{f}'_{2b} \\ \Theta_{1b} & \Theta_{1b} & \Theta_{2b} & \Theta_{2b} \\ p'_{2b}f'_{1b} & p'_{2b}\bar{f}'_{1b} & f'_{2b} & \bar{f}'_{2b} \\ \frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}}p'_{2b}k'_{1b}f'_{1b} & -\frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}}p'_{2b}k'_{1b}\bar{f}'_{1b} & \frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}}k'_{2b}f'_{2b} & -\frac{\varepsilon_{zzb}}{\varepsilon_{zza}}k'_{2b}\bar{f}'_{2b} \end{pmatrix}. \quad (4.80)$$

Aqui usamos os seguintes fatores:

$$p'_a = \frac{e_{x4a}^2}{C_{44a}\varepsilon_{zza}}, \quad (4.81)$$

$$p'_b = \frac{e_{x4b}^2}{C_{44b}\varepsilon_{zzb}}, \quad (4.82)$$

$$u' = C_{44a}/C_{44b}, \quad (4.83)$$

$$p'_{1a} = \frac{e_{x4a}}{C_{44a}}, \quad (4.84)$$

$$p'_{2a} = \frac{e_{x4a}}{\varepsilon_{zza}}, \quad (4.85)$$

$$p'_{2b} = \frac{e_{x4b}}{\varepsilon_{zzb}}, \quad (4.86)$$

$$p'_{1b} = \frac{e_{x4b}}{C_{44b}}, \quad (4.87)$$

$$f'_{1a} = \exp(ik'_{1a}a), \quad (4.88)$$

$$f'_{2a} = \exp(ik'_{2a}a), \quad (4.89)$$

$$f'_{1b} = \exp(ik'_{1b}b), \quad (4.90)$$

$$f'_{2b} = \exp(ik'_{2b}b), \quad (4.91)$$

$$\bar{f}'_{1a} = \exp(-ik'_{1a}a), \quad (4.92)$$

$$\bar{f}'_{2a} = \exp(-ik'_{2a}a), \quad (4.93)$$

$$\bar{f}'_{1b} = \exp(-ik'_{1b}b), \quad (4.94)$$

$$\bar{f}'_{2b} = \exp(-ik'_{2b}b), \quad (4.95)$$

$$\Theta_{1a} = L'_{1a}k'_{1a} + q_x p'_a, \quad (4.96)$$

$$\Theta_{1b} = L'_{1b}k'_{1b} + q_x p'_b, \quad (4.97)$$

$$\Theta_{2a} = \frac{k'_{2a}}{p'_{2a}}L'_{2a} + q_x p'_{1a}, \quad (4.98)$$

$$\Theta_{2b} = \frac{k'_{2b}}{p'_{2b}}L'_{2b} + q_x p'_{1b}. \quad (4.99)$$

A combinação entre as equações 4.75 e 4.76 gera à relação matricial que fornece a matriz transferência para o sistema cúbico

$$T' = M_2'^{-1}N_2'N_1'^{-1}M_1'. \quad (4.100)$$

4.4 Espectro de Transmissão do Fônon

Como explicado anteriormente, para materiais piezoelétricos com simetria hexagonal (6mm) e cúbica, as relações (4.6) e (4.7) produzem equações diferenciais acopladas para os pares (u_x, u_z) (ondas de cisalhamento vertical) e (u_y, ϕ) (ondas de cisalhamento horizontal), respectivamente, onde o último acoplamento se deve diretamente ao tensor piezoelétrico. Sob tais circunstâncias, para obter o espectro de transmissão temos que relacionar as amplitudes dos campos elásticos num meio transparente (vácuo) $z < 0$ com aquelas na região $z > L_{QPS}$, sendo L_{QPS} o tamanho da estrutura quasiperiódica, para sucessivas aplicações da equação (4.73) que relaciona as amplitudes A_i^{n+a} da onda elástica na camada $n + 1$ com aquelas A_i^n associadas com a n -ésima camada.

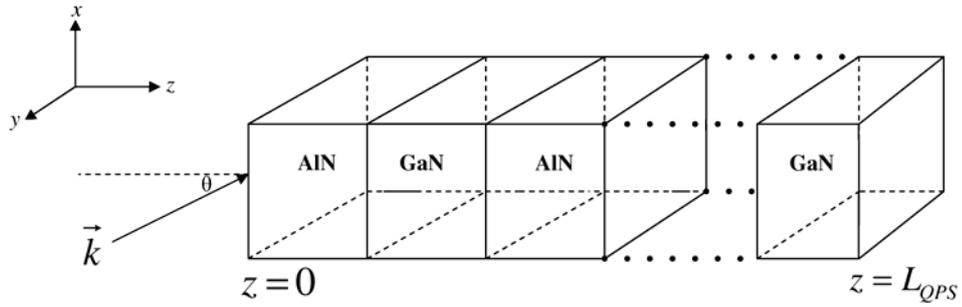


Figura 4.1: Representação esquemática da super-rede mostrando a geometria do sistema de multicamadas quasiperiódicas consideradas neste capítulo como uma sequência alternada dos constituintes AlN e GaN formando uma estrutura de Fibonacci.

A geometria de transmissão é mostrada na figura 4.1, onde o vetor de onda do fônon faz um ângulo θ com a direção de crescimento da estrutura quasiperiódica (eixo z). Reorganizando-se a equação (4.73) e levando em conta as condições de contorno nas interfaces $z < 0$ e $z < L_{QPS}$ [80], podemos escrever:

$$\begin{pmatrix} A_1^n \\ A_2^n \\ A_3^n \\ A_4^{n+1} \end{pmatrix} = D^{-1} D' \begin{pmatrix} A_1^{n+1} \\ A_2^{n+1} \\ A_3^{n+1} \\ A_4^n \end{pmatrix}, \quad (4.101)$$

onde

$$D = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} & 0 \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} & 0 \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} & 0 \\ T_{41} & T_{42} & T_{43} & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.102)$$

e

$$D' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -T_{14} \\ 0 & 1 & 0 & -T_{24} \\ 0 & 0 & 1 & -T_{34} \\ 0 & 0 & 0 & -T_{44} \end{pmatrix}. \quad (4.103)$$

Resolvendo a equação matricial (4.101) podemos obter algebricamente o coeficiente de transmissão na forma:

$$T = \frac{|A_1^{n+1}|^2}{|A_1^n|^2}. \quad (4.104)$$

Neste capítulo bem como no próximo usaremos a relação 4.104 para a obtenção dos espectros teóricos de transmissão do fônon acústico na superrede exibida na figura 4.1.

4.5 Resultados Numéricos

Apresentamos agora os resultados numéricos de nossas simulações para a transmissão do fônon acústico através da estrutura quasiperiódica formada por multicamadas piezoelétricas cúbicas e hexagonais constituídas pelos nitretos AlN/GaN. Os parâmetros físicos usados para os nitretos são os mesmos usados no capítulo anterior, ou seja:

(i) para o AlN: $\omega_{LO,E_1} = 113.02$, $\omega_{TO,E_1} = 83.13$, $\varepsilon_\infty = 4.68$, $\rho = 3.32$, $C_{44} = 2.00$, $e_{x4} = 1.46$ e $e_{x5} = 0.60$;

(ii) para o GaN: $\omega_{LO,E_1} = 94.06$, $\omega_{TO,E_1} = 73.22$, $\varepsilon_\infty = 5.29$, $\rho = 6.25$, $C_{44} = 1.54$, $e_{x4} = 0.73$ e $e_{x5} = 0.49$.

Nestes parâmetros, as frequências estão em unidades de meV , os termos elásticos estão em unidades de $10^{11}N/m^2$, os termos piezoelétricos em unidades de C/m^2 , e as densidades em unidades de $10^3kg/m^3$. Representamos aqui a espessura da camada AlN por $a = 10nm$, e a razão $a/b = 0.5$. Novamente, como no capítulo anterior, usamos a frequência reduzida ω/Ω com $\Omega = v_T/a$ em vez de ω simplesmente (esta escolha simplifica bastante os nossos cálculos numéricos).

O espectro de transmissão mostrado na figura 4.2a apresenta uma ação filtrante dos fônons ao redor da frequência reduzida $\omega/\Omega = 2.375$, correspondendo a um gap proibido (stop band). Além disso, a estrutura é transparente ao fônon (o coeficiente de transmissão é próximo ou igual a 1.0) para vários valores da frequência reduzida. A condição de transparência implica que as camadas A (AlN) e B (GaN) são equivalentes do ponto de vista da onda. Além disso, os espectros de transmissão tem uma propriedade de escala notável com respeito ao número de geração da seqüência de Fibonacci. Para entender tais propriedades de escala, consideremos a figura 4.2b, que mostra o espectro de transmissão óptico da figura 4.2a para uma região de frequências reduzidas $1.38 < \omega/\Omega < 2.48$. Este espectro é o mesmo, mostrado na figura 4.2c, para uma representação da décima quinta geração (987 camadas) da seqüência quasiperiódica de Fibonacci (isto é, o espectro é recuperado a cada cinco gerações de Fibonacci), para uma gama de frequências reduzidas por um fator de escala f aproximadamente igual a 10 ($2.852 < \omega/\Omega < 2.946$). Assim, f dá a mudança de escala do vetor de onda acústico entre os espectros $T[S_j]$ e $T[S_{j+5}]$,

sendo S_j a j -ésima geração da seqüência de Fibonacci. De fato, para a vigésima geração, que possui 10946 camadas e cujo espectro é mostrado na figura 4.3, temos novamente um notável padrão auto-similar surgindo novamente na região de freqüências $2.979 < \omega/\Omega < 2.998$, que é reduzida por um fator de escala igual a f^2 (aproximadamente 100). Conseqüentemente, a quasi-localização da onda acústica nas multicamadas fonônicas de Fibonacci é demonstrada pela auto-similaridade dos coeficientes de transmissão dados pelas condições de fronteiras vistas.

Analogamente, o espectro de transmissão dos fônons acústicos com incidência normal para a décima geração da seqüência de Fibonacci, como uma função da freqüência reduzida ω/Ω , é mostrado na figura 4.4a, para a simetria cúbica. Podemos constatar o aparecimento de duas regiões de filtragem para os fônons nos seguintes intervalos de freqüências reduzida $1.249 < \omega/\Omega < 1.40$ e $2.585 < \omega/\Omega < 2.710$, definindo assim dois “stop bands”. Como no caso da simetria hexagonal, o espectro de transmissão do fônons é transparente a várias freqüências reduzidas, com as mesmas propriedades notáveis de escala com respeito ao número de geração da seqüência de Fibonacci. Isto pode ser visto na figura 4.4b, que mostra uma ampliação óptica do espectro de transmissão visto na figura 4.4a para uma região de freqüências dado pelo intervalo $1.10 < \omega/\Omega < 1.46$. Como é descrito na figura 4.4c, o espectro repete-se a cada cinco gerações de Fibonacci, isto é, o espectro mostrado na figura 4.4b ressurgue a cada cinco gerações por um fator de escala de 10. Isto é percebido olhando-se a região de freqüências $1.622 < \omega/\Omega < 1.660$ na figura 4.4c, e também, a figura 4.5 que mostra a ampliação óptica da vigésima geração de Fibonacci na região de freqüências $0.9137 < \omega/\Omega < 0.9164$.

Para o caso de incidência oblíqua, a figura 4.6 mostra um espectro totalmente diferente do caso da simetria hexagonal. O espectro de transmissão mostra agora uma estreita banda proibida (“stop band”) para um ângulo de incidência de 10° (linha cheia) para o valor de freqüência reduzida $\omega/\Omega = 1.65$. Esta estreita banda proibida desenvolve-se dentro de uma banda mais larga, com o aumento do ângulo de incidência, alcançando uma região de freqüências $1.5 < \omega/\Omega < 1.65$ para o ângulo de incidência de 45° (linha pontilhada). Observamos também o surgimento de uma nova banda proibida também estreita na figura 4.6 na região de baixa freqüência para $\omega/\Omega = 0.409$. Bastante interessante, é que agora a estrutura não é mais auto-similar, indicando que a transmissão do fônons é bastante

sensível ao ângulo de incidência.

Por outro lado, a simetria cúbica, mostra o espectro de transmissão, como no caso da incidência normal, dois “stop bands” para diferentes regiões de frequências, e distintos ângulos de incidência. Para regiões de baixa frequência (descrito na figura 4.7) vemos uma estreita região com $\omega/\Omega = 0.572$ para o ângulo de incidência de 45° (linha tracejada), e $\omega/\Omega = 1.648$ para $\theta = 10^\circ$ (linha cheia).

Para uma melhor compreensão da dependência angular do espectro de transmissão, mostramos na figura 4.8 a dependência angular do espectro de transmissão do fônon na estrutura fonônica para a sétima geração de Fibonacci com uma função do $\sin^2(\theta)$, para um valor fixo da frequência reduzida $\omega/\Omega = 1.0$, considerando as duas simetrias: hexagonal (linha cheia) e cúbica (linha tracejada). Esta dependência angular da transmissão do fônon para uma frequência fixa proporciona uma informação complementar acerca das características vibracionais do fônon no sistema de multicamadas quasiperiódicas. A simetria hexagonal (linha cheia) apresenta um suave contorno para o espectro de transmissão, com dois ligeiros picos (bandas proibidas) para $\omega/\Omega = 0.335$ e 0.980 . Comparado com o caso hexagonal, a simetria cúbica (linha tracejada) apresenta três regiões de pico para a transmissão, indicando possíveis ressonâncias. Ambas as simetrias são bastante sensíveis a escolha dos ângulos de incidência, com diferenças interessantes no comportamento das transmissões. A forte dependência do espectro de transmissão do fônons em relação ao ângulo de incidência é devido a presença do “intermode Bragg reflection” [81], além do “intramode Bragg reflection” também apresentado no caso da incidência normal [82]. Além disso, “intermode Bragg reflection” produz um gap de frequências para o espectro dentro dos limites da zona de Brillouin da estrutura de multicamadas, quebrando o padrão auto-similar presente no caso da incidência normal. Além disso, a opacidade ou transparência da estrutura de multicamadas pode ser controlada usando um ângulo de incidência apropriado. Esperamos que os resultados obtidos neste capítulo sirvam de ajuda a trabalhos experimentais na área.

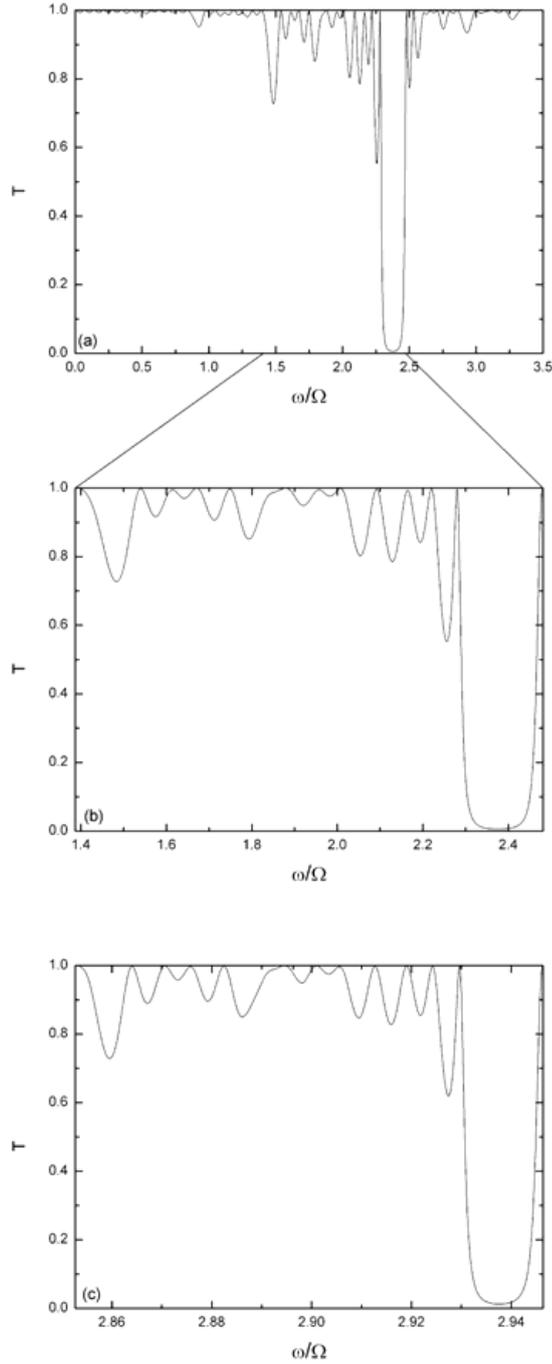


Figura 4.2: Espectro de transmissão do fônon acústico para uma incidência normal na estrutura quasiperiódica formadas por multicamadas fonônicas de Fibonacci para a simetria hexagonal: (a) o coeficiente de transmissão T como uma função da frequência reduzida ω/Ω , com $\Omega = v_T/a$, para a décima geração da seqüência de Fibonacci; (b) o mesmo como em (a), mas agora ampliamos o espectro na região de frequências $1.38 < \omega/\Omega < 2.48$; (c) o mesmo que em (b), mas para a décima quinta geração da seqüência de Fibonacci, ampliando o espectro na região de frequências $2.852 < \omega/\Omega < 2.946$.

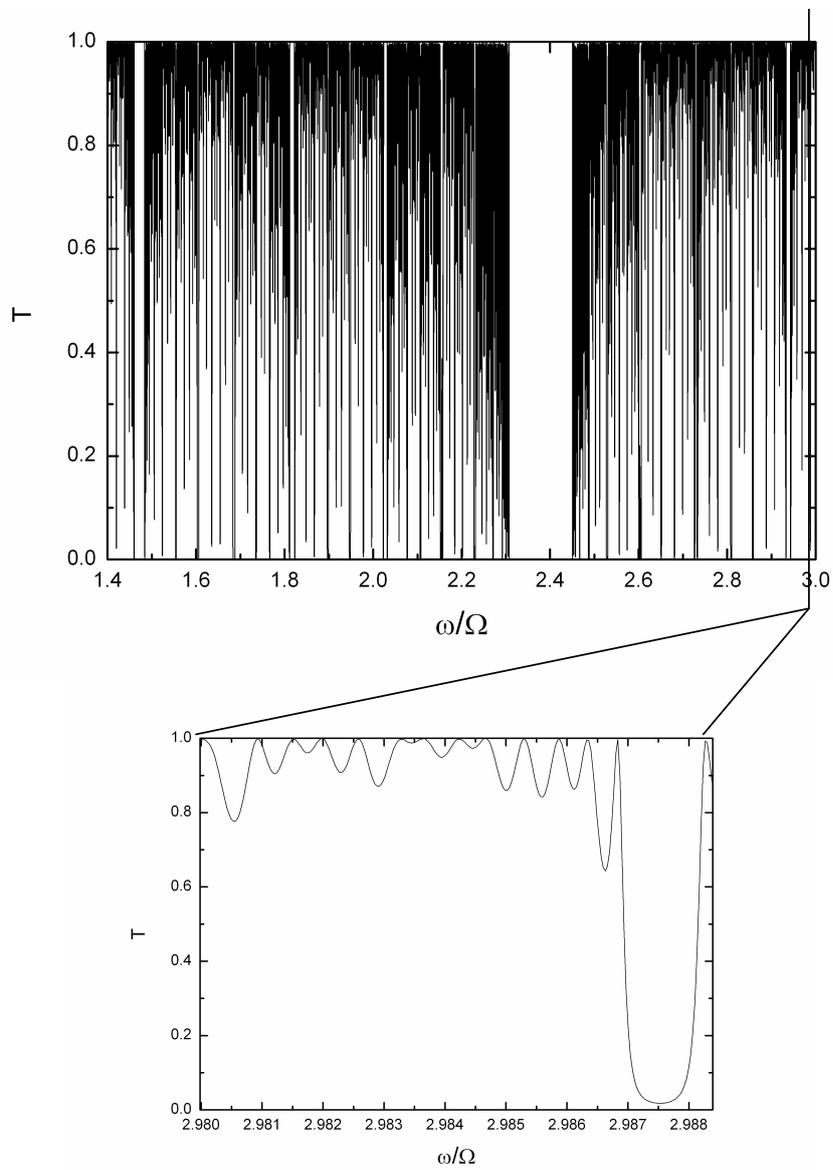


Figura 4.3: Ampliação do espectro de transmissão do fônon para a vigésima geração da seqüência quasiperiódica de Fibonacci na região de frequências $2.979 < \omega/\Omega < 2.988$.

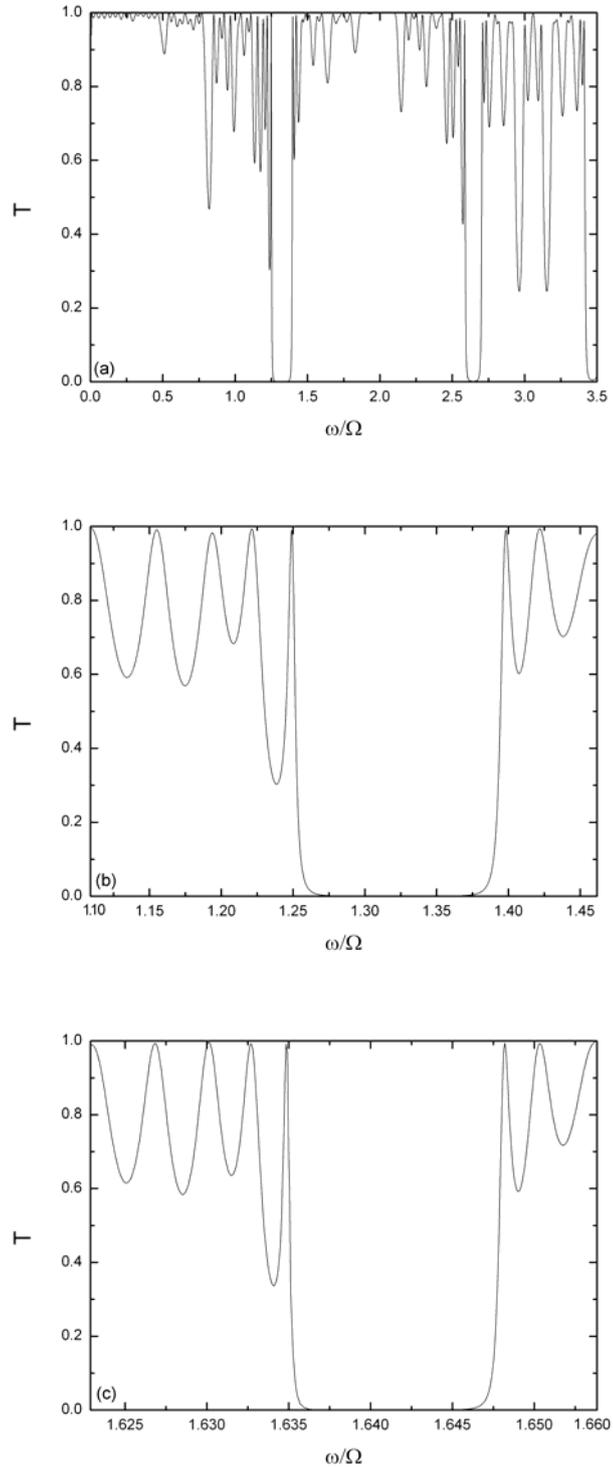


Figura 4.4: Espectro de transmissão do fônon acústico para uma incidência normal na estrutura quasiperiódica formadas por multicamadas fonônicas de Fibonacci para a simetria cúbica: (a) o coeficiente de transmissão T como uma função da frequência reduzida ω/Ω , com $\Omega = v_T/a$, para a décima geração da seqüência de Fibonacci; (b) o mesmo como em (a), mas agora ampliamos o espectro na região de frequências $1.10 < \omega/\Omega < 1.46$; (c) o mesmo que em (b), mas para a décima quinta geração da seqüência de Fibonacci, ampliando o espectro na região de frequências $1.622 < \omega/\Omega < 1.660$.

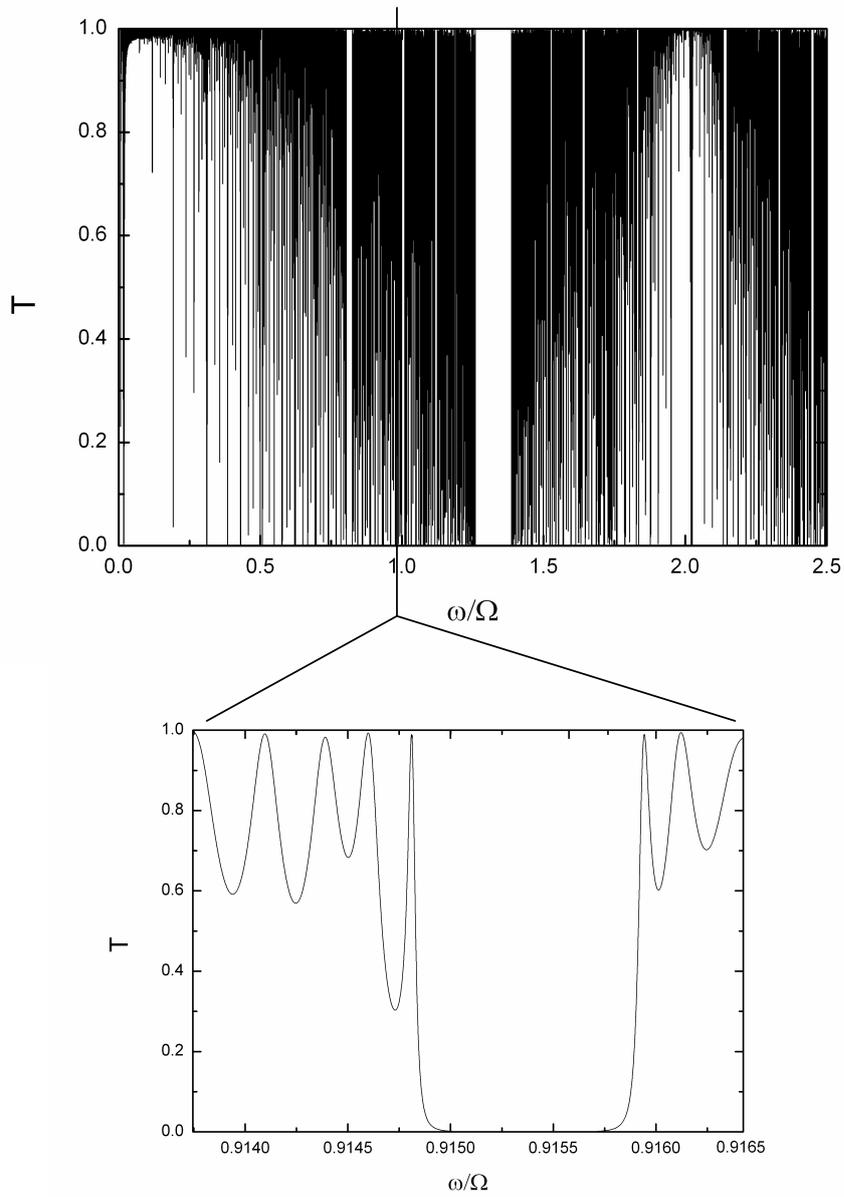


Figura 4.5: Ampliação do espectro de transmissão do fônon para a vigésima geração da seqüência quasiperiódica de Fibonacci na região de frequências $0.9137 < \omega/\Omega < 0.9164$.

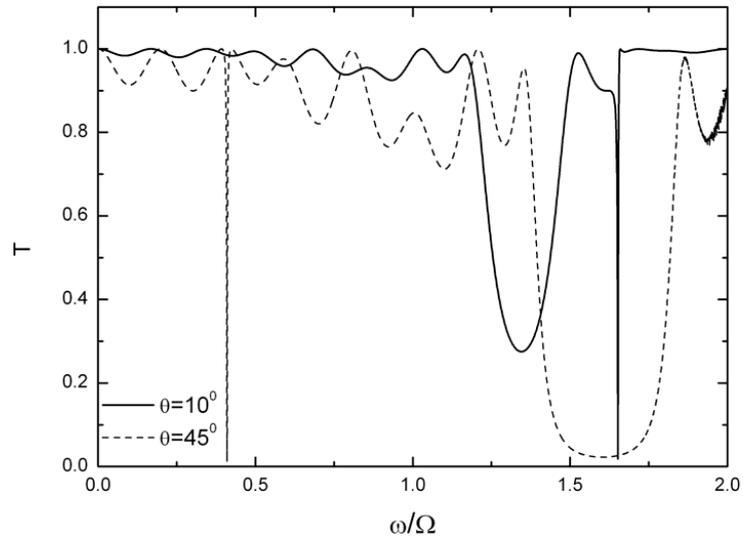


Figura 4.6: Espectro de transmissão do fônôn acústico incidindo obliquamente na estrutura fonônica de Fibonacci para a simetria hexagonal na sétima geração: (a) $\theta = 10^\circ$ (linha cheia); (b) $\theta = 45^\circ$ (linha tracejada).

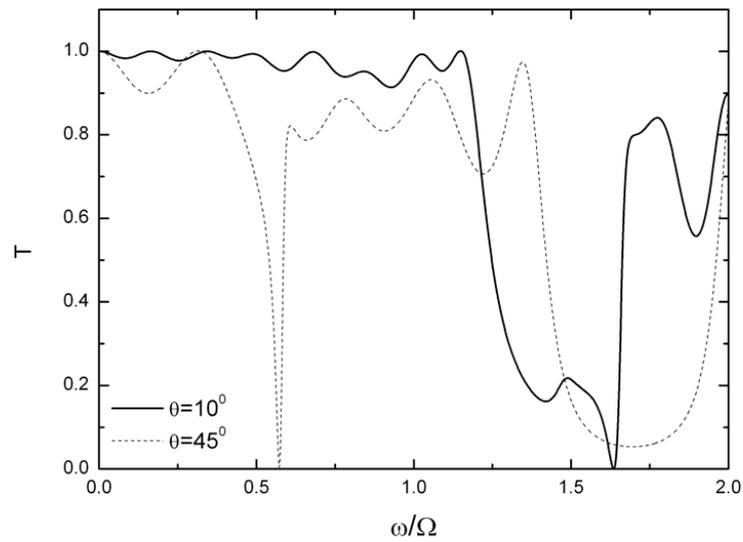


Figura 4.7: 4-5 O mesmo que na figura 4-6, mas pra a simetria cúbica.

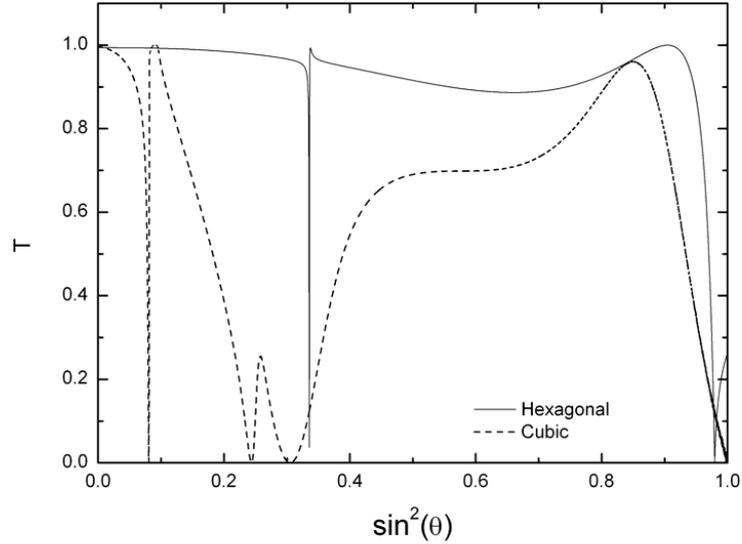


Figura 4.8: Espectro de transmissão para a sétima geração de Fibonacci para a estrutura fonônica, como uma função de $\sin^2(\theta)$, para um valor fixo da frequência reduzida $\omega/\Omega = 1.0$: simetria hexagonal (linha cheia); simetria cúbica (linha tracejada).

4.6 Conclusões.

Em resumo, neste capítulo descrevemos o espectro de transmissão para o fônon acústico que se propaga através de um cristal fonônico semiconductor periódico e quasiperiódico (tipo Fibonacci) usando um modelo teórico que vai além da aproximação elástica contínua. Além disso, consideramos o arranjo ou empilhamento das estruturas semicondutoras hexagonal (wurtzite) e cúbica (zinc blende) para os materiais GaN e AlN. Nossos resultados são de caráter promissor e abrem caminho adicional para a construção de dispositivos fonônicos explorando as propriedades sugeridas pelos “band-gaps” fonônicos, por exemplo, o potencial para projetar filtros de fônons para combinações adequadas dos números de geração das estruturas quasiperiódicas de Fibonacci. Surpreendentemente descobrimos que os “band-gaps” fonônicos são bastante sensíveis a mudança no ângulo de incidência, com uma diferença bastante interessante nos espectros de transmissão.

A opacidade ou transparência pode ser controlada usando um ângulo de incidência apropriado, e acreditamos que as informações descritas neste capítulo estimularão possíveis trabalhos experimentais neste tema específico.

A técnica experimental mais importante usada para a investigação dos fônons é o espalhamento de Brillouin, e de fato esta tem sido previamente aplicada com êxito para os substratos do GaN do tipo high-quality e free-standing [83] como também os filmes finos do GaN em substratos da safira [84].

CAPÍTULO 5

Propagação de Ondas Acústicas em Estruturas Fonônicas do Tipo Sólido/Líquido.

5.1 Introdução.

Como resultado dos recentes avanços nas técnicas de fabricação, sistemas de multicamadas com impressionante qualidade são agora sintetizados considerando-se filmes finos compostos por uma grande variedade de cristais. Eles formam uma nova classe intrigante de materiais, em que suas propriedades macroscópicas são sujeitas ao desenho ou ao controle das variações das espessuras ou composições dos filmes constituintes. Na realidade algumas destas propriedades podem ser únicas para a estrutura de multicamadas, gerando assim um novo modo de descobrir suas modernas características[85].

Além das propriedades eletrônicas e ópticas destes sistemas de multicamadas, existe um crescente interesse no estudo das suas propriedades vibracionais, com várias ordens de empilhamento periódico, quasiperiódicos e randômico, investigadas teoricamente e experimentalmente [86, 87, 88, 89]. Por exemplo, o funcionamento de diversos sistemas modernos de comunicação acústico-eletrônicos exigem o confinamento da luz e das ondas sonoras, que alteram fortemente as características do espalhamento Brillouin [90]. Além disso, a reflexão de Bragg ocorre quando a periodicidade é comparável aos comprimentos de onda, permitindo assim gaps de frequências (“stop bands”) para a relação de dispersão do fônon. Assim, eles exibem uma ação filtrante para os fônons nas regiões de “stop bands” levando as frequências permitidas a entrarem em bandas contínuas separadas por gaps proibidos.

Embora a estrutura de bandas seja a assinatura para a física do estado sólido, como é bem conhecido usando uma aproximação quântica para o espectro de energia para elétrons em potenciais periódicos [91], o mesmo fenômeno ocorre, em princípio, para ondas planas do tipo, acústicas, eletromagnéticas e oceanográficas. Por exemplo, a existência de regiões de frequências proibidas para a propagação da luz e a emissão óptica resultante do espalhamento de Bragg para ondas eletromagnéticas em sólidos cristalinos, denominados “band gaps” fotônicos, tem permitido um grande número de analogias com as propriedades eletrônicas para a física de semicondutores.

A técnica de microestruturação para materiais ópticos de alta qualidade disponíveis atualmente dão uma notável flexibilidade na fabricação dos chamados cristais fotônicos, resultando na ligação da relação de dispersão eletromagnética e o modo estrutural aproximadamente conveniente a cada necessidade, abrindo uma nova perspectiva para ambos os fundamentos e interesses práticos [92, 93, 94]. A comparação entre fótons e fônons sugere a consideração de compostos elástico periódicos de dois ou mais materiais vibracionais, denominados cristais fonônicos ou redes fonônicas. Para uma modulação adequada das propriedades dos materiais elásticos constituintes, os gaps de frequências proibidas (“stop bands” acústicos) que se estendem por toda a zona de Brillouin, podem ser percebidos.

Uma possível aplicação de tais cristais fonônicos é a construção de filtros para fônons ou isoladores térmicos, selecionando os fônons espalhados nas regiões de frequências desejáveis, bem como uma variedade de dispositivos ópticos e acústicos baseados em fônons usando uma ou múltiplas estruturas de super-redes [95, 96, 97]. Para investigar as estruturas de banda acústicas destes materiais, experimentos envolvendo transmissão de ultra-som no volume e na superfície das estruturas tem sido realizados [98, 99, 100, 101]. A dimensão dos cristais fonônicos utilizados nos experimentos são da ordem de milímetros e uma estrutura composta é fabricada perfurando em um substrato sólido uma rede periódica de cilindros. Estas simples estruturas devem ter um vácuo ou buracos cilíndricos contendo ar. Intuitivamente, estes buracos devem espalhar fortemente a onda acústica, e a transmissão do ultra-som através desta estrutura deve ser pequena ou até mesmo proibida de atravessar grande parte dos cilindros. Outra estrutura interessante é aquela em que tais cilindros são enchidos com um líquido ou um polímero de baixo ponto de fusão [102]. Por outro lado, do ponto de vista teórico, uma das mais eficazes ferramentas

matemáticas para o estudo analítico de diversos fenômenos envolvendo ondas em meios compostos por camadas é o método da matriz transferência baseada no formalismo de Bloch.

Contudo, os efeitos dos cálculos analíticos diretos tornam-se um pouco complicados uma vez que a dimensão da matriz transferência obtida é superior 2 (isto se deve aos efeitos dos modos acoplados). Ocorre, adicionalmente, uma mistura sagital dos modos acústicos numa simetria plana para meios elásticos puramente estratificados, ou cisalhamento horizontal (SH) para a propagação de ondas na presença de acoplamento eletromecânico. O tratamento teórico nestes casos é basicamente numérico, com os resultados analíticos restritos a obtenção da relação de dispersão de Bloch da equação característica para o propagador matricial, considerando-se que o cálculo analítico direto desta relação foi discutida sob certas aproximações bastantes restritivas e suposições.

Acreditamos que este assunto é de importância prática não só por se poderem ajustar as estruturas de bandas do cristal fonônico, mas também porque se poderá, assim, controlar o comportamento da propagação de ondas elásticas intencionalmente introduzindo a quasiperiodicidade. Novamente empregamos neste capítulo a técnica da matriz transferência que simplifica bastante nossos cálculos teóricos. Como foi feito no capítulo anterior, vamos usar esta matriz transferência obtida para calcular os coeficientes de transmissão como uma função de seus elementos, bem com também escrever os expoentes de Lyapunov para a nossa estrutura fonônica periódica e quasiperiódica de Fibonacci. Neste capítulo investigaremos como o fato da ausência da componente transversal do vetor deslocamento \vec{u} nos líquidos [103] que são um dos constituintes da nossa super-rede influencia na propagação da onda acústica.

5.2 Modelo Teórico para o Sistema Sólido com Simetria Cúbica.

O nosso modelo neste capítulo é baseado na figura 5.1 onde investigamos o efeito da propagação de uma onda acústica pelo interior de um super-rede quasiperódica binária de Fibonacci do tipo $\cdots \text{Quartzo}/\text{Argonio} \cdots$ cercada por um substrato que pode ser um meio transparente à luz (vácuo). Para descrição do meio sólido (quartzo) vamos usar a equação de movimento do meio elástico que compõe o cristal com uma certa simetria[104]:

$$\rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} - C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial r_i \partial r_l} = 0, \quad (5.1)$$

onde os índices i, j, k e l assumem as componentes cartesianas x, y ou z , C_{ijkl} é o tensor elástico de quarta ordem, ρ é a densidade do sólido cristalino em estudo e u_j é o deslocamento elástico ao longo dos eixos coordenados r_i e r_l . Queremos obter duas equações diferenciais acopladas para o par (u_x, u_z) que é o mais conveniente para o nosso estudo pelo simples fato de que o líquido não permite a existência da componente u_y e isso acarretaria problemas nas condições de contorno elásticas *sólido/líquido*. Devemos notar que a equação de movimento 5.1 é uma soma de Einstein sobre todas as componentes possíveis dos envolvidos, sendo, portanto útil para o sistema cúbico o uso da forma matricial do tensor elástico :

$$C_{ijkl} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

A forma matricial anterior juntamente com a equação 5.1 dá origem ao par de equações diferenciais acopladas de segunda ordem para as componentes u_x e u_z mostradas abaixo;

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{44} \left[\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right] + (C_{12} + C_{44}) \left[\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right], \quad (5.3)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = C_{11} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + C_{44} \left[\frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} \right] + (C_{12} + C_{44}) \left[\frac{\partial^2 u_y}{\partial z \partial y} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z \partial x} \right], \quad (5.4)$$

lembrando que aqui não levamos em conta a influência piezoelétrica que levaria a equações diferenciais ainda mais complicadas. Assumindo que a onda se propaga no interior da estrutura na direção x com uma velocidade de fase igual a ω/q_x , uma solução para a equação 5.1 na forma de ondas planas é escrita como:

$$u_j = \alpha_j \exp(ikz) \exp(iq_x x - i\omega t), \quad j = x, y, z. \quad (5.5)$$

onde α_j são coeficientes que representam as amplitude dos campos para diferentes componentes. Substituindo a solução representada pela equação 5.5 no sistema de equações diferenciais acoplados representados pelas equações 5.3 e 5.4 obtemos uma forma mais simplificada deste sistema;

$$-\rho \omega^2 u_x = C_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + C_{44} \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} + \lambda \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z}, \quad (5.6)$$

$$-\rho \omega^2 u_z = C_{11} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + C_{44} \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \lambda \frac{\partial^2 u_x}{\partial z \partial x}, \quad (5.7)$$

onde $\lambda = C_{12} + C_{44}$. De maneira análoga ao que foi feito no capítulo 4 podemos resolver uma equação característica envolvendo o sistema acima cuja solução não trivial (a solução trivial não nos interessa pois tal solução equivale ao sistema em repouso) é obtida com o determinante dos coeficientes sendo nulo. A solução assim obtida é mostrada abaixo na forma (note que omitimos o fator $\exp(iq_x x)$);

$$u_x = L(k_1)[A_1 \exp(ik_1 z) - A_2 \exp(-ik_1 z)] + L(k_2)[A_3 \exp(ik_2 z) - A_4 \exp(-ik_2 z)] \quad (5.8)$$

$$u_z = A_1 \exp(ik_1 z) + A_2 \exp(-ik_1 z) + A_3 \exp(ik_2 z) + A_4 \exp(-ik_2 z). \quad (5.9)$$

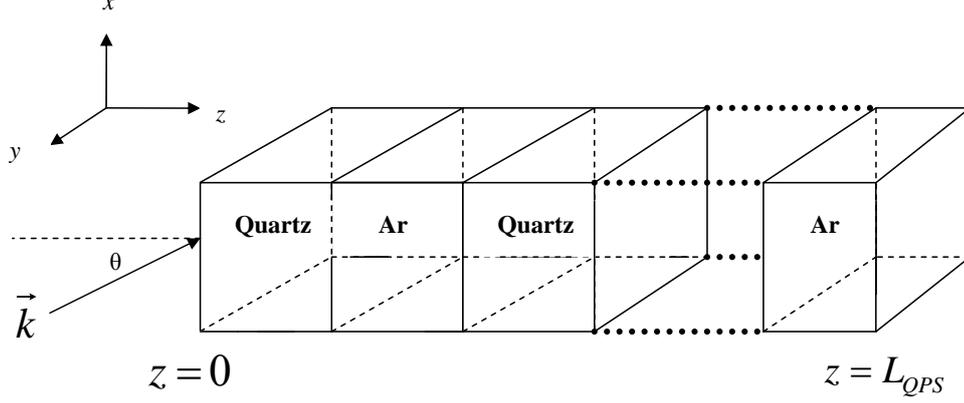


Figura 5.1: Representação esquemática mostrando a geometria do sistema de multicamadas quasiperiódicas consideradas neste capítulo, como uma sequência alternada dos constituintes sólido *Quartzo* e líquido *Argônio* formando uma estrutura de Fibonacci.

Nestas duas soluções A_s ($s = 1, 2, 3, 4$) são coeficientes desconhecidos que representam as amplitudes dos campos elásticos e podem ser determinados por condições de contorno, e $k_{1,2} = (k_{\pm})^{1/2}$, onde

$$k_{\pm} = \frac{q_x^2 \alpha^2 + q_{Lz}^2 \gamma^{-1} + q_{Tz}^2 \gamma \pm \Delta}{2} \quad (5.10)$$

e também,

$$\Delta = \left[(\alpha q_x^2 + q_{Lz}^2 \gamma^{-1} + q_{Tz}^2 \gamma)^2 - 4q_{Lz}^2 q_{Tz}^2 \right]^{1/2}, \quad (5.11)$$

$$q_{Tz}^2 = (\omega/v_T)^2 - q_x^2, \quad (5.12)$$

$$q_{Lz}^2 = (\omega/v_L)^2 - q_x^2, \quad (5.13)$$

$$L(k_i) = \left(\frac{\lambda}{C_{11}} q_x k_i \right) / (q_{Lz}^2 - \gamma k_i^2), \quad (5.14)$$

$$\lambda = C_{11} + C_{44}, \quad (5.15)$$

$$\alpha = \lambda^2 / (C_{11} C_{44}), \quad (5.16)$$

$$\gamma = C_{44} / C_{11}. \quad (5.17)$$

Nas equações acima, q_{Tz} e q_{Lz} representam respectivamente a componente z do vetor de onda elástico \vec{k} e a componente longitudinal deste mesmo vetor, correspondendo as velocidades transversal v_T e longitudinal v_L para a onda elástica cujas expressões analíticas

são $v_T = (C_{44}/\rho)^{1/2}$ e $v_L = (C_{11}/\rho)^{1/2}$ obtidas diretamente nos cálculos.

5.3 Modelo Teórico para o Sistema Líquido.

O cálculo das soluções u_x e u_z na camada líquida (Ar) (lembrando que $u_y = 0$ no líquido pois este não suporta cisalhamento nesta direção) é realizado partindo da equação de Euler da fluido dinâmica expressa em termos do deslocamento elástico no meio líquido [105]:

$$-\rho\omega^2\vec{u} - [\rho v_L^2 - i\omega(\zeta + \frac{4}{3}\eta)]\nabla(\nabla \cdot \vec{u}) - i\omega\eta\nabla \times \nabla \times \vec{u} = 0, \quad (5.18)$$

onde ζ e η representam a viscosidade no volume do líquido e o cisalhamento no mesmo respectivamente, e $v_L = \sqrt{C_{11}/\rho}$ é velocidade longitudinal da onda acústica. Esta forma da equação de Euler ignora qualquer ligação entre o calor ou a densidade de entropia, que são somente importantes quando consideramos o espectro de flutuação de densidades do fluido. Observe também que aqui não consideramos a componente transversal da velocidade no líquido v_{Tl} já que este não a admite. Considerando-se novamente soluções do tipo onda plana, a substituição da equação 5.5 na equação 5.18, resulta no fato de podermos reescrevê-la na forma de duas equações diferenciais acopladas (sistema de equações) usando as expressões para os operadores diferenciais $\nabla(\nabla \cdot \vec{u})$ e $\nabla \times \nabla \times \vec{u}$:

$$-\rho\omega^2 u_x - [\rho v_L^2 - i\omega(\zeta + \frac{4}{3}\eta)]\left[\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z}\right] - i\omega\eta\left[\frac{\partial^2 u_z}{\partial z \partial x} - \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2}\right] = 0, \quad (5.19)$$

$$-\rho\omega^2 u_z - [\rho v_L^2 - i\omega(\zeta + \frac{4}{3}\eta)]\left[\frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z \partial x}\right] - i\omega\eta\left[\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} - \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2}\right] = 0. \quad (5.20)$$

Para a resolução deste sistema de equações diferenciais empregamos a mesma técnica usada no capítulo 4, de sorte que a solução encontrada para o par (u_x, u_z) é neste caso para o líquido dada por

$$u_x = B_1 \exp(iLz) + B_2 \exp(-iLz), \quad (5.21)$$

$$u_z = B_3 \exp(iLz) + B_4 \exp(-iLz). \quad (5.22)$$

onde B_s ($s = 1, 2, 3, 4$) podem ser determinados via condições de fronteira , e

$$L^2 = q_L^2 - q_x^2, \quad (5.23)$$

$$q_L^2 = \rho\omega^2 / (\rho v_L^2 - i\omega(\zeta + \frac{4}{3}\eta)). \quad (5.24)$$

As expressões para o tensor de stress na interface da camada líquida serão usadas nas condições de contorno e possuem a forma abaixo [106]:

$$\sigma_{ij} = [\rho v_L^2 - i\omega(\zeta - \frac{2\eta}{3})]\nabla \cdot \vec{u}\delta_{ij} - i\omega\eta(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}). \quad (5.25)$$

5.4 Matriz Transferência para o Modelo.

Consideramos neste capítulo uma super-rede binária do tipo */Quartzo/Ar.../vácuo*. A célula unitária possui uma espessura $L = a + b$, onde a é a espessura da camada formada pelo Quartzo e b a espessura da camada líquida Ar. Para os modos de volume da super-rede, as soluções das equações de campo acoplado, definidas pelas equações (5.8), (5.9), (5.21) e (5.22) juntamente com as condições de contorno elásticas para n -ésima célula unitária, isto é, nas interfaces $z = nL + a$ (Quartzo/Ar) e $z = (n + 1)L$ (Ar/Quartzo), teremos:

(a) continuidade do deslocamento transversal u_x :

$$L(k_1)A_1^{n+1}f_{a1} - L(k_1)A_2^{n+1}\bar{f}_{a1} + L(k_2)A_3^{n+1}f_{a2} - L(k_2)A_4^{n+1}\bar{f}_{a2} = B_1^n + B_2^n, \quad (5.26)$$

$$L(k_1)A_1^n - L(k_1)A_2^n + L(k_2)A_3^n - L(k_2)A_4^n = B_1^n f_b + B_2^n \bar{f}_b. \quad (5.27)$$

(b) continuidade do deslocamento u_z :

$$A_1^{n+1}f_{a1} + A_2^{n+1}\bar{f}_{a1} + A_3^{n+1}f_{a2} + A_4^{n+1}\bar{f}_{a2} = B_3^n + B_4^n, \quad (5.28)$$

$$A_1^n + A_2^n + A_3^n + A_4^n = B_3^n f_b + B_4^n \bar{f}_b. \quad (5.29)$$

(c) continuidade do tensor de stress σ_{13} :

$$\frac{iC_{44a}}{2}\chi_1 f_{a1} A_1^{n+1} + \frac{iC_{44a}}{2}\chi_1 \bar{f}_{a1} A_2^{n+1} + \frac{iC_{44a}}{2}\chi_2 f_{a2} A_3^{n+1} + \frac{iC_{44a}}{2}\chi_2 \bar{f}_{a2} A_4^{n+1} = \omega\eta LB_1^n - \omega\eta LB_2^n + \omega\eta q_x B_3^n + \omega\eta q_x B_4^n, \quad (5.30)$$

$$\frac{iC_{44a}}{2}\chi_1 A_1^n + \frac{iC_{44a}}{2}\chi_1 A_2^n + \frac{iC_{44a}}{2}\chi_2 A_3^n + \frac{iC_{44a}}{2}\chi_2 A_4^n = \omega\eta LB_1^n f_b - \omega\eta LB_2^n \bar{f}_b + \omega\eta q_x B_3^n f_b + \omega\eta q_x B_4^n \bar{f}_b. \quad (5.31)$$

(d) continuidade do tensor de stress σ_{33} :

$$iC_{11a}k_{1a}f_{a1}A_1^{n+1} - iC_{11a}k_{1a}\bar{f}_{a1}A_2^{n+1} + iC_{11a}k_{2a}f_{a2}A_3^{n+1} - iC_{11a}k_{2a}\bar{f}_{a2}A_4^{n+1} = iC_{11b}q_x B_1^n + iC_{11b}q_x B_2^n + iC_{11b}LB_3^n - iC_{11b}LB_4^n \quad (5.32)$$

$$iC_{11a}k_{1a}A_1^n - iC_{11a}k_{1a}A_2^n + iC_{11a}k_{2a}A_3^n - iC_{11a}k_{2a}A_4^n = iC_{11b}q_x f_b B_1^n + iC_{11b}q_x \bar{f}_b B_2^n + \beta L f_b B_3^n - \beta L \bar{f}_b B_4^n \quad (5.33)$$

as seguintes definições são válidas para as condições de contorno acima ($j = 1, 2$):

$$f_{aj} = \exp(ik_{ja}d_a) = 1/\bar{f}_{aj}, \quad (5.34)$$

$$f_b = \exp(iLd_b) = 1/\bar{f}_b, \quad (5.35)$$

$$\beta = iC_{11b} + 2\omega\eta, \quad (5.36)$$

$$\chi_j = k_{ja}L(k_{ja}) - q_x. \quad (5.37)$$

Podemos definir os kets envolvendo as amplitudes nas soluções nas condições de fronteiras em cada meio material, como

$$|A^{(n)}\rangle = \begin{pmatrix} A_1^{(n)} \\ A_2^{(n)} \\ A_3^{(n)} \\ A_4^{(n)} \end{pmatrix}, \quad (5.38)$$

e de maneira similar, a expressão $|B^{(n)}\rangle$ assume a mesma estrutura. A reunião das equações (5.26)a (5.33) gera duas relações matriciais da forma:

$$M_1|A^{(n+1)}\rangle = N_1|B^{(n)}\rangle, \quad (5.39)$$

$$M_2|A^{(n)}\rangle = N_2|B^{(n)}\rangle, \quad (5.40)$$

onde

$$M_1 = \begin{pmatrix} L(k_{1a})f_{a1} & -L(k_{1a})\bar{f}_{a1} & L(k_{2a})f_{a2} & -L(k_{2a})\bar{f}_{a2} \\ f_{a1} & \bar{f}_{a1} & f_{a2} & \bar{f}_{a2} \\ \frac{iC_{44a}}{2}\chi_1 f_{a1} & \frac{iC_{44a}}{2}\chi_1 \bar{f}_{a1} & \frac{iC_{44a}}{2}\chi_2 f_{a2} & \frac{iC_{44a}}{2}\chi_2 \bar{f}_{a2} \\ iC_{11a}k_{1a}f_{a1} & iC_{11a}k_{1a}\bar{f}_{a1} & iC_{11a}k_{2a}f_{a2} & iC_{11a}k_{2a}\bar{f}_{a2} \end{pmatrix}, \quad (5.41)$$

e

$$N_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ \omega\eta L & -\omega\eta L & \omega\eta q_x & \omega\eta q_x \\ iC_{11b}q_x & iC_{11b}q_x & L\beta & -L\beta \end{pmatrix}. \quad (5.42)$$

Também consideramos no sistema de equações matriciais acima as matrizes:

$$M_2 = \begin{pmatrix} L(k_{1a}) & -L(k_{1a}) & L(k_{2a}) & -L(k_{2a}) \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ \frac{iC_{44a}}{2}\chi_1 & \frac{iC_{44a}}{2}\chi_1 & \frac{iC_{44a}}{2}\chi_2 & \frac{iC_{44a}}{2}\chi_2 \\ iC_{11a}k_{1a} & iC_{11a}k_{1a} & iC_{11a}k_{2a} & iC_{11a}k_{2a} \end{pmatrix}, \quad (5.43)$$

e

$$N_2 = \begin{pmatrix} f_b & \bar{f}_b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & f_b & \bar{f}_b \\ \omega\eta L f_b & -\omega\eta L \bar{f}_b & \omega\eta q_x f_b & \omega\eta q_x \bar{f}_b \\ iC_{11b}q_x f_b & iC_{11b}q_x \bar{f}_b & L\beta f_b & -L\beta \bar{f}_b \end{pmatrix}. \quad (5.44)$$

A combinação do sistema de equações matriciais (5.39) e (5.40), da origem a relação que descreve as propriedades da n -ésima célula com as da sua subsequente via a matriz T

(indicada abaixo) chamada matriz transferência. Na próxima seção discutiremos nossos resultados numéricos, muito do que já foi usado no capítulo anterior será apenas citado como por exemplo as expressões para o coeficiente de transmissão e etc.

$$|A^{(n+1)}\rangle = T|A^{(n)}\rangle, \quad (5.45)$$

com

$$T = M_1^{-1}N_1N_2^{-1}M_2. \quad (5.46)$$

5.5 Resultados Numéricos.

Apresentamos agora os resultados numéricos de nossas simulações para a transmissão do fônon acústico através da estrutura quasiperiódica formada por multicamadas constituídas dos materiais Quartzo/Ar. Os parâmetros físicos usados são os seguintes:

- (i) para o Ar[107]: $\rho = 1.41$, $C_{11} = 1.02$, $\zeta = 1.9$ e $\eta = 2.8$;
- (ii) para o Quartzo [108]: $\rho = 2.65$, $C_{44} = 58.2$, $C_{66} = 39.9$ e $C_{12} = 70.0$.

Aqui, as frequências estão em unidades de kHz, os termos elásticos em unidades de 10^9 N/m², os coeficientes de cisalhamento e viscosidade estão em unidades de 10^{-4} kg m⁻¹s⁻¹ e as densidades em unidades de 10^3 kg/m³. Representamos o espaçamento do quartzo que constitui a camada A pelo símbolo a igual a 1 mm e a razão $a/b = 1.0$. A incidência normal ($\theta = 0$) para o espectro de transmissão do fônon acústico como uma função da frequência ω para a segunda (AB), nona (89 camadas) e a décima primeira (233 camadas) geração do número de Fibonacci são mostrados nas figuras 2a, 2b e 2c respectivamente. Não existe qualquer “stop band” para o caso de duas camadas. Isto é esperado já que a estrutura neste caso não é robusta o suficiente para suportar “stop bands”. Sua transmissão é caracterizada por um espectro linear em torno de $T = 0.8$.

Observamos que até a sétima geração (37 camadas) da seqüência de Fibonacci não surge “stop bands” para o espectro de transmissão dos fônons transmitidos ao longo da estrutura. Esta situação será mudada apenas a partir da oitava geração do número de Fibonacci (55 camadas), com o surgimento de duas regiões de “stop bands” para a frequência $8.0 \text{ kHz} < \omega < 9.20 \text{ kHz}$ e $17.31 \text{ kHz} < \omega < 18.45 \text{ kHz}$ (veja a figura 5.3). Com o objetivo de enfatizar o surgimento destas “stop bands”, mostramos o espectro de transmissão quasiperiódico de Fibonacci na nona geração (ver figura 5.2b). De fato, a partir deste valor do número de geração podemos ver claramente a formação de uma estrutura de bandas para o espectro de transmissão com quatro “stop bands” e bandas de transmissão para vários intervalos de frequências.

Uma análise detalhada da curva mostra que o espectro de transmissão apresenta uma ação filtrante sobre os fônons em torno de duas amplas faixas de frequências, ou seja,

8.0 kHz < ω < 9.2 kHz e 17.2 kHz < ω < 18.4 kHz e outras duas bandas um pouco mais estreitas nas regiões 4.7 kHz < ω < 5.4 kHz e 14.1 kHz < ω < 14.8 kHz, o que corresponde a um gap proibido (“stop band”), devidos à reflexão de Bragg. Além disso, a estrutura é transparente (o coeficiente de transmissão é igual a 1.0) para várias frequências. A condição de transparência implica que as camadas A (Quartzo) e B (Ar) são ambas equivalentes do ponto de vista da onda acústica. Observe que o aumento da frequência reduz a propagação do número de fônons na estrutura (“pass-band”), conforme pode ser visto no gráfico o aumento da espessura das bandas com o aumento da frequência. Na figura 5.2c, que foi construída levando em conta a décima primeira geração da seqüência quasiperiódica de Fibonacci, temos um espectro mais fragmentado com um número maior de bandas e “pass-bands” caracterizando um perfil de informação mais rico. Portanto, se queremos ter um perfil bem definido para as bandas, precisamos ter um maior número de camadas.

Uma característica notável no espectro é que o “pass-band” na região de frequências 8.0kHz < ω < 9.2kHz não muda de uma geração para a outra significando a independência desta região com relação ao número de geração de Fibonacci. A figura 5.3 mostra com mais detalhe o perfil dos “stop bands” medidos para frequências em kHz como uma função do número de geração N , até a décima segunda geração da seqüência de fibonacci (significando 377 camadas). Constatamos que, como esperado, os “stop bands” apresentam um perfil fragmentado no espectro energético para grandes valores de N , com uma indicação de maior localização dos modos devido à competição entre as ordens aperiódicas de longo alcance, que é induzida pela quasiperiodicidade da estrutura, e a desordem de curto alcance, cuja importância depende criticamente do comprimento total da estrutura.

Para estudarmos este efeito, uma análise quantitativa será feita considerando agora o comportamento dos chamados expoentes de Lyapunov, que é a taxa exponencial média de convergência ou divergência do sistema em estudo, e também uma medida do grau de desordem dos sistemas dinâmicos[109]. E é definido por:

$$\gamma_N(\omega) = \frac{1}{2N} \ln[|T_N(\omega)|], \quad (5.47)$$

sendo $T_N(\omega)$ o coeficiente de transmissão para a N -ésima geração de Fibonacci. Estes expoentes para sistemas desordenados se relacionam com o comprimento de localização $\lambda(\omega)$ por [110]

$$\lambda(\omega) = \left[\lim_{N \rightarrow \infty} \gamma_N(\omega) \right]^{-1}, \quad (5.48)$$

mostrado como uma função da frequência ω na figura 5.4 para três gerações da seqüência de Fibonacci. Nesta figura a linha cheia representa o caso periódico (para o número de geração de Fibonacci $N = 2$), enquanto que a linha pontilhada representa a nona geração de Fibonacci e a linha tracejada e pontilhada representa a décima primeira geração da seqüência quasiperiódica de Fibonacci. Podemos observar que as bandas de transmissão nos espectros tornam-se cada vez mais fragmentadas com o aumento do número de geração de Fibonacci. Esta característica está intimamente ligada à natureza localizada dos auto-estados dos fônons na cadeia desordenada, e reflete o número de “passbands” em cada estrutura (quando o fator de localização é zero, os intervalos de frequências correspondentes são conhecidos como “passbands”). Para o caso periódico ($N = 2$) não se verifica “passbands” no intervalo de frequências consideradas, como era de se esperar, o que vemos é uma simples reta paralela ao eixo das frequências. Aumentado-se o número de geração de Fibonacci até $N = 11$, o número de “passbands” aumenta drasticamente, surgindo “passbands” para os intervalos de energia $6.73 \text{ kHz} < \omega < 7.72 \text{ kHz}$, $4.02 \text{ kHz} < \omega < 4.54 \text{ kHz}$ e $2.29 \text{ kHz} < \omega < 2.68 \text{ kHz}$. Além disso, é importante ressaltar que a presença de correlações de longo alcance na distribuição desordenada, demonstra ser um possível mecanismo para induzir deslocalização em sistemas de baixa dimensão [110]. No entanto, a presente correlação em nosso modelo não é forte o suficiente para produzir esta transição de correlação induzida, assim, os estados estacionários permanecem todos localizados no nosso modelo.

Para uma melhor compreensão da dependência do espectro de transmissão em relação ao ângulo de incidência θ , mostramos duas figuras 5.5 e 5.6. Na figura 5.5 mostramos uma figura plotada para a sétima geração da seqüência quasiperiódica de Fibonacci para três diferentes ângulos de incidência $\theta = 5^\circ$ (linha cheia), $\theta = 10^\circ$ (curva tracejada e pontilhada) e $\theta = 15^\circ$ (linha pontilhada). Podemos notar nesta figura o claro surgimento de uma região de frequências de “stop bands” para quase todo o intervalo de frequências à medida que a incidência afasta-se da normal (curva pontilhada). Esta figura é interes-

sante, pois mostra o surgimento de “stop bands” para uma geração de Fibonacci que até então não possuía stop bands (caso da incidência normal). Já na figura 5.6 mostramos a dependência angular para o espectro de transmissão do fônon para a sétima geração (linha cheia: trata-se da última geração do número de Fibonacci que não gera stop band) bem como a oitava (linha pontilhada: a primeira geração a gerar stop band) de Fibonacci para a estrutura fonônica como uma função de $\sin^2(\theta)$, para um valor fixo da frequência $\omega = 1.0$ kHz. Esta dependência angular fornece informações complementares sobre as características ressonantes dos fônons na estrutura de multicamadas quasiperiódica. O espectro de transmissão, embora caracterizado por um suave contorno, é fortemente sensível à escolha do ângulo de incidência, principalmente quando surgem “stop bands” no esboço do gráfico para a transmitância do fônon (linha pontilhada). A forte dependência do espectro de transmissão sobre o ângulo de incidência é devida à presença do “intermode Bragg reflection”, além do “intramode Bragg reflection” normal presente também no caso da incidência normal. Além disso, o “intermode Bragg reflection” gera gaps de frequências para o espectro no interior dos limites da zona de Brillouin para a estrutura de multicamadas, quebrando a possibilidade do espectro apresentar comportamento auto-similar. Além disso, a opacidade ou transparência da estrutura de multicamadas pode ser controlada usando um ângulo de incidência apropriado, esperamos que os resultados obtidos neste capítulo sirvam de ajuda a trabalhos experimentais na área.

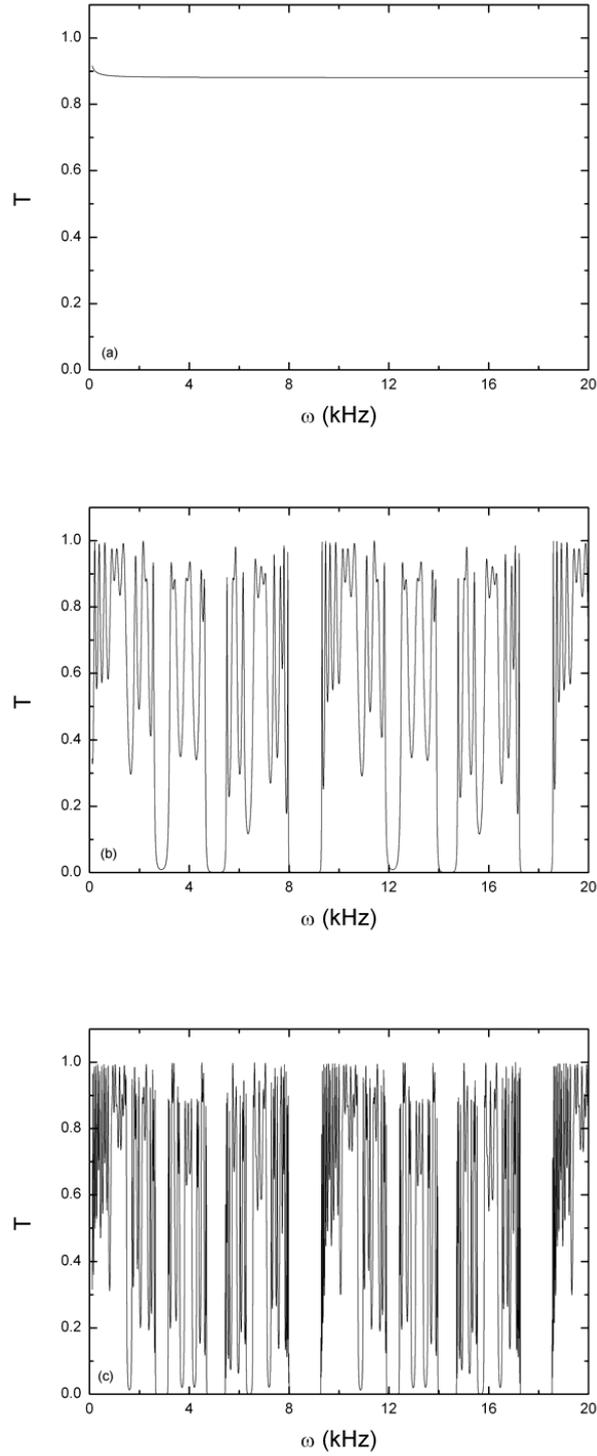


Figura 5.2: Espectro de transmissão do fônion acústico para uma estrutura fonônica de multicamadas quasiperiódica de Fibonacci para a incidência normal ($\theta = 0$): (a) a transmitância como uma função da frequência ω , para a segunda geração da seqüência de Fibonacci; (b) o mesmo que (a), mas para a nona geração da seqüência de Fibonacci; (c) o mesmo que em (a), mas agora para a décima primeira geração.

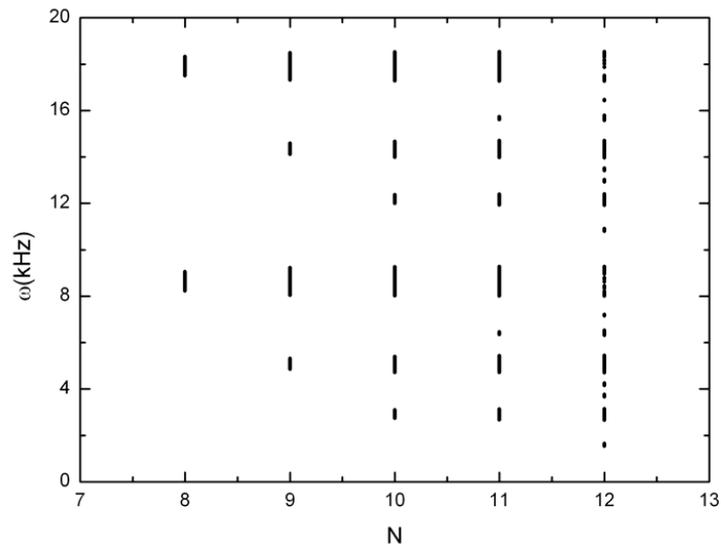


Figura 5.3: Distribuição de “stop bands” de frequências para a transmissão do fônon acústico como uma função do número de geração quasiperiódica de Fibonacci N .

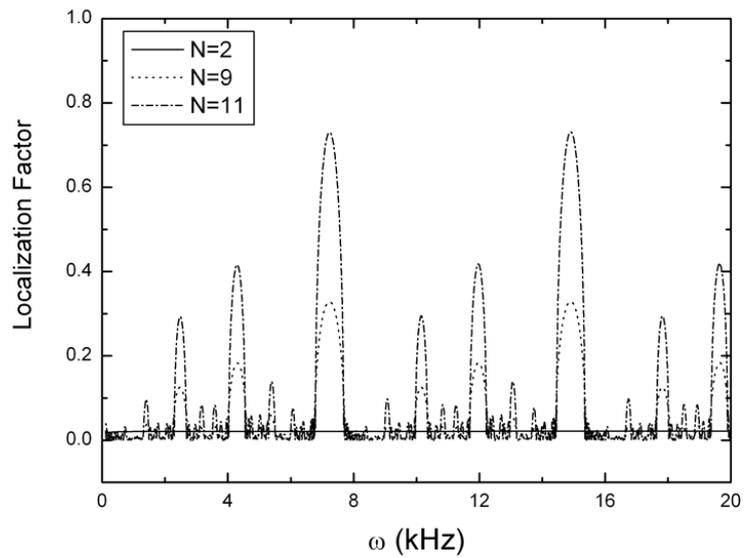


Figura 5.4: Fator de localização para várias gerações da sequência de Fibonacci. A linha cheia representa a segunda geração $N = 2$, enquanto que a linha pontilhada representa a nona geração e a pontilhada e tracejada representa a décima primeira geração do número de Fibonacci.

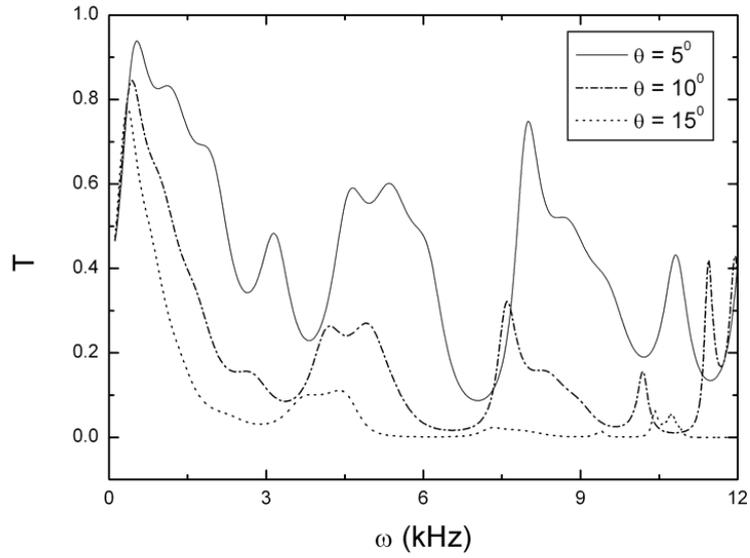


Figura 5.5: Incidência oblqua da onda acústica na estrutura de multicamadas quasiperiódicas de Fibonacci para três diferentes ângulos de incidência $\theta = 5^\circ$ (linha cheia), $\theta = 10^\circ$ (curva tracejada e pontilhada) e $\theta = 15^\circ$ (linha pontilhada) .

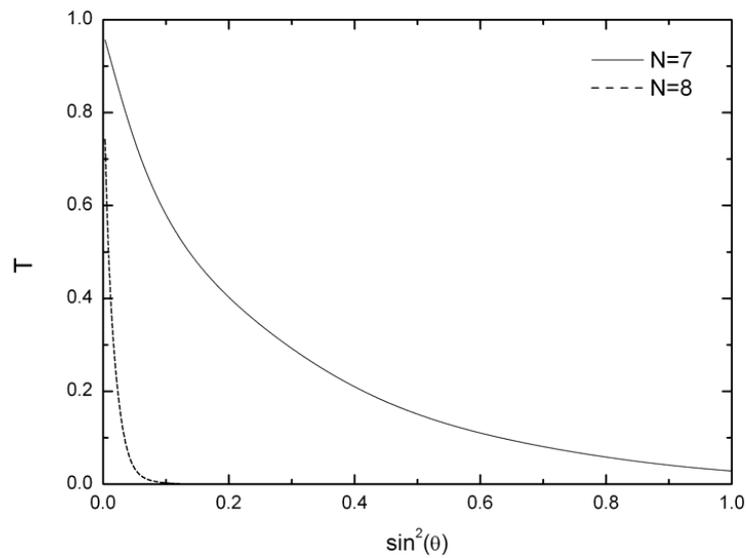


Figura 5.6: Espectro de transmissão para a sétima geração da estrutura de fibonacci, que é a ultima geração sem “stop bands” (linha cheia), e para a oitava geração da estrutura de Fibonacci, sendo esta a primeira geração que possui stop band (linha pontilhada), como uma função de $\sin^2(\theta)$, para um valor fixo da frequência $\omega = 1.0kHz$.

5.6 Conclusões.

Em resumo, descrevemos o espectro de transmissão para os fônons acústicos propagando-se em uma estrutura fonônica quasiperiódica de Fibonacci composta pelo sólido cristalino (cristal de quartzo) e o líquido argônio (Ar). A dinâmica dos fônons é descrita pelas equações diferenciais acopladas dentro do modelo de aproximação do campo estático. Mostramos que a super-rede quasiperiódica funciona com um filtro para fônons nas regiões de stop bands, como foi indicado nas figuras 5.2 e 5.3. Aumentando o número de geração de Fibonacci (em princípio a partir da oitava geração), mais fônons em uma camada (digamos a camada A) param nas bandas, podendo também ser transmitidos na estrutura não periódica, criando novos stop bands como pode ser visto na figura 5.3. O espectro de transmissão, conseqüentemente, tem uma forte intensificação, sugerindo a possibilidade de se construir melhores dispositivos acústicos. Podemos ajustar a frequência do fônion e a largura dos seus stop bands alterando os materiais constituintes, isto é, mudando o mismatch (desacordo) acústico entre as camadas constituintes (por exemplo, substituindo o cristal de quartzo por outro material líquido). Além disso, a nitidez do espectro de transmissão para a estrutura de multicamadas de Fibonacci, poderia ser utilizada para gerar ou detectar fônons de alta frequência termicamente excitados.

Experimentalmente, fônons ou o ultra-som são geralmente lançados na forma de um pulso ou pacote de ondas planas monocromáticas estudadas teoricamente. Assim para uma verificação experimental dos espectros de transmissão previstos e mostrados aqui, é importante analisar o comportamento de pulsos ou pacotes de fônons que são fônons em intervalos finitos de frequências (incluindo uma frequência ressonante) e não a de uma única frequência do fônion. Outra possibilidade para verificar nossos resultados é usar um método de pulso de luz de picosegundos ou a técnica de imagens de ultra-som.

Concluindo, calculamos o espectro de transmissão e a distribuição de stop bands de fônons acústicos propagando-se em uma super-rede quasiperiódica fonônica constituída pelo sólido cristalino Quartzo e pelo líquido (Ar). Esperamos que nossos resultados possam abrir uma perspectiva adicional para os dispositivos fonônicos explorando as propriedades dos band gaps fonônicos.

CAPÍTULO 6

Propagação de Ondas Acústicas em Estruturas Fonônicas do Tipo Líquido/Líquido.

6.1 Introdução.

Desde muito cedo os materiais líquidos tem sido estudados de modo exaustivo, sendo muitos trabalhos publicados sobre o assunto nas décadas de setenta e oitenta. Atualmente, podemos notar na literatura um grande número de publicações sobre o tema [111, 112, 113]. O sucesso da aplicação da técnica de ultra-som Doppler na investigação da propagação de ondas acústicas em líquidos são usados neste processo[114].

Além disso, observa-se um estudo crescente dos chamados cristais fonônicos que são os análogos dos cristais fotônicos para as ondas eletromagnéticas. Nestes materiais o comprimento de onda da onda acústica é da mesma ordem de grandeza que os espaçamentos dos arranjos ordenados do tipo periódico e quasiperiódicos, dando origem aos fenômenos de difração e reflexão de Bragg e também o surgimento dos “stop bands” fonônicos (nos espectro transmissão) que são regiões de filtro para a onda elástica incidente na estrutura periódica e quasiperiódica. Estes “stop bands” dependem fortemente do típico arranjo ordenado. Um experimento bastante interessante envolvendo tais estruturas fonônicas é realizado incidindo uma onda ultra-sônica em uma estrutura composta por cilindros de aço imersos em líquido [115].

Atualmente muitos estudos envolvendo a propagação dos fônons acústicos nas chamadas estruturas periódicas e quasiperiódicas fonônicas ainda despertam interesse

[116, 117], pelo simples fato de que em tais estruturas surgem os “band gaps” fonônicos (regiões no espectro) por onde o fônon acústico não pode se propagar. Estes tipos de estrutura artificiais podem ser usadas em aplicações industriais, como na construção de filtros ou dispositivos de isolamento acústico dos ruídos indesejáveis.

Os líquidos em geral, bem como qualquer estrutura elástica, possuem modos coletivos de vibração que se estendem por todo o limite do sistema, podendo ser descritos pela teoria clássica da elasticidade em que o sistema é tratado como um contínuo que possui constantes elásticas. Assim, nos líquidos, ocorre o surgimento acentuado dos modos longitudinais que são sempre observados mediante as técnicas de ultra-som ou por meio de técnicas de espalhamento inelástico. No entanto, os modos transversais geralmente não são detectados pelo ultra-som nos líquidos (isto se deve ao baixo cisalhamento), podendo surgir tais modos em regiões de frequências da ordem de THz [118].

Neste capítulo resolvemos a equação de Euler da fluido-dinâmica no volume da célula unitária líquida composta dos materiais metálicos Hg e Ga (na temperatura ambiente) que compõe a nossa super-rede periódica e quasiperiódica de Fibonacci. Como foi descrito nos capítulos anteriores, desenvolveremos os cálculos analíticos com o objetivo de obter a matriz transferência (neste caso de dimensão 2×2) calculada com o auxílio das condições de fronteiras elásticas nas interfaces da super-rede. Esta matriz relaciona as amplitudes dos campos elásticos presentes no meio líquido I (Hg) com aqueles presentes no meio líquido II (Ga) de tal maneira que, toda a informação elástica que se propaga através da super-rede é descrita por tal matriz, cujo determinante deve ser igual a unidade (matriz unimodular).

A matriz transferência pode ser multiplicada N vezes reproduzindo o que chamamos de seqüência de Fibonacci para a multiplicação matricial, onde N é o número de geração da seqüência. A taxa de transferência de energia durante o crescimento da estrutura de Fibonacci, é calculada usando a chamada matriz de transmisividade que é obtida da matriz transferência fazendo considerações a respeito das amplitudes dos campos de entrada e saída da estrutura. Investigaremos também os espectros de transmitância e o possível surgimento dos “stop bands” fonônicos bem como a análise dos expoentes de Lyapunov discutidos no capítulo anterior. Esperamos que este assunto seja de importância prática, não só pelo fato de podermos ajustar as estruturas de bandas do cristal fonônico, mas

também pelo fato de podermos controlar a propagação de ondas elásticas intencionalmente introduzindo a quasiperiodicidade.

6.2 Modelo Teórico para o Sistema Líquido.

O nosso modelo neste capítulo é baseado na figura 6.1 onde investigamos o efeito da propagação de uma onda acústica pelo interior de um super-rede quasiperódica binária de Fibonacci do tipo $\cdots Hg/Ga \cdots$ cercada por um substrato que pode ser um meio transparente a luz (vácuo).

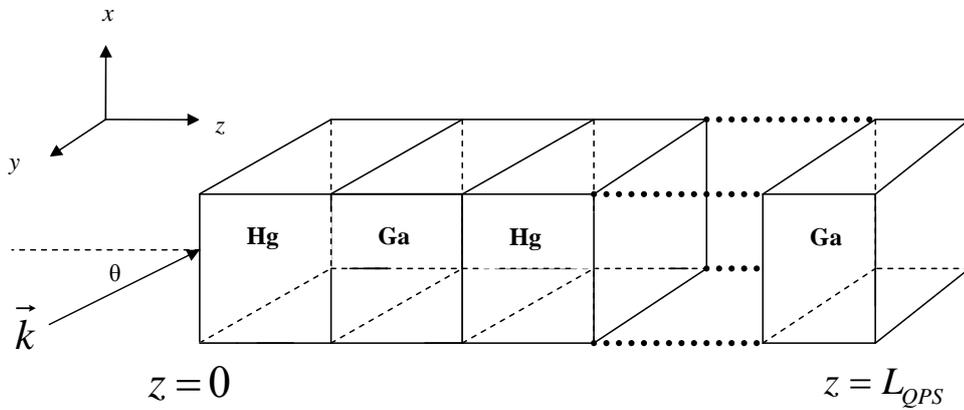


Figura 6.1: Representação esquemática mostrando a geometria do sistema de multicamadas quasiperiódicas consideradas neste capítulo, como uma sequência alternada dos constituintes líquidos Hg e Ga formando uma estrutura de Fibonacci.

Neste capítulo vamos detalhar o cálculo das soluções u_x e u_z nas camadas líquidas (Hg) e (Ga) (lembrando que $u_y = 0$ no líquido pois este não suporta cisalhamento nesta direção). Ele será realizado (como discutido anteriormente) usando-se a equação de Euler da fluido dinâmica expressa em termos do deslocamento elástico no meio líquido:

$$-\rho\omega^2\vec{u} - [\rho v_L^2 - i\omega(\zeta + \frac{4}{3}\eta)]\nabla(\nabla \cdot \vec{u}) - i\omega\eta\nabla \times \nabla \times \vec{u} = 0. \quad (6.1)$$

Aqui ζ e η representam a viscosidade no volume do líquido e o cisalhamento no mesmo respectivamente, e $v_L = \sqrt{C_{11}/\rho}$ é velocidade longitudinal da onda acústica.

Esta forma da equação de Euler ignora qualquer ligação entre o calor ou a densidade de entropia, que são somente importantes quando consideramos o espectro de flutuação de densidades do fluido. Observe também que aqui não consideramos a componente transversal da velocidade no líquido v_{Tl} já este não a suporta.

Admitindo novamente soluções do tipo onda plana, a substituição da equação 5.5 na equação 5.18, resulta no fato de podemos reescrevê-la na forma de duas equações diferenciais componentes acopladas (sistema de equações). Usando as expressões para os operadores diferenciais $\nabla(\nabla \cdot \vec{u})$ e $\nabla \times \nabla \times \vec{u}$ em função de suas coordenadas cartesianas, teremos:

$$\begin{aligned} \nabla(\nabla \cdot \vec{u}) &= \hat{i} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] + \\ &\hat{j} \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] + \\ &\hat{k} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right], \quad (6.2) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \nabla \times \nabla \times \vec{u} &= \hat{i} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} - \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \right] + \\ &\hat{j} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_z}{\partial y} - \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \right] + \\ &\hat{k} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} - \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_z}{\partial y} - \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) \right] \quad (6.3) \end{aligned}$$

Substituindo as duas relações acima na equação de Euler (equação 6.1) levando-se em conta o fato ($u_y = 0$) teremos o seguinte sistema de equações diferenciais:

$$-\rho\omega^2 u_x - [\rho v_L^2 - i\omega(\zeta + \frac{4}{3}\eta)] \left[\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right] - i\omega\eta \left[\frac{\partial^2 u_z}{\partial z \partial x} - \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right] = 0, \quad (6.4)$$

$$-\rho\omega^2 u_z - [\rho v_L^2 - i\omega(\zeta + \frac{4}{3}\eta)] \left[\frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z \partial x} \right] - i\omega\eta \left[\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} - \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} \right] = 0, \quad (6.5)$$

onde juntamente com as soluções tipo onda plana (equações 4.6 e 4.7) podemos construir o seguinte sistema

$$-\left(\frac{\rho}{\eta^2}\right)L^2u_x + \left(\frac{\rho}{\eta^2}\right)q_xKu_z + \frac{q_T^2}{\beta'}q_xKu_z - \frac{q_T^2}{\beta'}q_xu_x = 0, \quad (6.6)$$

$$-\left(\frac{\rho}{\eta^2}\right)q_L^2u_z + \left(\frac{\rho}{\eta^2}\right)[K^2u_z + Kq_xu_x] + \frac{q_T^2}{\beta'}[q_xKu_x - q_x^2u_z] = 0. \quad (6.7)$$

Para resolver este sistema de equações diferenciais, empregamos a mesma técnica usada no capítulo 4 rescrevendo o sistema acima numa forma matricial;

$$Dx = 0, \quad (6.8)$$

onde

$$D = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix}, \quad (6.9)$$

com

$$\alpha_{11} = -\left(\frac{\rho L^2}{\eta^2}\right) - \frac{q_T^2 q_x^2}{\beta'}, \quad (6.10)$$

$$\alpha_{12} = \left(\frac{\rho q_x K}{\eta^2}\right) - \frac{q_T^2 q_x K}{\beta'}, \quad (6.11)$$

$$\alpha_{21} = \frac{\rho K q_x}{\eta^2} + \frac{q_T^2 K q_x}{\beta'} \quad (6.12)$$

$$\alpha_{22} = \frac{\rho}{\eta^2}[-q_L^2 + K^2] - \frac{q_T^2 q_x^2}{\beta'}. \quad (6.13)$$

$$(6.14)$$

Desprezando os efeitos do vetor de onda transversal q_T , a matriz D assume a forma D' indicada abaixo:

$$D' = \begin{pmatrix} \left(\frac{\rho L^2}{\eta^2}\right) & \frac{\rho q_x K}{\eta^2} \\ \frac{\rho K q_x}{\eta^2} & \frac{\rho}{\eta^2}[-q_L^2 + K^2] \end{pmatrix}, \quad (6.15)$$

onde a solução da equação característica é obtida quando $\det(D')=0$. Assim

$$-\frac{\rho^2 L^2}{\eta^4}(-q_L^2 + K^2) - \frac{\rho^2 q_x^2 K^2}{\eta^4} = 0. \quad (6.16)$$

Resolvendo-se a relação acima em termos de K obtemos $K = \pm L$. Logo a solução geral para o par (u_x, u_z) no nosso modelo é:

$$u_x = q_x[A_1 \exp(iLz) + A_2 \exp(-iLz)], \quad (6.17)$$

$$u_z = L[A_1 \exp(iLz) - A_2 \exp(-iLz)]. \quad (6.18)$$

onde os coeficientes A_s [$s = (1, 2)$] podem ser determinados via condições de fronteira , e

$$L^2 = q_L^2 - q_x^2, \quad (6.19)$$

$$q_L^2 = \rho\omega^2/(\rho v_L^2 - i\omega(\zeta + \frac{4}{3}\eta)). \quad (6.20)$$

6.3 Matriz Transferência.

Consideramos neste capítulo uma super-rede binária do tipo $/Hg/Ga \dots /$ vácuo. A célula unitária possui uma espessura $L = a + b$, onde a é a espessura da camada formada pelo Hg e b a espessura da camada líquida Ga. Devido a simplicidade do nosso modelo usaremos apenas as continuidades das componentes u_x e u_z nas interfaces da n -ésima célula unitária, isto é, nas interfaces $z = nL + a$ (Hg/Ga) e $z = (n + 1)L$ (Ga/Hg). Assim:

(a) continuidade do deslocamento transversal u_x :

$$A_1^{n+1} f_a + A_2^{n+1} \bar{f}_a = B_1^n + B_2^n, \quad (6.21)$$

$$A_1^n + A_2^n = B_1^n f_b + B_2^n \bar{f}_b. \quad (6.22)$$

(b) continuidade do deslocamento u_z :

$$L_{ab}[A_1^{n+1} f_a - A_2^{n+1} \bar{f}_a] = B_1^n - B_2^n, \quad (6.23)$$

$$L_{ab}[A_1^n - A_2^n] = B_1^n f_b - B_2^n \bar{f}_b. \quad (6.24)$$

As seguintes definições são válidas para as condições de contorno acima :

$$f_a = \exp(iLa) = 1/\bar{f}_a, \quad (6.25)$$

$$f_b = \exp(iLb) = 1/\bar{f}_b, \quad (6.26)$$

$$L_{ab} = L_a/L_b. \quad (6.27)$$

Podemos definir os kets envolvendo as amplitudes nas soluções nas condições de fronteiras em cada meio material, como

$$|A^{(n)}\rangle = \begin{pmatrix} A_1^{(n)} \\ A_2^{(n)} \end{pmatrix}, \quad (6.28)$$

e de maneira similar, a expressão $|B^{(n)}\rangle$ assume a mesma estrutura. A reunião das equações (6.21)a (6.24) gera duas relações matriciais da forma:

$$M_1|A^{(n+1)}\rangle = N_1|B^{(n)}\rangle, \quad (6.29)$$

$$M_2|A^{(n)}\rangle = N_2|B^{(n)}\rangle, \quad (6.30)$$

onde

$$M_1 = \begin{pmatrix} f_a & \bar{f}_a \\ L_{ab}f_a & L_{ab}\bar{f}_a \end{pmatrix}, \quad (6.31)$$

e

$$N_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (6.32)$$

$$M_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ L_{ab} & L_{ab} \end{pmatrix}, \quad (6.33)$$

e

$$N_2 = \begin{pmatrix} f_b & \bar{f}_b \\ f_b & -\bar{f}_b \end{pmatrix}. \quad (6.34)$$

A combinação do sistema de equações matriciais (6.29) e (6.30), dá origem a relação que descreve as propriedades da n -ésima célula com as da sua subsequente via a matriz T (indicada abaixo) chamada de matriz transferência.

$$|A^{(n+1)}\rangle = T|A^{(n)}\rangle, \quad (6.35)$$

com

$$T = M_1^{-1}N_1N_2^{-1}M_2. \quad (6.36)$$

Para o cálculo do coeficiente de transmissão para este modelo, deve ser considerado a relação matricial 6.35. Neste caso as amplitudes possuem significados interessantes do ponto de vista físico. Assim, por exemplo, A_1^n representa toda a amplitude incidente e fazemos seu valor assumir a unidade (chamamos isto de normalização), A_2^{n+1} é nulo já que, não existe onda elástica vindo da direita (na figura 6.1), restando apenas os valores de A_1^{n+1} que chamaremos de Tr pois esta é fisicamente a amplitude transmitida. Analogamente A_2^n assume o valor R da refletância (amplitude refletida no interior da estrutura). Desta maneira, a equação matricial acima assume a forma:

$$\begin{pmatrix} A_1^{n+1} \\ A_2^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1^n \\ A_2^n \end{pmatrix}$$

ou

$$\begin{pmatrix} T_r \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix}$$

,

Da relação acima tiramos o sistema envolvendo T_r e R na forma:

$$T_r = T_{11} + T_{12}R, \quad (6.37)$$

$$0 = T_{21} + T_{22}R, \quad (6.38)$$

cuja solução é

$$T_r = \frac{1}{T_{22}}, \quad (6.39)$$

$$R = -\frac{T_{21}}{T_{22}}. \quad (6.40)$$

No cálculo do coeficiente de transmissão T_r levamos em conta o fato da matriz transferência ser unimodular ($\det(T)=1$). Além disso, usaremos a expressão 6.39 para obter os espectros de transmissão para o nosso modelo teórico na super-rede de Fibonacci.

6.4 Resultados Numéricos.

Apresentamos agora os resultados numéricos de nossas simulações para a transmissão do fônon acústico através da estrutura quasiperiódica formada por multicamadas constituídas dos materiais Hg/Ga e Ga/Hg. Os parâmetros físicos usados são os seguintes:

- (i) para o Hg[119, 106]: $\rho = 13.6$, $v_L = 1.5$, $\zeta = 7.02$ e $\eta = 15.6$;
- (ii) para o Ga [120, 121]: $\rho = 6.1$, $v_L = 2.86$, $\zeta = 11.82$ e $\eta = 19.7$.

Aqui, as frequências estão em unidades de MHz, as velocidades longitudinais estão em unidades de 10^3 m/s, os coeficientes de cisalhamento e viscosidade estão em unidades de 10^{-4} kg m⁻¹s⁻¹ e as densidades em unidades de 10^3 kg/m³. Representamos o espaçamento do mercúrio, que constitui a camada A, pelo símbolo a igual a 1 mm e a razão $a/b = 2.0$. A incidência normal ($\theta = 0$) para o espectro de transmissão do fônon acústico como uma função da frequência ω para a sétima (34 camadas), nona (89 camadas) e a décima primeira (233 camadas) geração do número de Fibonacci são mostrados nas figuras 6.2a, 6.2b e 6.2c respectivamente para a estrutura do tipo Hg/Ga.

Uma análise detalhada das curvas mostram que os espectros de transmissão apresentam uma ação filtrante sobre os fônons em torno das faixas de frequências. Como podemos observar na figura 6.2a, existem três regiões de “stop band” para os seguintes intervalos $1.1 \text{ MHz} < \omega < 1.26 \text{ MHz}$, $1.72 \text{ MHz} < \omega < 2.1 \text{ MHz}$ e $4.19 \text{ MHz} < \omega < 4.35 \text{ MHz}$. Note que tais regiões permanecem quase que inalteradas na figura 6.2b sofrendo apenas pequenos acréscimos como pode ser observado para os novos intervalos de frequências $1.0 \text{ MHz} < \omega < 1.3 \text{ MHz}$, $1.71 \text{ MHz} < \omega < 2.2 \text{ MHz}$ e $4.10 \text{ MHz} < \omega < 4.4 \text{ MHz}$ na figura 6.2b. Além disso, na figura 6.2b surgem picos de frequências em torno dos valores $\omega = 0.68 \text{ MHz}$, $\omega = 1.4 \text{ MHz}$, $\omega = 1.6 \text{ MHz}$, $\omega = 2.3 \text{ MHz}$, $\omega = 3.73 \text{ MHz}$, $\omega = 4.6 \text{ MHz}$ e $\omega = 4.7 \text{ MHz}$. Estes picos funcionam como “embriões” para o surgimento de novas regiões de “stop bands” com o aumento da geração de Fibonacci (como pode ser visualizado na figura 6.2c).

Na figura 6.2c podemos perceber o caráter inalterado das três regiões de “stop bands” vistas nas figuras 6.2a e 6.2b funcionando como regiões proibidas para a propagação do fônon (como pode ser visualizado na figura 6.4a, onde mostramos uma distribuição de

“stop bands” para vários números de geração da seqüência quasiperiódica de Fibonacci até a décima terceira geração (610 camadas)). Observe na figura 6.4a que o aumento do número de geração acarreta uma superposição de picos de freqüências dando origem a compridas regiões de “stop bands” a partir da décima primeira geração (isto se deve ao maior número de interferências destrutivas no interior da super-rede).

Nas figuras 6.3a, 6.3b e 6.3c, investigamos o comportamento dos espectros de transmissão para incidência normal considerando agora a inversão da ordem geométrica dos constituintes da super-rede, ou seja, investigamos o sistema Ga/Hg.

Como primeira análise mostramos na figura 6.3a o espectro de transmissão para a sétima geração da seqüência quasiperiódica de Fibonacci. Podemos notar neste espectro o claro surgimento de um número acentuado de “stop bands” nas regiões $0.61 \text{ MHz} < \omega < 0.68 \text{ MHz}$, $1.13 \text{ MHz} < \omega < 1.19 \text{ MHz}$, $2.11 \text{ MHz} < \omega < 2.19 \text{ MHz}$, $2.61 \text{ MHz} < \omega < 2.69 \text{ MHz}$, $3.67 \text{ MHz} < \omega < 3.76 \text{ MHz}$ e $4.31 \text{ MHz} < \omega < 4.41 \text{ MHz}$, em comparação com os espectros anteriores (figuras 6.2a, 6.2b e 6.2c) nas mesmas condições.

Estas regiões permanecem quase inalteradas para os espectros na nona geração (figura 6.3b) e décima primeira (figura 4.3c) geração de Fibonacci embora sejam de comprimento menor que os espectros anteriores para o caso Hg/Ga.

Com o objetivo de verificar como ocorre a distribuição do “stop bands” para as várias gerações da seqüência de Fibonacci construímos a figura 6.4b. Observe que algumas faixas permanecem fixas (por exemplo, a faixa em torno de $\omega = 3.7 \text{ MHz}$) até a décima primeira geração, surgindo um alargamento do “stop band” devido a superposição de picos (a partir da décima segunda geração). Além disso, a estrutura é transparente (o coeficiente de transmissão é igual a 1.0) para várias freqüências. A condição de transparência implica que as camadas A (Hg) e B (Ga) são ambas equivalentes do ponto de vista da onda acústica.

Para investigar a dependência do fator de localização que fisicamente indica o grau de desordem na estrutura, plotamos este fator como uma função da freqüência ω nas figuras 6.5a (representando a geometria Hg/Ga) e 6.5b (representando a geometria Ga/Hg). Aqui consideramos três diferentes gerações da seqüência quasiperiódica de Fibonacci (para ambos os casos), sendo a sétima (linhas cheias), nona (linhas pontilhadas) e a décima primeira geração (linhas pontilhadas e tracejadas). Podemos observar que as picos de máxima des-

ordem (maior valor do fator de localização) ocorrem para a geometria Ga/Hg em relação a Hg/Ga. Além disso, observamos um número maior de “passbands” (regiões de frequências para as quais o fator de localização é nulo) para a mesma geometria (Ga/Hg). Isto se deve ao fato da baixa densidade do gálio em relação ao mercúrio, oferecer uma alta velocidade de propagação dos fônons na estrutura quasiperiódica.

Para uma compreensão mais detalhada acerca da dependência angular do espectro de transmissão do fônons para o nosso modelo, mostramos nas figuras 6.6a (geometria Hg/Ga) e 6.6b (Ga/Hg) a representação do espectro de transmissão (esta dependência angular fornece informações complementares sobre as características ressonantes dos fônons na estrutura de multicamadas quasiperiódica), como uma função de $\sin^2(\theta)$ para um valor fixo da frequência $\omega = 1.0$ MHz para a décima primeira geração da seqüência quasiperiódica de Fibonacci. Analisando a figura 6.6a notamos o claro surgimento de regiões de “stop band” para os seguintes valores $0.0 < \sin^2(\theta) < 0.1$, $0.32 < \sin^2(\theta) < 0.46$ e $0.65 < \sin^2(\theta) < 0.79$. Por outro lado, na figura 6.6b vemos uma enorme região de “stop band” no intervalo $0.27 < \sin^2(\theta) < 1.0$, sugerindo que a partir deste valor a estrutura fica totalmente impenetrável (para $\omega = 1$ MHz). Isto está intimamente ligado a difração de Bragg.

Para investigar a dependência angular do espectro de transmissão com a frequência ω , mostramos respectivamente para o ângulo de incidência $\theta = 45^\circ$ nas figuras 6.7a e 6.7b a distribuição de “stop bands” de frequências como uma função do número de geração de Fibonacci N e a dependência do fator de localização em relação a frequência.

No estudo teórico do nosso modelo, constatamos que a incidência da onda elástica em nossa estrutura (Hg/Ga) a baixos ângulos ($\theta < 15^\circ$) não provocou alterações acentuadas no espectro de transmissão (conseqüentemente nos demais resultados). Porém, para ângulos acima de 30° (como está representado nas figuras 6.7a e 6.7b), notamos um aumento nas larguras dos “stop bands” para cada número de geração, bem como, uma desordem do sistema comprovada pela figura 6.7b com o deslocamento dos picos máximos do fator de localização. No entanto, analisando as figuras 6.8a e 6.8b que representam respectivamente os mesmos espectros vistos anteriormente (figuras 6.7a e 6.7b), só que agora, considerando $\theta = 15^\circ$ e levando-se em conta a geometria Ga/Hg, notamos que a estrutura Ga/Hg é mais sensível a uma mudança no ângulo de incidência em comparação

com a geometria Hg/Ga. Além disso, verificamos na figura 6.8a uma pequena variação nas faixas de “stop bands” sendo que não existe alteração na largura das faixas em torno da frequência $\omega = 4$ MHz.

Constatamos também na figura 6.8b um aumento considerável dos picos máximos para o fator de localização, indicando uma maior sensibilidade a uma pequena mudança no ângulo de incidência (fato este que não ocorre com a estrutura Hg/Ga).

Finalizando nossa análise, descrevemos na figura 6.9 o espectro de localização para a décima primeira geração da seqüência quiesperiódica de Fibonacci para $\theta = 15^\circ$, considerando a estrutura Ga/Hg (linha pontilhada) e a estrutura Hg/Ga (linha cheia). Como esperado a geometria Ga/Hg possui número maior de “passbands” bem como, uma maior desordem evidenciada pela posição dos picos máximos do fator de localização.

Esperamos que nossos resultados de alguma forma contribuam a literatura já existente no sentido de enriquecer trabalhos futuros na área.

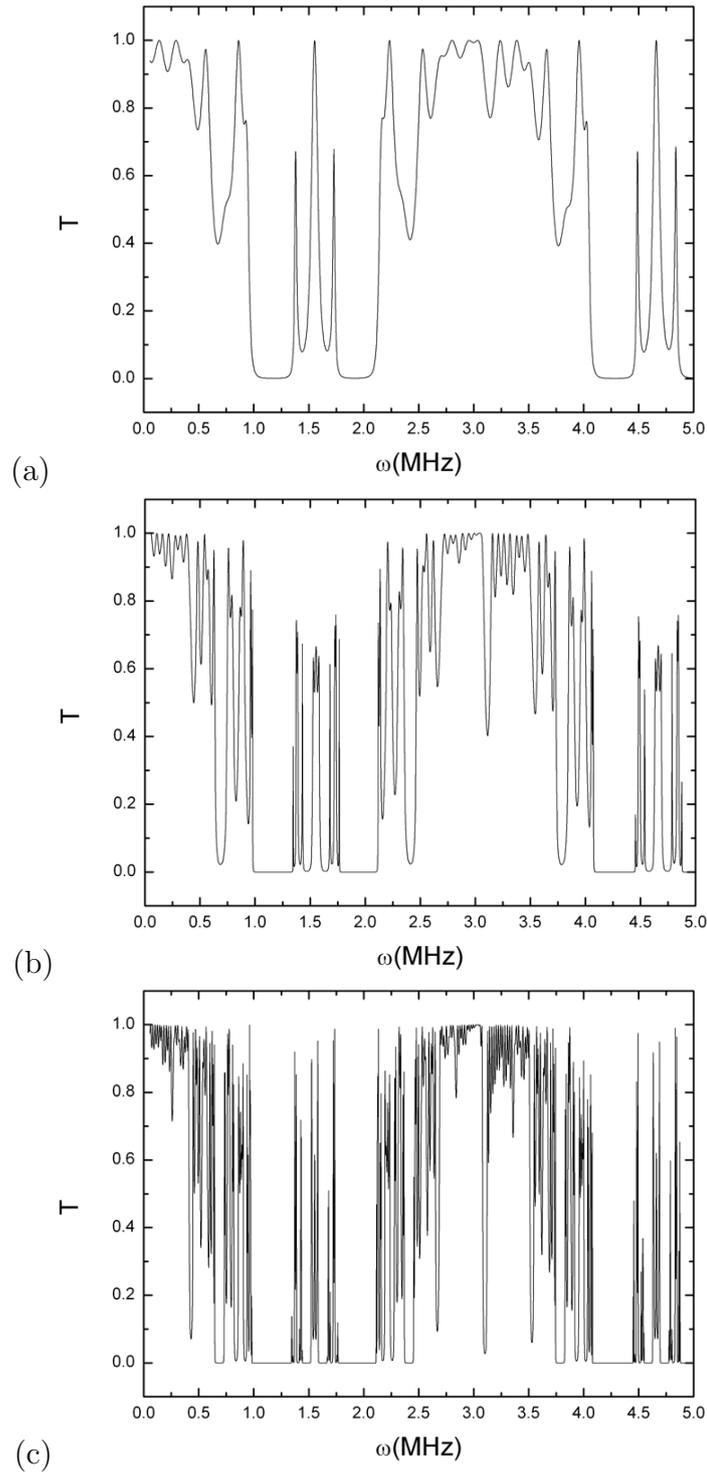


Figura 6.2: (a) Espectro de transmissão do fônon acústico para uma estrutura fonônica de multicamadas quasiperiódica de Fibonacci considerando a geometria Hg/Ga para a incidência normal ($\theta = 0$) na sétima geração da seqüência de Fibonacci. (b) O mesmo que em (a), só que agora na nona geração de Fibonacci. (c) O mesmo que em (a), considerando a décima primeira geração de Fibonacci.

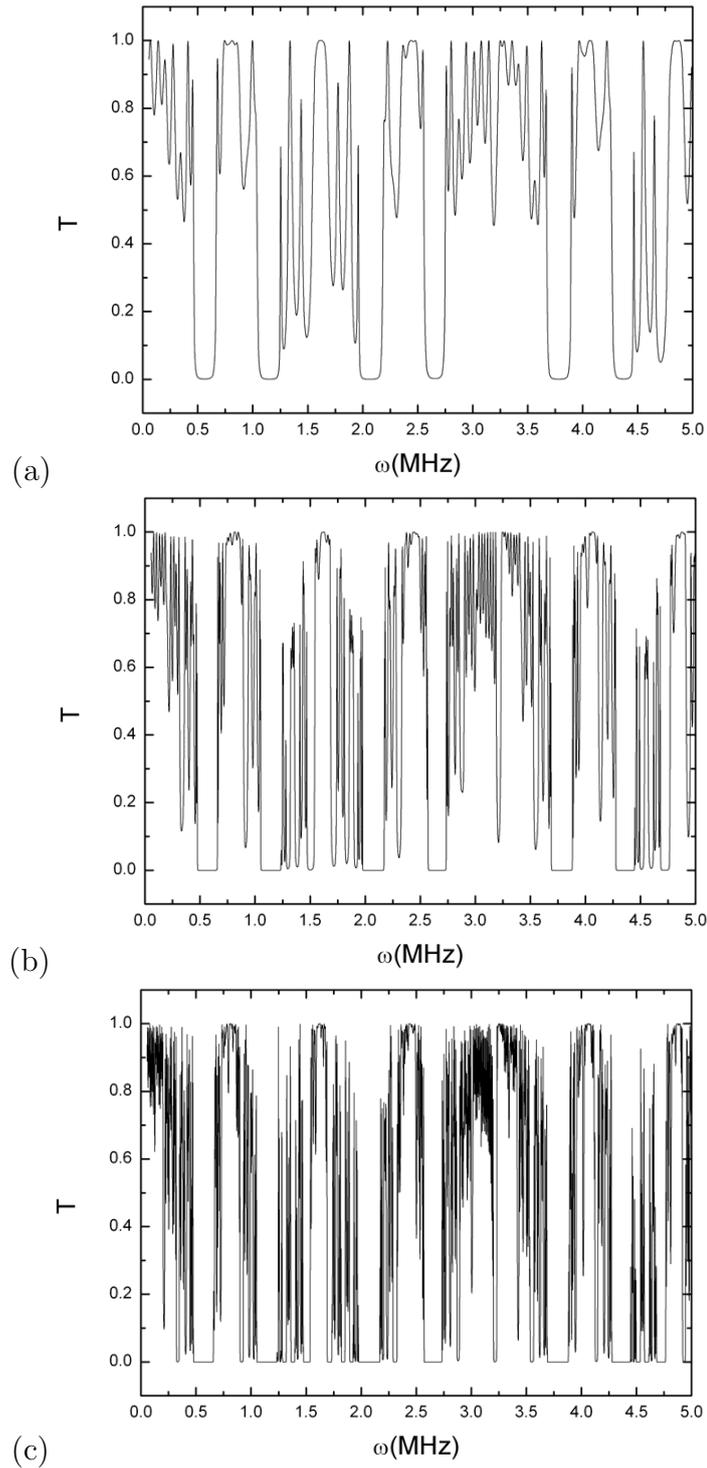


Figura 6.3: (a) Espectro de transmissão do fônon acústico para uma estrutura fonônica de multicamadas quasiperiódica de Fibonacci considerando a geometria Ga/Hg para a incidência normal ($\theta = 0$) na sétima geração da seqüência de Fibonacci. (b) O mesmo que em (a), só que agora na nona geração de Fibonacci. (c) O mesmo que em (a), considerando a décima primeira geração de Fibonacci.

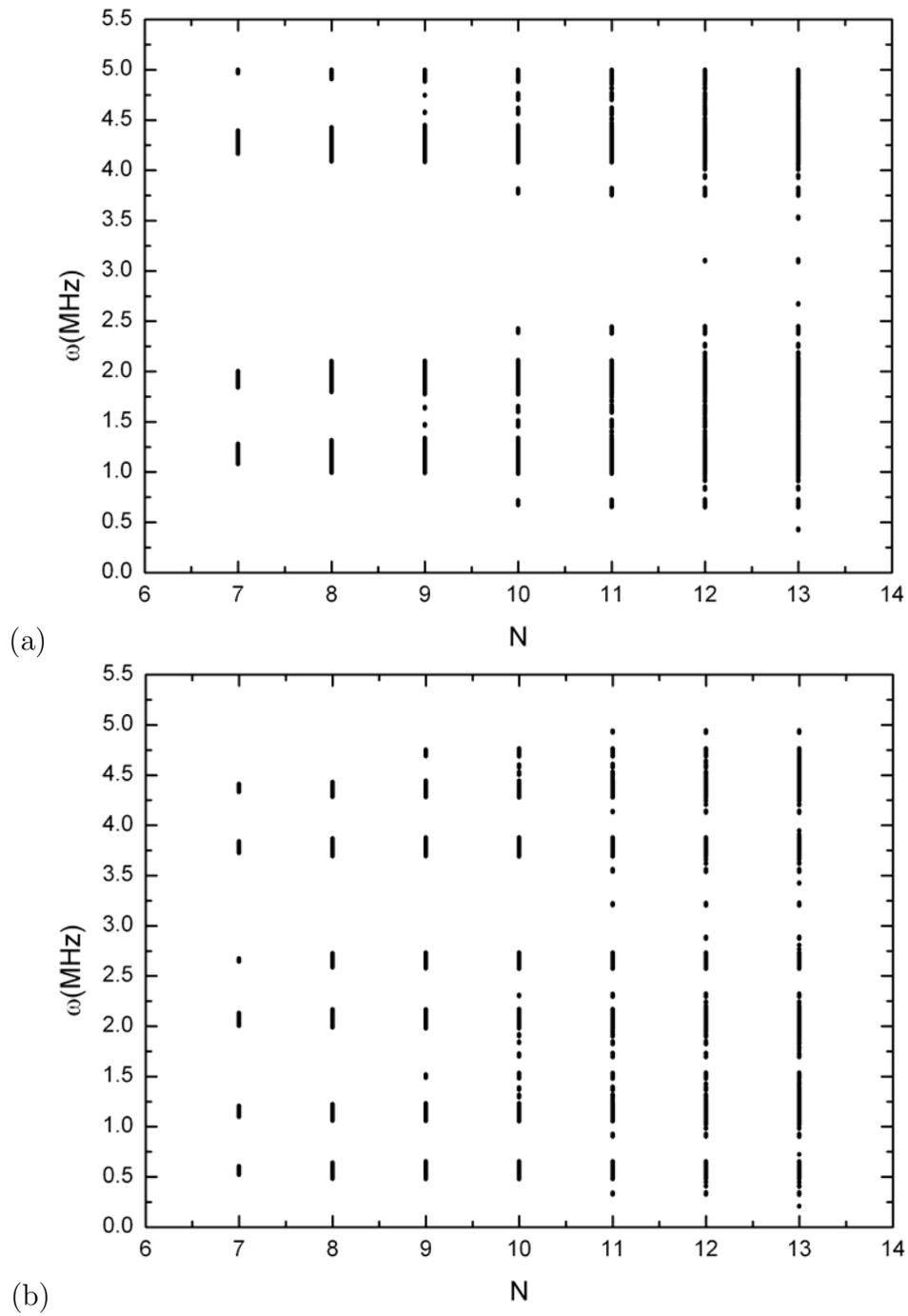


Figura 6.4: (a) Distribuição de “stop bands” de frequências para a transmissão do fônon acústico como uma função do número de geração quasiperiódica de Fibonacci N considerando a geometria Hg/Ga. (b) O mesmo que em (a), só que agora, considerando a geometria Ga/Hg.

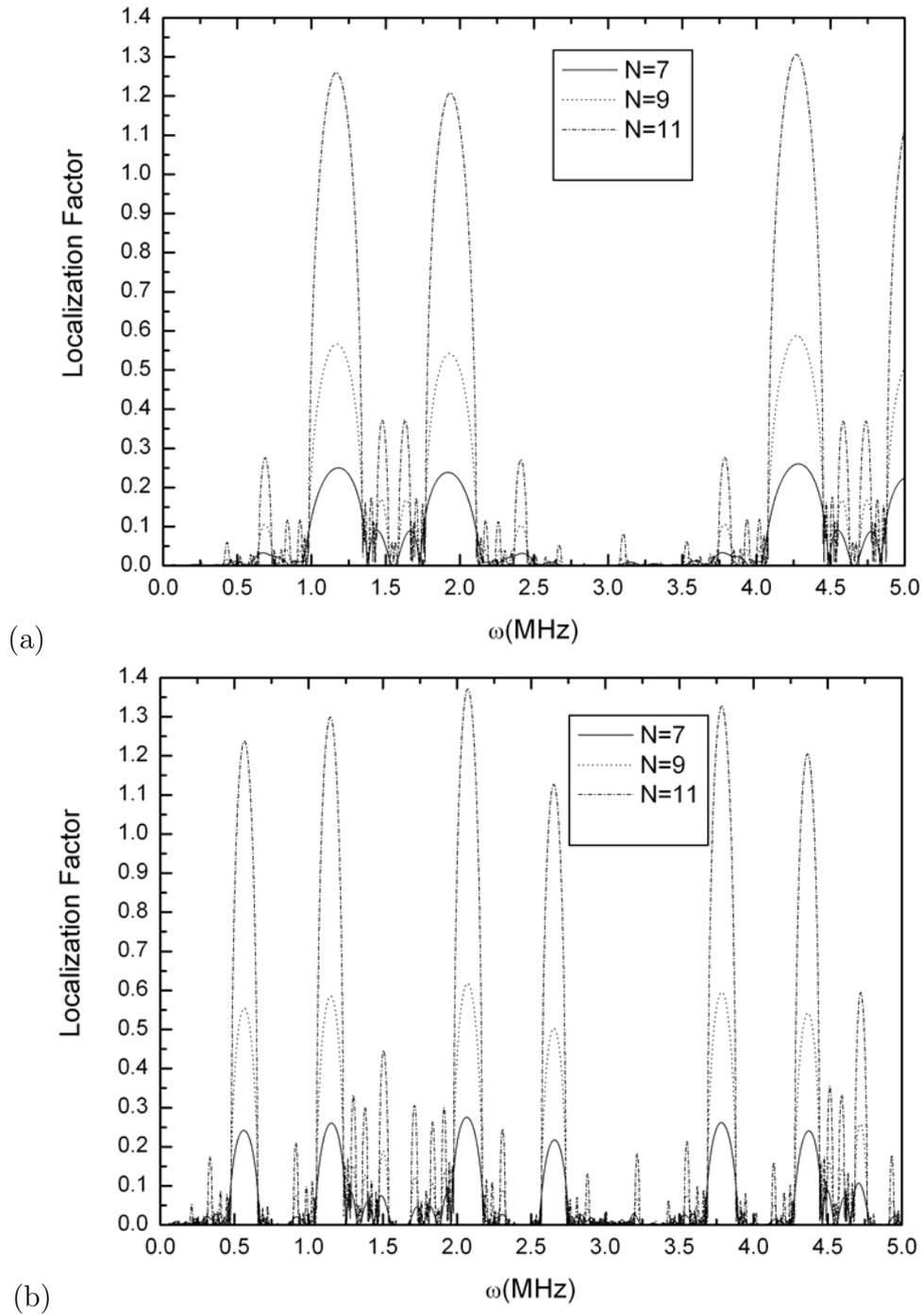
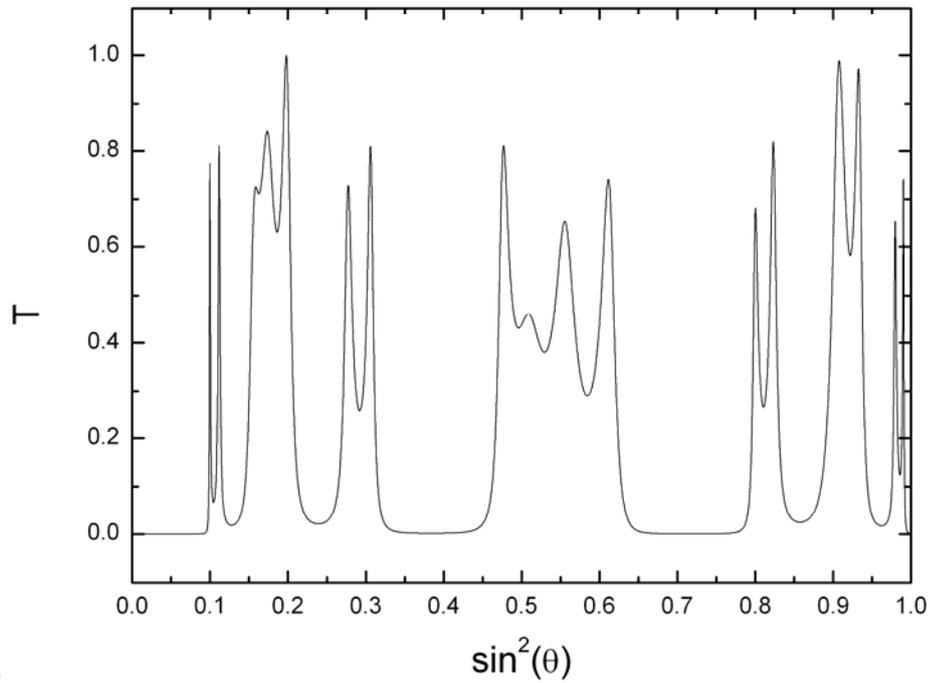
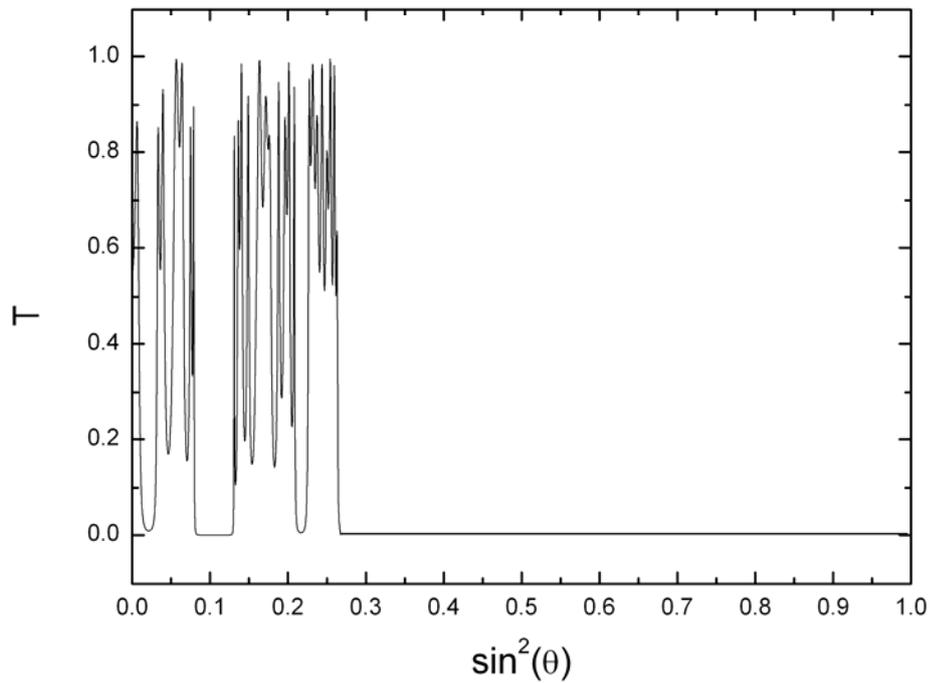


Figura 6.5: (a) Fator de localização para várias gerações da seqüência de Fibonacci considerando a geometria Hg/Ga. A linha cheia representa a sétima geração, enquanto que a linha pontilhada representa a nona geração e a pontilhada e tracejada representa a décima primeira geração do número de Fibonacci. (b) O mesmo que em (a), só que agora, considerando a geometria Ga/Hg.



(a)



(b)

Figura 6.6: (a) Espectro de transmissão para a décima primeira geração da estrutura de fibonacci(considerando a geometria Hg/Ga) como uma função de $\sin^2(\theta)$, para um valor fixo da frequência $\omega = 1.0MHz$. (b) O mesmo que em (a), só que agora, considerando a geometria Ga/Hg.

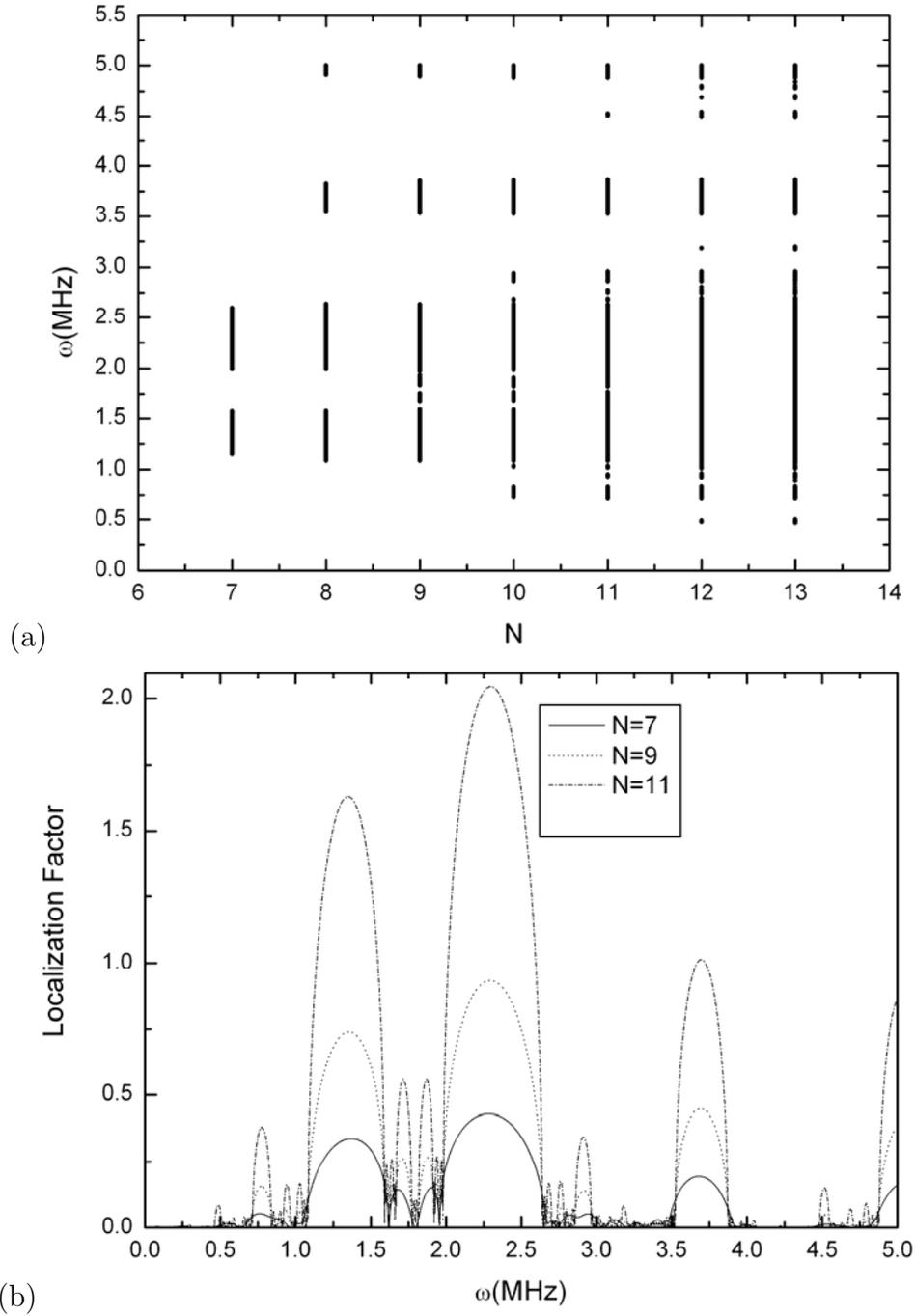


Figura 6.7: (a) Distribuição de “stop bands” de frequências para a transmissão do fônon acústico como uma função do número de geração quasiperiódica de Fibonacci N considerando a geometria Hg/Ga e incidência oblíqua ($\omega = 45^\circ$). (b) Fator de localização para várias gerações da seqüência de Fibonacci considerando a geometria Hg/Ga e incidência oblíqua ($\omega = 45^\circ$). A linha cheia representa a sétima geração, enquanto que a linha pontilhada representa a nona geração e a pontilhada e tracejada representa a décima primeira geração do número de Fibonacci.

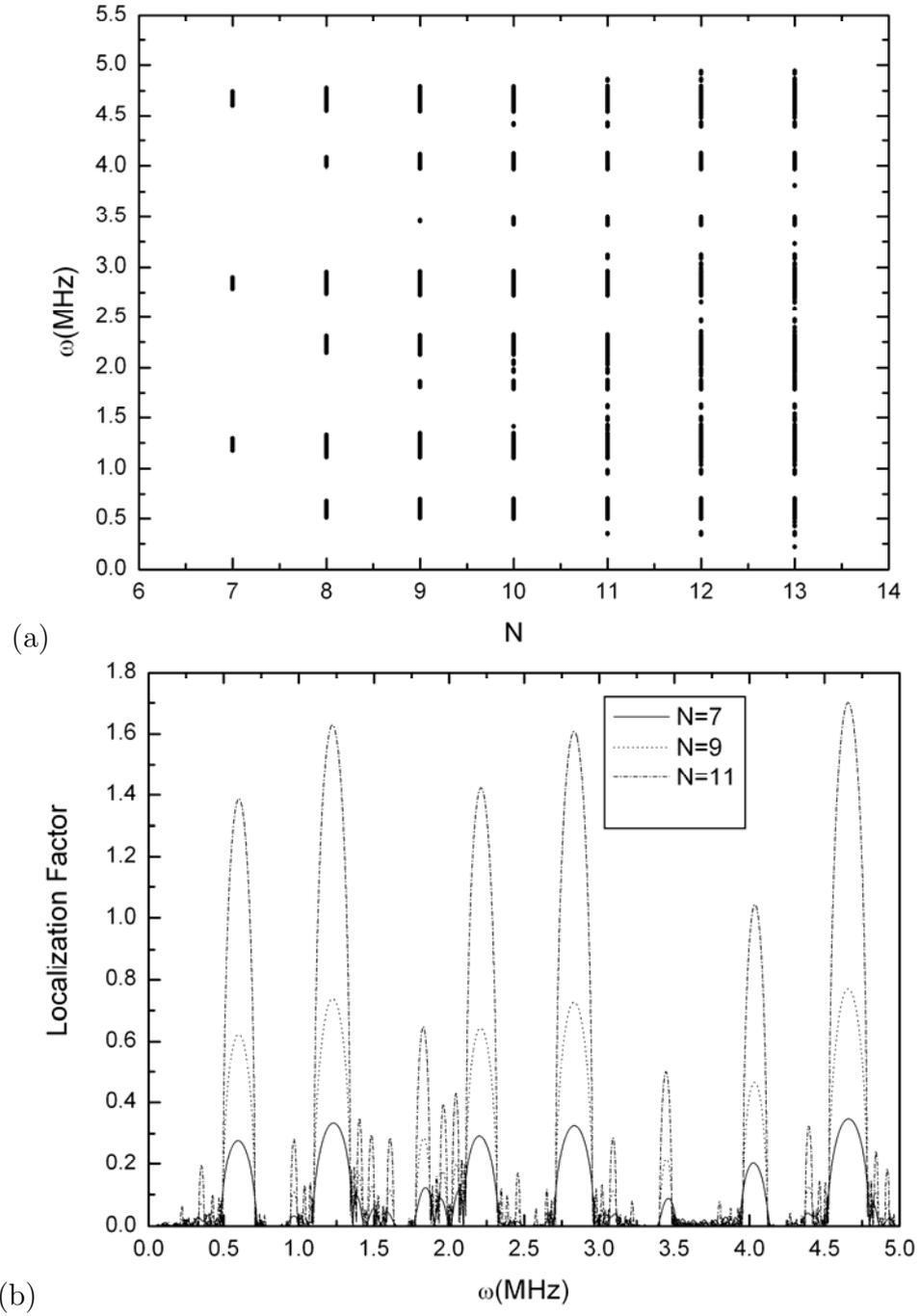


Figura 6.8: (a) O mesmo que em (6.7a), só que agora, considerando a geometria Ga/Hg e o ângulo de incidência $\theta = 15^\circ$. (b) O mesmo que em (6.7b), só que agora, considerando a geometria Ga/Hg e o ângulo de incidência $\theta = 15^\circ$.

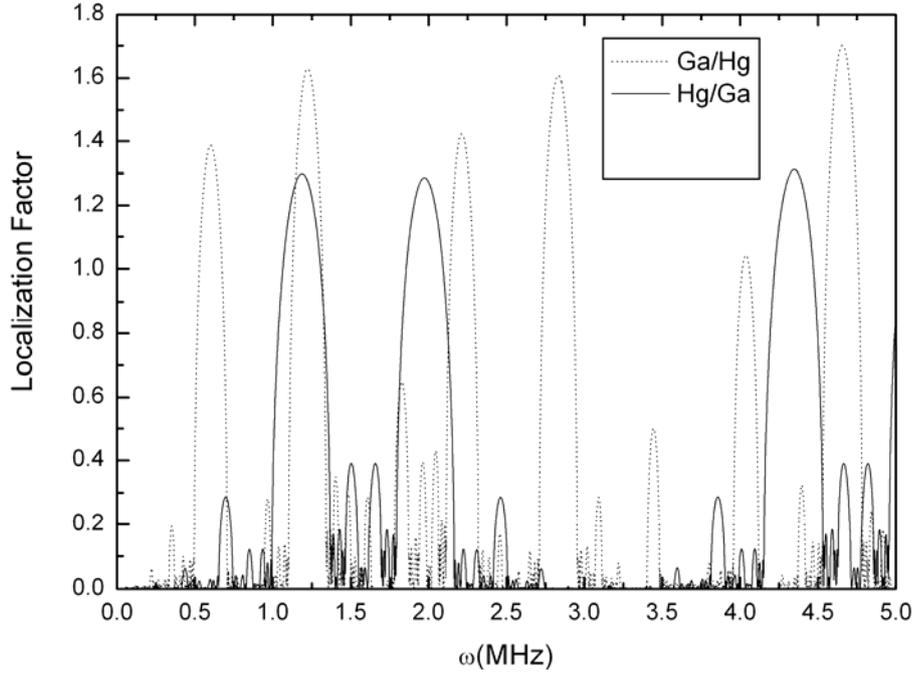


Figura 6.9: Fator de localização para várias gerações da seqüência de Fibonacci, considerando as duas geometrias Hg/Ga (linha cheia) e Ga/Hg (linha pontilhada) e a incidência oblíqua ($\theta=15$). .

6.5 Conclusões.

Em resumo, descrevemos o espectro de transmissão para os fônons acústicos propagando-se em uma estrutura fonônica quasiperiódica de Fibonacci composta por dois líquidos metálicos (Hg) e (Ga). A dinâmica dos fônons é descrita pelas equações diferenciais acopladas dentro do modelo de aproximação do campo estático. Mostramos que a super-rede quasiperiódica funciona com um filtro para fônons nas regiões de “stop bands”, como foi indicado nas figuras 6.2, 6.3 e 6.4. Aumentando o número de geração de Fibonacci (em princípio a partir da sétima geração), mais fônons em uma camada (digamos a camada A) param nas bandas, criando novos stop bands como pode ser visto na figura 6.4.

O espectro de transmissão, sugere fortemente a possibilidade de se construir melhores dispositivos atuando na região de MHz. Podemos ajustar a frequência do fônons e a largura dos seus “stop bands” alterando os materiais constituintes, isto é, mudando o

“mismatch” (desacordo) entre as camadas constituintes (por exemplo, substituindo líquido metálico por outro material líquido). Além disso, a nitidez do espectro de transmissão para a estrutura de multicamadas de Fibonacci, poderia ser utilizada para gerar ou detectar fônons de alta frequência termicamente excitados. Experimentalmente, fônons ou o ultra-som são geralmente lançados na forma de um pulso ou pacote de ondas planas monocromáticas estudadas teoricamente.

Assim para uma verificação experimental dos espectros de transmissão previstos e mostrados aqui, é importante analisar o comportamento de pulsos ou pacotes de fônons que são fônons em intervalos finitos de frequências (incluindo uma frequência ressonante) e não a de uma única frequência do fônon.

Outra possibilidade para verificar nossos resultados é usar um método de pulso de luz de picosegundos ou a técnica de imagens de ultra-som. Para os nossos resultados, concluímos que a estrutura quasiperiódica formada pelas matérias Ga/Hg deram resultados mais satisfatórios do ponto de vista da aplicabilidade na construção de filtros. por duas razões:

- 1) A estrutura Ga/Hg apresenta um número maior de “stop bands” nas mesma região de frequências em relação a geometria Hg/Ga.
- 2) A estrutura Ga/Hg é mais sensível a uma variação do ângulo de incidência da onda elástica.

Esperamos que nossos resultados possam abrir uma perspectiva adicional para os dispositivos fonônicos explorando as propriedades dos band gaps fonônicos.

CAPÍTULO 7

Conclusões e Perspectivas

Neste capítulo, fazemos um resumo geral dos trabalhos científicos originais desta tese de doutorado, bem como a discussão dos principais resultados encontrados para cada modelo e as perspectivas futuras.

No Capítulo 3 [21], apresentamos uma teoria geral para a propagação dos fônons acústicos confinados em super-redes fonônicas periódicas e quasiperiódicas obedecendo à seqüência de Fibonacci levando em conta a influência piezoelétrica (*strain*) dos nitretos AlN e GaN envolvidos. Utilizamos o material isolante SiO₂ como um dos constituintes da super-rede. Além disso, consideramos as duas estruturas cristalinas dos nitretos a saber: cúbicas tipo *zinc-blende* e hexagonal tipo *würtzite*. O nosso resultado teórico fornece a relação de dispersão para os modos de volume e de superfície, encontrados nos sistemas cúbico e hexagonal respectivamente. Com efeito, uma vez que a matriz transferência T foi obtida nos dois casos para a seqüência de Fibonacci, todo o espectro de geração foi obtido sem problemas. Mostramos os espectros dos fônons acústicos confinados em estruturas cristalinas cúbicas e hexagonais, considerando o efeito piezoelétrico no sistema e comparando tais espectros com aqueles obtidos para o mesmo sistema sem a influência piezoelétrica. Fizemos ainda uma análise das leis de escala das bandas de volume do espectro de fônons acústicos nas super-redes periódicas e quasiperiódicas. Mostramos que a medida que o número da geração de cada seqüência aumenta, as bandas de volume se tornam mais e mais limitadas, indicando uma forte localização, e no limite $N \gg 1$ estas bandas formam um conjunto de Cantor. Além disso, a largura total de bandas

permitidas, para um valor fixo de $q_x a$, obedece a uma lei de escala cujo expoente não possui dependência com o vetor de onda adimensional na direção x $q_x a$. O comportamento deste expoente pode prontamente indentificar a sequência quasiperiódica em questão, como também pode ser interpretado como uma medida da localização da excitação. Os principais resultados teóricos encontrados no capítulo 3, foram:

a) Para o espectro dos fônons acústicos confinados nas estruturas cúbicas, observou-se uma acentuada curvatura dos espectros em relação aqueles sem *strain*, o que nos leva a concluir que as excitações sobre a influência piezoelétrica são confinadas com energias maiores em comparação com as excitações sem influência do *strain*.

b) Para o espectro dos fônons acústicos confinados nas estruturas hexagonais, observou-se além de uma acentuada curvatura dos espectros, um afastamento das bandas para maiores valores de frequências. Portanto as excitações neste tipo de estrutura são confinadas com valores ainda maiores de energia.

c) Podemos ainda observar, que o gráfico log-log obtido da soma das espessuras das bandas permitidas nos espectros de energia em função do número de Fibonacci tem uma característica linear. Sendo assim, podemos inferir que a influência piezoelétrica não “quebra” a fractalidade dos sistemas.

d) Desconsiderando a influência do strain, podemos observar que os espectros de bandas tanto para simetria cúbica como para hexagonal são os mesmos. Isto se deve porque em nossos cálculos consideramos apenas a função dielétrica transversal $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ ou seja, estamos apenas considerando as propriedades no plano xy .

e) Considerando os gráficos log-log tanto para as estruturas cúbicas como para hexagonais, nota-se que os coeficientes de localização nas leis de escala possuem variação apenas na segunda casa decimal indicando a independência deste coeficiente com o vetor de onda $q_x a$ [65].

No capítulo 4 [22], investigamos a propagação dos fônons acústicos na super-rede quasiperiódica fonônica de Fibonacci composta pelos nitretos GaN e AlN. Consideramos suas propriedades piezoelétricas expressas pelo tensor piezoelétrico de terceira ordem e_{x4} (simetria cúbica) e e_{x5} (simetria hexagonal), que surgem na construção das equações diferenciais acopladas para cada tipo de simetria. A solução de interesse para o nosso modelo, é aquela que caracteriza as propriedades elásticas e eletromagnéticas, solução esta, atribuída ao par (u_y, ϕ) . Usando tais soluções, foi possível construir a matriz transferência para a geometria AlN/GaN, usando-se as condições de contorno elásticas e eletromagnéticas nas interfaces da estrutura. Fazendo-se considerações sobre as amplitudes dos campos de entrada e saída na super-rede, podemos escrever a matriz transmitância, que para este modelo, tem dimensão 4x4. Os resultados teóricos fornecem basicamente os espectros de transmissão da onda acústica para ambos os tipos de simetria (cúbica e hexagonal), considerando-se incidências normal e oblíqua do vetor de onda na estrutura de multicamadas periódicas e quasiperiódicas. Os principais resultados obtidos no capítulo 4, foram:

a) Em todos os resultados mostrados, observamos regiões de frequências proibidas para a propagação dos fônons acústicos ("stop bands") na estrutura quasiperiódica.

b) O modelo é 3D, ou seja, consideramos nos cálculos analíticos a função dielétrica transversal ε_{zz} diferente da componente ε_{yy} .

c) O espectros para incidência normal ($\theta = 0$), apresentam curiosas regiões de frequências que repetem-se em escala (a cada geração ímpar), para os dois tipos de simetria (cúbica e hexagonal), caracterizando uma importante auto-similaridade do espectro.

d) O importante fenômeno analisado em (c) simplesmente desaparece, quando consideramos a incidência oblíqua (isto se deve a reflexão de Bragg).

e) A simetria cúbica apresenta um maior número de "stop bands" para qualquer ângulo de incidência em relação a simetria hexagonal.

No capítulo 5 [23], desenvolvemos o modelo teórico para as vibrações elásticas

no interior das estruturas periódicas e quasiperiódicas fonônicas de Fibonacci do tipo sólido/líquido, na qual representamos a camada sólida (com simetria cúbica) pelo cristal de quartzo e a camada líquida pelo argônio (Ar). O cálculo das vibrações na estrutura sólida foi realizado considerando a equação dinâmica para meios elásticos, que possuem certa simetria. Já as vibrações elásticas na camada líquida foram descritas pela teoria clássica da elasticidade, resolvendo a equação de Euler da fluido dinâmica. Não consideramos nos cálculos analíticos a influência piezoelétrica do quartzo (simplificando o nosso modelo). Sendo assim, as condições de contorno nas interfaces da estrutura são de caráter puramente elásticas, envolvendo as soluções u_x e u_z (a componente $u_y=0$ devido a ausência de cisalhamento do líquido) em ambas as camadas da super-rede. Novamente a matriz transferência é obtida das condições de contorno e conseqüentemente a matriz transmisividade (matriz de ordem 4). Os nossos resultados teóricos obtidos com este modelo são basicamente os espectros de transmissão do fônon acústico (para a incidência normal e oblíqua), distribuição de “stop bands” para várias gerações do número de Fibonacci, e estudo dos expoentes de Lyapunov através do fator de localização. Os principais resultados obtidos no capítulo 5, foram:

- a) Em todos os resultados mostrados, observamos regiões de frequências proibidas para a propagação dos fônons acústicos (“stop bands”) na estrutura quasiperiódica.
- b) Os espectros quasiperiódicos apresentam regiões de “passbands”.
- c) Os “stop bands” surgem drasticamente para pequenos valores do ângulo de incidência.
- d) O número de “stop bands” parece aumentar de acordo com o número de Fibonacci (a partir da sétima geração).

No capítulo 6 [24], resolvemos a equação de Euler da fluido-dinâmica no volume da célula unitária líquida composta dos líquidos metálicos Hg e Ga (na temperatura ambiente) que compõem a nossa super-rede periódica e quasiperiódica de Fibonacci. Como foi dito acima, desenvolvemos os cálculos analíticos com o objetivo de obter a matriz transferência (neste caso 2x2) calculada com o auxílio das condições de fronteiras elásticas nas interfaces da estrutura líquido/líquido. Esta matriz relaciona as amplitudes dos campos

elásticos presentes no meio líquido (Hg) com aqueles presentes no meio líquido (Ga), e portanto todas as informações elásticas que se propagam através da super-rede é descrita ela. Os resultados obtidos neste caso são constituídos dos espectros de transmissão para os dois tipos de geometria Hg/Ga e Ga/Hg, bem como, a distribuição de “stop bands” para diversas gerações do número de Fibonacci. Os expoentes de Lyapunov representados pelo fator de localização foram obtidos e discutidos. Os principais resultados do capítulo 6, são:

a) A presença dos “stop bands” é confirmada em todos os espectros para as geometrias Hg/Ga e Ga/Hg.

b) Neste modelo, os “stop bands” surgem para baixas gerações (a partir da quinta) de Fibonacci.

c) A geometria Ga/Hg é mais sensível a uma mudança no ângulo de incidência do que Hg/Ga.

d) A geometria Ga/Hg apresentou um maior número de “stop bands” bem com, de “passbands” em relação a estrutura Hg/Ga.

e) O crescimento quasiperiódico da geometria Ga/Hg é mais desordenado que da Hg/Ga.

Finalmente, algumas perspectivas para futuros trabalhos são:

a) Considerar outros tipos de seqüências quasiperiódicas.

b) Considerar outros tipos de materiais e isolantes acústicos como polímeros (através de outros modelos matemáticos) e etc.

c) Estudar os efeitos de camadas piezoelétricas em estruturas do tipo sólido/líquido.

d) Considerar os aspectos térmicos das vibrações elásticas nas super-redes do tipo líquido/líquido e sólido/líquido.

Apêndice A

Artigos Publicados Nesta Tese

Acoustic phonon dynamics in strained cubic and hexagonal GaN/Al₂O₃ superlattices

P.D. Sesion Jr.¹, E.L. Albuquerque^{1,a}, M.S. Vasconcelos², P.W. Mauriz², and V.N. Freire³

¹ Departamento de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 59072-970, Natal-RN, Brazil

² Departamento de Ciências Exatas, Centro Federal de Educação Tecnológica do Maranhão, 65025-001, São Luís-MA, Brazil

³ Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, 60455-970, Fortaleza-CE, Brazil

Received 21 December 2005 / Received in final form 24 February 2006

Published online 28 June 2006 – © EDP Sciences, Società Italiana di Fisica, Springer-Verlag 2006

Abstract. We study the acoustic-phonon spectra in periodic and quasiperiodic (Fibonacci type) superlattices made up from III–V nitride materials (GaN) intercalated by sapphire (Al₂O₃). Due to the misalignments between the sapphire and the GaN layers that can lead to threading dislocation densities as high as 10^8 – 10^{10} cm⁻², and a significant lattice mismatch (~14%), the phonon dynamics is described beyond the continuum elastic model using coupled elastic and electromagnetic equations, stressing the importance of the piezoelectric polarization field in a strained condition. We use a transfer-matrix treatment to simplify the algebra, which would be otherwise quite complicated, allowing neat analytical expressions for the phonon dispersion relation. Furthermore, a quantitative analysis of the localization and magnitude of the allowed band widths in the phonon's spectra, as well as their scale law and the parametric spectrum of singularities $f(\alpha)$, are presented and discussed.

PACS. 63.20.Pw Localized modes – 63.22.+m Phonons or vibrational states in low-dimensional structures and nanoscale materials – 68.65.Cd Superlattices – 71.55.Eq III-V semiconductors

1 Introduction

The III–V nitride materials, such as GaN, display important piezoelectric polarization fields in a strained condition and can crystallize in both hexagonal wurtzite or cubic zinc-blend structures [1]. The wurtzite crystals have a different unit cell structure (four atoms per unit cell with nine optical and three acoustic phonons for a given wavevector), as well as a lower symmetry when compared to the cubic zinc-blende counterpart, leading to a different carrier-phonon interaction. Although significant advances in growth, doping, and device applications of group III–V nitride materials have been achieved with their stable wurtzite hexagonal phase, less progress has been made with their metastable zinc-blend cubic structure. However, devices with a zinc-blend structure would have considerable advantages. This is particularly true for GaN due to its higher saturated electron drift velocity, easy cleavage, and lower band energy [2, 3]. Also cubic nitrides are expected to have higher mobility, due to the decrease of the phonon number for the higher symmetry structure. Therefore, information on the vibrational

properties of both structures (hexagonal and cubic) are strongly desirable.

The hexagonal wurtzite structures are uniaxial crystals with the optical axis coinciding with the Cartesian z -axis, which is perpendicular to the hexagons (forming the xy -plane). On the contrary to their hexagonal counterparts, the cubic structures can be grown free from modulation due to spontaneous polarization and strain-induced piezoelectric fields. The spatial separation of the carriers wave function, induced by the quantum-confined Stark effect in the hexagonal phase, is avoided in the cubic structure [4].

On the other hand, the discovery of quasiperiodic structures has fired up a new field of condensed-matter physics and given rise to many practical applications (for an up to date review of this field see Refs. [5, 6]). For example, the multiwavelength second-harmonic generation [7] and the direct third-harmonic generation [8] have been realized in a Fibonacci superlattice. In the field of photonic crystals, the complete photonic band gap in 12-fold symmetric quasicrystals has been recently reported [9].

It is our aim in this work to investigate the acoustic-phonon spectra in multilayer structures composed of

^a e-mail: eudenilson@dfte.ufrn.br

Acoustic phonon transmission spectra in piezoelectric AlN/GaN Fibonacci phononic crystals

P.D. Sesion Jr¹, E.L. Albuquerque^{1,a}, C. Chesman¹, and V.N. Freire²

¹ Departamento de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 59072-970 Natal-RN, Brazil

² Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici 60455-760 Fortaleza-CE, Brazil

Received 2 May 2007 / Received in final form 14 August 2007

Published online 22 September 2007 – © EDP Sciences, Società Italiana di Fisica, Springer-Verlag 2007

Abstract. We study the acoustic-phonon transmission spectra in periodic and quasiperiodic (Fibonacci type) superlattices made up from the III-V nitride materials AlN and GaN. The phonon dynamics is described by a coupled elastic and electromagnetic equations within the static field approximation model, stressing the importance of the piezoelectric polarization field in a strained condition. We use a transfer-matrix treatment to simplify the algebra, which would be otherwise quite complicated, allowing a neat analytical expressions for the phonon transmission coefficients. Numerical results, for the normal incidence case, show a strike self-similar pattern for both hexagonal (class 6 mm) and cubic symmetries crystalizations of the nitrides.

PACS. 63.20.Dj Phonon states and bands, normal modes, and phonon dispersion – 63.22.+m Phonons or vibrational states in low-dimensional structures and nanoscale materials – 77.65.-j Piezoelectricity and electromechanical effects

1 Introduction

The study of phononic crystals, which are periodic composite materials with lattice spacings comparable to the acoustic wavelength, has received increasing attention during the last decade driven by acoustoelectronic devices in modern communication systems (for an up to date review see [1]). They ultimately offer control of the propagation of acoustic or elastic waves on a wavelength scale, being the acoustic analogues of photonic crystals for the case of optical and electromagnetic waves. They consist of two- or three-dimensional periodic arrangements of two materials with differing elastic constants that can give rise to absolute acoustic stop bands under well-chosen geometrical conditions.

These composite materials can exhibit several interesting acoustic phonons physical properties, such as their possible role in sound filters, transducer design and acoustic mirrors, to cite just a few [2]. Besides, layered composites may support novel types of waves, with specific frequency dependence not found in homogeneous substrates, an old subject of solid state physics [3].

It is clear, on general grounds, that in a specimen consisting of alternate layers of thickness d_a of material A and thickness d_b of material B , the periodicity produces a Brillouin zone boundary at reciprocal wavevector

$Q = \pi/(d_a + d_b)$. One effect of this zone boundary is that the acoustic phonon dispersion curve becomes folded to a zig-zag within the first Brillouin zone, yielding frequency gaps (i.e. stop bands) in the phonon dispersion relation, thus allowing a phonon-filtering action in the stop bands. As typical values of the layers thicknesses are 20 nm, the Brillouin zone edge at $Q/2\pi = [2(d_a + d_b)]^{-1}$ occurs at around 10^5 cm^{-1} , meaning that a significant fraction of the Brillouin zone is accessible to inelastic light scattering techniques. Indeed, it was recently proposed hypersonic phononic crystals to control the emission and propagation of high frequency phonons by using interference lithography, whose direct measurement of their phononic band structure is possible via Brillouin light scattering [4].

Phononic devices based on piezoelectric materials are attractive since they are extensively used as radio-frequency filters in wireless telecommunication systems: the integration of a phononic band gap structure to such devices would enhance their characteristics and widen their application range. From a fundamental point of view, piezoelectric phononic crystals enable experiments in which the sources and detectors of acoustic waves can be embedded with the phononic crystal itself [5]. The strong anisotropy of acoustic wave propagation inherent to piezoelectric materials, combined with the mixing of shear and longitudinal polarizations, strongly affect wave scattering, opening up further prospects for designing a generation of phononic-crystal-based acoustic signal processing devices.

^a e-mail: eudenilson@dfte.ufrn.br

Band gaps of acoustic waves propagating in a solid/liquid phononic structure

P.D. Session Jr., E.L. Albuquerque
*Departamento de Física,
Universidade Federal do Rio Grande do Norte
59072-970 Natal-RN, Brazil*

V.N. Freire
*Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará
60455-760 Fortaleza-CE, Brazil
(Dated: December 8, 2008)*

We study the acoustic-phonon transmission spectra in quasiperiodic (Fibonacci type) superlattices made up from the solid crystal quartz and the liquid Ar. The phonon dynamics is described by a coupled elastic equations within the static field approximation model. We use a transfer-matrix treatment to simplify the algebra, which would be otherwise quite complicated, allowing a neat analytical expressions for the phonon transmission coefficients. Numerical results, for the normal and oblique incidence cases, are presented and discussed for both the transmittance spectra as well as the localization factor derived from the Lyapunov exponent, showing that the quasiperiodic superlattice acts as a filter for the phonon's transmission spectra.

PACS numbers: 43.20.+g; 43.40.+s; 63.20.Dj; 63.22.+m; 77.65.-j

I. INTRODUCTION

As a result of recent advances in fabrication techniques, multilayered systems of impressive quality are now synthesized from thin films composed of a wide variety of crystals. They form an intriguing new class of materials, in that their macroscopic properties are subject to design or control by varying the thickness or composition of the constituent films. In fact, some of these properties may be unique to the multilayer structure, providing a new way to reveal novel features of such structure (for a review see Ref. [1]).

In addition to the electronic and optical properties of these multilayered systems, there is recently a growth interest to study also their vibrational properties, with various stacking order such as the periodic, quasiperiodic and random one, been investigated both theoretically and experimentally [2–5]. For instance, implementation of acoustoelectronic devices in modern communication systems requires tight confinement of light and sound wave, which strongly alter their Brillouin scattering characteristics [6]. Besides, Bragg reflection occurs when the periodicity matches their wavelength, yielding frequency gaps (i.e. stop bands) in the phonon dispersion relation. Thus, they exhibit a filtering action on phonons in the stop bands leading the allowed frequencies to fall into continuous bands separated by forbidden gaps.

Although band structure is practically the signature of solid state physics, as it is well known using a quantum approach for the energy spectrum of electrons in periodic potentials [7], the same phenomenon occurs, in principle, for mechanical, acoustical, electromagnetic, and even oceanographic waves. For instance, the existence of forbidden frequency regions for light propagation and optical emission resulting from the Bragg scattering of electromagnetic waves in solid crystals, the so-called photonic band gaps, have permitted quite a number of analogies with the electronic properties of semiconductor physics. The microstructuring techniques of high quality optical materials available nowadays yield to a remarkable flexibility in the fabrication of these so-called photonic crystals, resulting in the tailoring of the electromagnetic dispersion relation and mode structure to suit almost any need, opening new perspectives for both fundamental and practical interest [8–10].

The analogy between photons and phonons suggests the consideration of periodic elastic composites of two or more vibrating materials, called phononic crystals or phononic lattices. By appropriate modulation of the elastic properties in the constituent materials, forbidden frequency gaps (acoustic stop bands) extending throughout the Brillouin zone can also be realized. A possible application of such phononic crystals is designing phonon filters or heat insulators, which selectively reflect phonons in desirable frequency ranges, as well as a variety of phonon optics and acoustic devices by using single- or multiple-superlattice structures [11–13].

To probe the acoustic band structure of these composites, ultrasound transmission experiments in both the bulk and on the surface of the structures have been performed [14–17]. The dimension of the phononic crystals used in the experiments is typically in the range of millimeters and a composite structure is made by drilling in a solid substrate a periodic array of cylinders. The simplest structure should be the one with vacuum or air-filled cylindrical holes. Intuitively, these holes should scatter acoustic waves strongly, and the transmission of ultrasound through the

Referências Bibliográficas

- [1] L Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14**, 61, (1970).
- [2] M. Tchounkeu, O.Brit, B.Gil, J.P. Alexis, R.L. Aulombard, J. Appl. Phys **80**, 5352, (1996).
- [3] N. Maeda and N. Kobayashi, in *III-V Nitride Semiconductors: Applications and Devices*. Ed. E.T. Yu and M. O Manasreh (Taylor and Francis, New York, Vol. **16**, 2003).
- [4] J.F. Nye, *Physical Properties of Crystals*, (Oxford Univ. Press 1957).
- [5] IEEE standard on piezoelectricity, Tech. Rep. ANSI/IEEE Std 176-1987, Standards Committee of the IEEE Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control Society, New York, NY, USA, Jan. 1988.
- [6] M. A Stroschio and M. Dutra, in *Phonons in Nanostructures*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).
- [7] N. W. Ascroft and N. D. Mermin, in *Solid State Physics*, (Cornell University. 1976).
- [8] C. Kittel, in *Introduction to Solid State Physics*, 7th ed., (Wiley, New York, 1996).
- [9] Kittel, *Quantum Theory of Solids*, 2nd. ed., (Wiley, New York, 1987).
- [10] A.P. Cracknell, *Ultrasonics*, (Wykeham Publications LTD London 1999).
- [11] J. H. Page, A. L. Goertzen, S. Yang, Z. Liu, C. T. Chan, and P. Sheng, in *Photonic Crystals and Light Localization in the 21st Century*, edited by C. M. Soukoulis (Kluwer Academic Publishers, Amsterdam, 2001), p. 59.

- [12] Tanaka Y, Tomoyasu Y and Tamura S 2000 Phys. Rev. B **62** 7387.
- [13] I. E. Psarobas, N. Stefanou, and A. Modinos, Phys. Rev. B **62**, 2446 (2000).
- [14] Z. Liu, X. Zhang, Y. Mao, Y. Y. Zhu, Z. Yang, C. T. Chan, and P. Sheng, Science **289**, 1734 (2000).
- [15] Zhilin Hou, Fugen Wub and Youyan Liua, Phononic crystals containing piezoelectric material , Solid State Communications, Vol130, 2004, P 745-749.
- [16] Kafesaki M, Penciu R S and Economou E N 2000 Phys. Rev. Lett. **84** 6050.
- [17] Kushwaha M S and Halevi P 1997 J. Acoust. Soc. Am. **101** 619 Kushwaha M S and Djafari-Rouhani B 1996 J. Appl. Phys. **80** 3191.
- [18] Kafesaki M, Sigalas M M and Economou E N 1995 Solid State Commun. **96** 285 Economou E N and Sigalas M 1994 J. Acoust. Soc. Am. **95** 1734.
- [19] Kushwaha M S and Halevi P 1996 Appl. Phys. Lett. **69** 31 Kushwaha M S and Halevi P 1994 Appl. Phys. Lett. **64** 1085 Kushwaha M S and Halevi P 1997 Appl. Phys. Lett. **70** 3218.
- [20] E. L. Albuquerque and M. G. Cottam, Solid State Commun, **83**, 545 (1992).
- [21] P.D. Sesion Jr, E.L. Albuquerque, M.S. Vasconcelos, P.W. Mauriz, V.N. Freire, Eur. Phys. J. B **51**, 583 (2006).
- [22] P.D. Sesion Jr, E.L. Albuquerque, C. Chesman and V.N. Freire, Eur. Phys. J. B **58**, 379 (2007).
- [23] P.D. Session Jr., E.L. Albuquerque, V.N. Freire, J. Phys. Condens. Matter. (2008).
- [24] A publicar. (2009).
- [25] E. L. Albuquerque and M. G. Cottam, *Polaritons in Periodic and Quasiperiodic Structures*, (Elsevier, Amsterdam, 2004).
- [26] Boyd, R.W., Nonlinear Optics. 1992, San Diego, CA: Academic Press.

- [27] Birks, T.A., P.S.J. Russell, and D.O. Culverhouse, The acousto-optic effect in single-mode fiber tapers and couplers. *Journal of Lightwave Technology*, 1996. **14**(11): p. 2519-2529.
- [28] Culverhouse, D.O., et al., 40-MHz all-fiber acoustooptic frequency shifter. *Ieee Photonics Technology Letters*, 1996. **8**(12): p. 1636-1637).
- [29] Depaula, R.P., et al., Single-Mode Fiber Ultrasonic Sensor. *Ieee Journal of Quantum Electronics*, 1982. **18**(4): p. 680-683.
- [30] R.E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, (Oxford University Press, Oxford, 1964).
- [31] J. Callaway, *Energy Band Theory*, (Academic Press, New York, 1964).
- [32] H. Jones, *The Theory of Brillouin Zones and Electronic States in Crystals*, (North-Holland, Amsterdam, 1962).
- [33] P.A. Tipler, R.A. Llewellyn, *Modern Physics*, Third Edition, (Worth Publishers, New York, 1999).
- [34] F. Stern, *Phys. Rev. Lett.* **18**, 546 (1967).
- [35] A.L. Fetter, *Ann. Phys. (NY)* **88**, 1 (1974).
- [36] J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3rd. ed., (Wiley, New York, 1999).
- [37] M. Born and K. Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, (Oxford Univ. Press, Oxford, 1954).
- [38] A.A. Maradudin, E.W. Montroll, G.H. Weiss and I.P. Ipotova, *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation*, (Academic Press, New York, 1971).
- [39] R.J. Elliott and A.F. Gibson, *An Introduction to Solid State Physics and its Applications*, (Macmillan, London, 1974).
- [40] R.H. Lyddane, R.G. Sachs and E. Teller, *Phys. Rev.* **59**, 673 (1941).
- [41] D.M. Hoffman, G.L. Doll, P.C. Eklund, *Phys. Rev. B.* **30**, 6051 (1984).
- [42] J. Menéndez, *J. of Luminescence* **44**, 285 (1989).

- [43] P. Yeh, A. Yariv, e C. Hong, *J. Opt. Soc. Am.* **67**, 423 (1977).
- [44] C. Colvard, R. Merlin, M.V. Klein and A.C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 289 (1980).
- [45] R.E. Camley, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski and A.A. Maradudin, *Phys. Rev. B* **27**, 7318 (1983).
- [46] B. Djafari-Rouhani, A.A. Maradudin and R.F. Wallis, *Phys. Rev. B* **29**, 6454 (1984).
- [47] S.K. Yip and Y.C. Chang, *Phys. Rev. B* **30**, 7037 (1984).
- [48] G.W. Farnell and E.L. Adler, in: *Physical Acoustics*, Vol. IX, Ed., (W.P. Mason, Academic Press, New York, 1972).
- [49] B.A. Auld, *Acoustic Fields and Waves in Solids*, Vols. 1 and 2, 2nd ed., (Krieger, Malabar Florida, 1990).
- [50] E.L. Albuquerque, *Phys. Status Solidi (b)* **104**, 667 (1981).
- [51] R. Holland and E.P. Eernisse, *Design of Resonant Piezoelectric Devices*, (M.I.T Press Cambridge, London, 1969).
- [52] M.S. Vasconcelos and E.L. Albuquerque, *Phys. Rev. B* **57**, 2826 (1998).
- [53] U. Grimm and M. Baake, *Aperiodic Ising Models*, in: *The Mathematics of Long-Range Aperiodic Order*, Ed., (R.V. Moody, Kluwer, Dordrecht, 1997).
- [54] E.L. Albuquerque and M.G. Cottam, *Solid State Commun.* **81**, 383 (1992).
- [55] T. Azuhata, T. Sota, K. Suzuki and S. Nakamura, *J.Phys. Condens. Matter* **7**, L129 (1995).
- [56] P. Perlin, A. Polian and T. Suski, *Phys. Rev. B* **47**, 2874 (1993).
- [57] F. Bechstedt, U. Grossner and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **62**, 8003 (2000).
- [58] F. Bernardini, V. Fiorentini and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **56**, 10024 (1977).
- [59] D.R. Hoftadter, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976).

- [60] M. Kohmoto, L.P Kadanoff and C. Tang, Phys. Rev. Lett. **50**, 1870 (1983).
- [61] M. Kohmoto, Phys. Rev. Lett. **51**, 1198 (1983).
- [62] S. Ostlund, R. Pandit, H.J. Schellnhuber, D. Rand and E.D. Siggia. Phys. Rev. Lett. **50**, 1873 (1983).
- [63] P. Hawrylak and J.J. Quinn, Phys. Rev. Lett. **57**, 380 (1986).
- [64] F. Dominguez-Adame, A. Sánchez, E. Diez, Phys. Rev. B **50**, 17736 (1994).
- [65] D.H.A.L. Anselmo, A.L. Dantas, S.K. Medeiros, E.L. Albuquerque, V.N. Freire, Physica. A **349**, 259 (2005).
- [66] M. Sigalas, M.S. Kushwaha, E.N. Economou, M. Kafesaki, I.E. Psarobas, W. Steurer, Z. Krist.**220**, 765 (2005).
- [67] A. Kheilif, A. Choujaa, B. Djafari-Rouhani, M. Wilm, S. Ballandras, V. Laude, Phys. Rev. B **68**,0214301 (2003); A. Kheilif, A. Choujaa, S. Benchabane, B. Djafari-Rouhani, V. Laude, Appl. Phys. Lett, **84**, 4400 (2004); Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, J.O. Vasseur, A. Khelif, P.A. Deymier, Phys. Rev. E **69**, 046608 (2004).
- [68] E.L. Albuquerque, R. Loudon, D.R. Tilley, J. Phys. C: Solid State Phys. **12**, 5297 (1979); E.L. Albuquerque, R. Loudon, D.R. Tilley, J. Phys. C: Solid State Phys. **13**, 1775 (1980); E.L. Albuquerque, J. Phys. C: Solid State Phys. **13**, 2623 (1980).
- [69] T. Gorishnyy, C.K. Ullal, M. Maldovan, G. Fytas, E.L. Thomas, Phys. Rev. Lett. **94**, 115501 (2005).
- [70] S. Benchabane, A. Khelif, J.-Y. Rauch, L. Robert, V. Laude, Phys. Rev. E **73**, 065601(R) (2006).
- [71] Z. Liu, W. Zhang, Phys. Rev. B **72**, 134304 (2005); Z. Liu, W. Zhang, Phys. Rev. B **75**, 064207 (2007).
- [72] A. Bykhovski, B. Gelmont, M. Shur, A. Khan, J. Appl. Phys. **77**, 1616 (1995).
- [73] B. Gil, Group III Nitride Semiconductor Compounds (Clarendon, Oxford, 1998).

- [74] F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **56**, R10024 (1997).
- [75] G. Ramirez-Flores, H. Navarro-Contreras, A.L Astras- Martinez, Phys. Rev. B **50**, 8433 (1994).
- [76] K.H. Ploog, O. Brandt, H. Yang, T. Trampert, Thin Solid Films **306**, 231 (1997).
- [77] J. Gleize, J. Frandon, M.A. Renucci, F. Bechstedt, Phys. Rev. B **63**, 073308 (2001).
- [78] Z.L Hou, F.G. Wu, Y. Liu, Solid State Commun. **130**, 745 (2004).
- [79] T.T. Wu, Z.C Hsu, Z.G. Huang, Phys. Rev. B **71**, 064303 (2005).
- [80] G. Monsivais, J.A. Otero, H. Cal´as, Phys. Rev. B **71**, 064101 (2005).
- [81] Seiji Mizuno, Phys. Rev. B **68**, 193305 (2003).
- [82] S. Tamura, Phys. Rev. B **43**, 12646 (1991).
- [83] M. Yamaguchi, T. Yagi, T. Sota, T. Deguchi, K. Shimada, S. Nakamura, J. Appl. Phys. **85**, 8502 (1999).
- [84] M. Yamaguchi, T. Yagi, T. Azuhata, T. Sota, K. Suzuki, S. Chichibu, S. Nakamura, J. Phys. Condens. Matter **9**, 241 (1997).
- [85] P. Dhez and C. Weisbuch, eds., Physics, *Fabrication and Applications of Multilayered Structures* (Plenum, New York, 1988).
- [86] B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, O. Hardouin Dupare, R. E. Camley, and A. A. Maradudin, Phys. Rev. B **28**, 1711 (1983).
- [87] A. Nougououi and B. Djafari-Rouhani, Surf. Sci. **185**, 125 (1987).
- [88] E. L. Shenderov, J. Acoust. Soc. Am. **101**, 1239 (1997).
- [89] V. I. Alshits, A. S. Gorkunova, and A. L. Shuvalov, J. Exp. Theor. Phys. **83**, 509 (1996).
- [90] P. Dainese, P.S.J. Russel, G.S. Wiederhecker, N. Joly, H.L. Fragnito, V. Laude and A. Khelif, Opt. Express **14**, 4141 (2006).

- [91] R. de Kroning and W.G. Penney, Proc. R. Soc. London, Ser A, **130**, 499 (1930).
- [92] S. Johnson and J.D. Joannopoulos, Photonic Crystals: The Road from Theory to Practice (Kluwer, Boston, 2002).
- [93] F.F. de Medeiros, E.L. Albuquerque and M.S. Vasconcelos, J. Phys.: Condens. Matter **18**, 8737 (2006).
- [94] M.S. Vasconcelos, P.W. Mauriz, F.F. de Medeiros and E.L. Albuquerque, Phys. Rev. B **18**, 8737 (2007).
- [95] M. Lax and V. Narayanamuri, Phys. Rev. B **24**, 4692 (1981).
- [96] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski and B. Djafari-Rouhani, Phys. Rev. Lett. **71**, 2022 (1993).
- [97] M. S. Kushwaha, P. Halevi, G. Martinez, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, Phys. Rev. B **49**, 2313 (1994).
- [98] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, G. Frantziskonis, G. Hong, B. Djafari-Rouhani, and L. Dobrzynski, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 6051 (1998).
- [99] M. Torres, F. R. Montero de Espinosa, D. Garca-Pablos, and N. Garca, Phys. Rev. Lett. **82**, 3054 (1999).
- [100] J. V. Sanchez-P´erez et al., Phys. Rev. Lett. **80**, 5325 (1998).
- [101] F. Meseguer et al., Phys. Rev. B **59**, 12169 (1999).
- [102] R. E. Vines, J. P. Wolfe, and A. G. Every, Phys. Rev. B **60**, 11871 (1999).
- [103] R. Loudon in: Surface Excitations, edited by V.M. Agranovich and R. Loudon, (Elsevier, Amsterdam, 1984).
- [104] L.D. Landau and E.M Lifshitz, Theory of Elasticity (Pergamon Press, Oxford, 1959).
- [105] L.D. Landau and E.M Lifshitz, Fluid Mechanics (Pergamon Press, Oxford, 1959).
- [106] R.Loudon, *Ripples on Liquid Interfaces* (Elsevier Science Publishers B.V,1984).

- [107] G. Monsivais, J. A. Otero and H. Cal´as, Phys. Rev. B **71**, 064101 (2005).
- [108] H. A. A. Sidek, G. A. Saunders, and Wang Hong, Phys. Rev. B **36**, 7612 (1987).
- [109] K. Nakamura, Quantum Chaos: A New Paradigm of Nonlinear Dynamics (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1993).
- [110] S. Roche, D. Bicout, E. Maci´a, and E. Kats, Phys. Rev. Lett. **92**, 109901 (2004).
- [111] Edin Berberovic, Nils P. van Hinsberg, Suad Jakirlic, Ilia V. Roisman, and Cameron Tropea, Phys Rev E **79**, (2009).
- [112] S. Eckert, G. Gerbeth, Experiments in Fluids **32** 542546 Springer-Verlag (2002).
- [113] M.D. Luque de Castro and F. Priego-Capotea, Elsevier B.V **72**, 321-334 ,(2007).
- [114] Sven Eckert, Andreas Cramer, and Gunter Gerbeth, Springer, **80** 275294. (2007).
- [115] Mihail Sigalas, Manvir S. Kushwaha, Eleftherios N. Economou, Maria Kafesaki, Ioannis E. Psarobas, and Walter Steurer. **220**, 765809, (2005).
- [116] Yi-Ze Wang, Feng-Ming Lia, Kikuo Kishimoto, Yue-Sheng Wang and Wen-Hu Huang
, Elsevier B.V , **45**, 4203-4210 ,(2008).
- [117] Yi-Ze Wang, Feng-Ming Lia, b, Kikuo Kishimoto, Yue-Sheng Wang and Wen-Hu Huang , Article in Press, Uncorrected Proof ,(2009).
- [118] S. Hosokawa, M. Inui, Y. Kajihara, K. Matsuda, T. Ichitsubo, W. Pilgrim, H. Sinn, L. E. Gonzalez, D. J. Gonzalez, S. Tsutsui, and A. Q. R. Baron, Phys. Rev. Lett. **102** 105502, (2009).
- [119] K. E. Spells, University College. **68** 299-311, London (1935).
- [120] J. Weber and R. Stefens, Absorption in Liquids, Mir, Moscow, P.75 (1970).
- [121] D. Brito, H. C. Nataf, P. C. J. Aubert, J. P. Masson, Springer-Verlag. **31**, 653-663 (2001).

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)