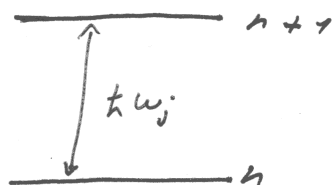


Transições interbandas

a) modelo clássico: oscilador de Lorentz

O modelo mais simples para entendermos as transições óticas interbandas é o modelo do oscilador de Lorentz.

Neste caso, assumimos que para um certo átomo j , o elétron que participa das transições óticas pode oscilar entre dois níveis:



Sob o ponto de vista clássico dizemos que ele tem uma força restauradora $m\omega_0^2$. Consideramos os átomos como estando independente uns dos outros. A Equação para o movimento do elétron de valência e^- , classicamente,

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + m \Gamma \frac{d\vec{r}}{dt} + m\omega_0^2 \vec{r} = -e \vec{E}_{loc} \quad (1)$$

onde \vec{E}_{loc} é o campo elétrico ^{local} agindo sobre o elétron e que representa a força de arrasto. O termo $m \Gamma \frac{d\vec{r}}{dt}$ representa o amortecimento devido a perdas de energia associadas a diferentes mecanismos de espalhamento. A força $-\frac{e\vec{v}}{c} \times \vec{H}$ foi desprezada.

A solução da Equação 1, para um campo com dependência temporal (2)

$$\vec{E}_{loc} = \vec{E}_{loc}^{(0)} e^{-i\omega t} \quad (2)$$

e

$$\vec{r} = \frac{-e \vec{E}_{loc} / m}{(\omega_j^2 - \omega^2) - i\Gamma\omega} \quad (3)$$

e o momento de dipolo induzido e

$$\vec{p} = \frac{e^2 \vec{E}_{loc}}{m} \frac{1}{(\omega_j^2 - \omega^2) - i\Gamma\omega} \quad (4)$$

Assumindo campos ^{suficientemente} fracos de forma a poder descrever a polarização como sendo linear, temos

$$\vec{p} = \chi(\omega) \vec{E}_{loc} \quad (5)$$

Se a densidade de elétrons por volume é n , podemos escrever

$$\vec{P} = n \langle \vec{p} \rangle = n \chi(\omega) \langle \vec{E}_{loc} \rangle = \chi_e \vec{E} \quad (6)$$

onde \vec{P} e \vec{E} são a polarização e o campo elétrico macroscópicos. Assumindo mais uma vez a aproximação linear,

$$\vec{D} = \epsilon_T \vec{E} = \vec{E} + 4\pi \vec{P} = \vec{E}_{ext} \quad (7)$$

Se considerarmos agora que cada átomo possui mais de um nível para o qual o elétron pode ser absorvido (oscilar), podemos escrever

$$\epsilon_T = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \sum_j \frac{n_j}{(\omega_j^2 - \omega^2) - i\Gamma_j \omega} \quad (8)$$

com a condição

$$\sum_j n_j = n \quad (9)$$

É útil introduzir a força de oscilador, f_j , para a transição j ésima, $(f_j = n_j/n)$

$$\epsilon_T = 1 + \frac{4\pi e^2}{m} \sum_j \frac{n f_j}{(\omega_j^2 - \omega^2) - i\Gamma_j \omega} = 1 + \frac{4\pi e^2 n}{m} \sum_j \frac{f_j}{(\omega_j^2 - \omega^2) - i\Gamma_j \omega} \quad (10a)$$

onde

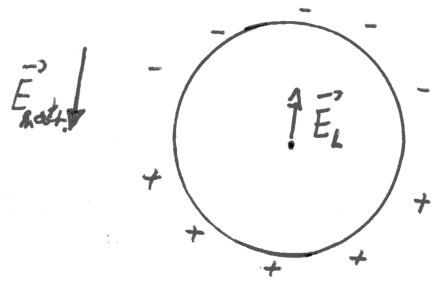
$$\sum_j f_j = 1 \quad (10b)$$

$$\epsilon_1(\omega) = n^2 - k^2 = 1 + \frac{4\pi e^2 n}{m} \sum_j \frac{(\omega_j^2 - \omega^2) f_j}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \Gamma_j^2 \omega^2} \quad (11a)$$

$$\epsilon_2(\omega) = 2nk = \frac{4\pi e^2 n}{m} \sum_j \frac{\Gamma_j \omega f_j}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \Gamma_j^2 \omega^2} \quad (11b)$$

Os resultados obtidos até agora consideraram uma relação linear entre \vec{E} e \vec{P} e desprezaram correções do campo local ao campo externo. Este não é, em geral, o caso real e correções devem ser introduzidas na Eq. 10.

Para o caso mais simples, de um átomo esférico,



(\vec{E}_L = campo de Lorentz produzido pela polarização das cargas)

$$\vec{E}_{\text{loc}} = \vec{E}_{\text{ext}} + \frac{4}{3} \pi \vec{P} \tag{116}$$

onde \vec{P} é a polarização média. Isto resulta na conhecida relação de Clausius-Mossotti:

$$\left(\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \right) = \frac{4}{3} \pi n \chi(\omega) \tag{117}$$

que deve substituir a relação linear 7,

$$\epsilon(\omega) = 1 + 4\pi n \chi(\omega) \tag{118}$$

A análise anterior fica mais complicada e, eventualmente, a situação de reflexão total ($\epsilon < 0$) é evitada.

A expressão 10 nos reproduz a situação para os metais onde

$$k w_j = \epsilon_j - \epsilon_0 \approx 0 \quad (12)$$

e

$$\epsilon_1(\omega) = 1 - \frac{4\pi n e^2}{m \omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (13)$$

que é a expressão já conhecida.

Para frequências baixas, e considerando materiais isolantes ou semicondutores,

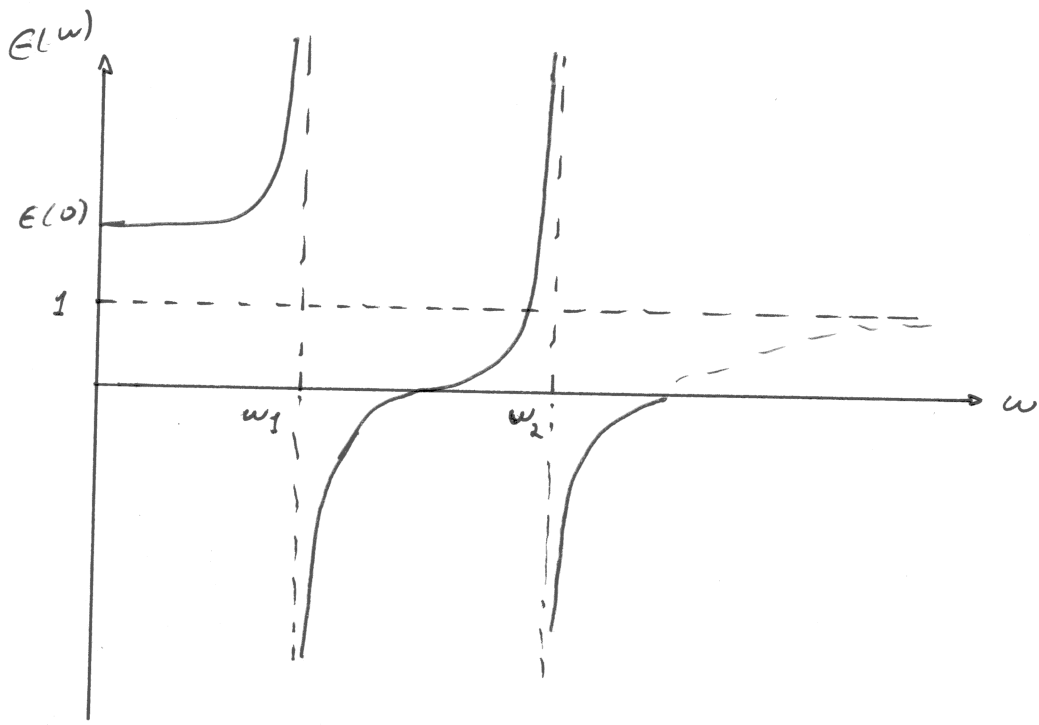
$$\epsilon_1(\omega) \approx \epsilon_1(0) \approx 1 + \sum_j f_j \frac{\omega_p^2}{\omega_j^2} > 1 \quad (14)$$

Em geral $\epsilon_1(\omega)$ aumenta até encontrar uma singularidade em $\omega = \omega_j$ e tende para a Eq. 13 para $\omega > \text{tds. } \omega_j$.

Vamos analisar agora a região de frequências $\omega \approx \omega_j$. Se $\epsilon < 0$, desprezando σ e i , temos

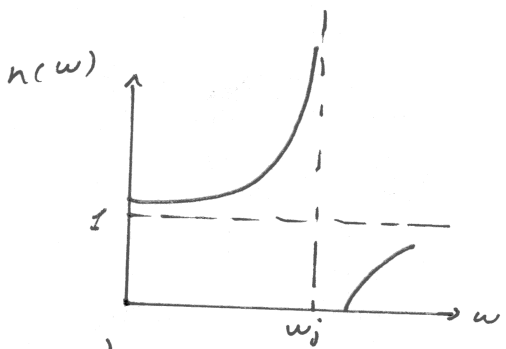
$$n = 0, k = \sqrt{\epsilon} \quad \text{e} \quad R = 1 \quad (15)$$

Na prática, o material é transparente ($\epsilon > 0$) até $\omega = \omega_j$, quando ele se torna opaco e perfeitamente refletor ($\epsilon < 0$). A frequências mais altas ele volta

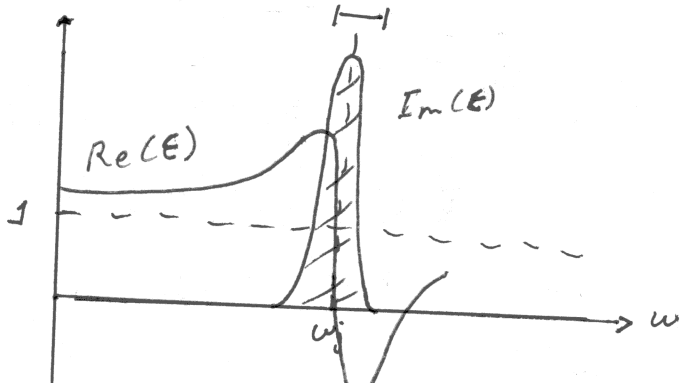
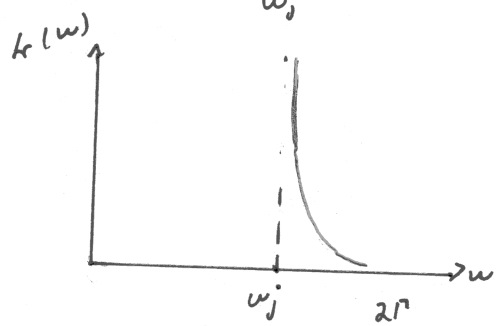


Para $\Gamma \rightarrow 0$ as Eqs. 11 ficam (ou Eq. 10)

$$E(\omega) = 1 + \frac{4\pi A e^2}{m} \sum_j f_j \left[\frac{1}{\omega_j^2 - \omega^2} + \frac{i\pi}{2\omega} \delta(\omega^2 - \omega_j^2) \right] \quad (15)$$



$\Gamma = 0$



$\Gamma \neq 0$

b) modelo quântico

O sucesso do modelo de Lorentz, como do modelo de Drude para metais, é que a função dielétrica e a polarização obtidas através dele têm a mesma forma que a soluções quântica.

Nós assumimos que conhecemos os estados do sistema antes da perturbação ($t=0$):

$$H_0 \Phi_n = E_n \Phi_n \quad (19)$$

No instante $t=0$ nós aplicamos uma perturbação dependente do tempo:

$$H = H_0 + H_1(t) \quad (20)$$

A solução da Eq. de Schrödinger dependente do tempo pode ser escrita sob a forma

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) \Phi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (21)$$

Substituindo na Eq. de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = (H_0 + H_1) \Psi \quad (22)$$

nós obtemos

$$i\hbar \sum_n \frac{da_n}{dt} \Phi_n e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_n a_n H_1 \Phi_n e^{-iE_n t/\hbar} \quad (23)$$

multiplicando por $\phi_m^* e^{i\epsilon_n t/\hbar}$ e integrando no espaço \vec{r} obtemos (8)

$$i\hbar \frac{da_m}{dt} = \sum_n a_n H_{mn}^1 e^{-i(\epsilon_m - \epsilon_n)t/\hbar} \quad (24)$$

onde

$$H_{mn}^1 = \int \phi_m^* H_1 \phi_n d\vec{r} \quad (25)$$

Vamos considerar agora as condições iniciais do problema.

Suponhamos que o átomo encontra-se inicialmente no estado fundamental (com esta suposição estamos limitando nossa análise aos problemas de polarização e absorção; a emissão não está descrita aqui):

$$a_n = \delta_{n0} \quad , \quad t=0 \quad (26)$$

então,

$$i\hbar \frac{da_m(t)}{dt} = H_{m0}^1 e^{i(\epsilon_m - \epsilon_0)t/\hbar} = H_{m0}^1 e^{i\omega_{m0}t} \quad (27)$$

Precisamos considerar agora o campo perturbador. Este é o campo elétrico da onda eletromagnética. Desprezamos mais uma vez a contribuição do campo magnético. Tratamos o campo classicamente. Na aproximação linear,

$$H_1 = -e \vec{E}_{lc} \cdot \vec{r} \quad (28.a)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_0 e^{i\omega t} + \vec{r}_1 e^{-i\omega t} \quad (28.b)$$

ou seja,

$$H_1 = -e \vec{E}_0 \cdot \vec{r} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (29)$$

e

$$H_{m0} = -e \vec{E}_0 \cdot \vec{r}_{m0} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (30)$$

onde

$$\vec{r}_{m0} = \int \psi_m^* \vec{r} \psi_0 d\vec{r} \quad (31)$$

Utilizando as condições iniciais da Eq. 26, o cálculo de a_m é imediato:

$$a_m = \frac{e \vec{E}_0 \cdot \vec{r}_{m0}}{k} \left[\frac{1 - e^{i(\omega_{m0} + \omega)t}}{\omega_{m0} + \omega} + \frac{1 - e^{i(\omega_{m0} - \omega)t}}{\omega_{m0} - \omega} \right] \quad (32)$$

O momento de dipolo induzido é

$$\begin{aligned} \vec{p} &= \langle -e \vec{r} \rangle = \int \psi^* (-e \vec{r}) \psi d\vec{r} = \\ &= - \sum_{k,l} a_k^* \phi_k^* e^{i\epsilon_k t/\hbar} (e \vec{r}) a_l \phi_l e^{-i\epsilon_l t/\hbar} d\vec{r} \end{aligned} \quad (33)$$

Considerando as condições iniciais, e mantendo a hipótese de um campo fraco, é razoável assumir que os termos cruzados $a_k^* a_l$ serão significativos se k ou l for "0" ($a_0 \approx 1$). Neste caso, uma das somatórias é eliminada. Temos então,

$$\vec{p} = - \sum_m \int [a_m^* \phi_m^* e^{i\epsilon_m t/\hbar} (e^{\vec{r}}) a_0 \phi_0 e^{-i\epsilon_0 t/\hbar} + a_0^* \phi_0^* e^{i\epsilon_0 t/\hbar} (e^{\vec{r}}) a_m \phi_m e^{-i\epsilon_m t/\hbar}] d\vec{r} \quad (34)$$

Assumindo $a_0 = a_0^* = 1$ e considerando $\epsilon_m - \epsilon_0 = \hbar \omega_m$,

$$\vec{p} = -e \sum_m [\vec{T}_{m0} a_m^* e^{i\omega_m t} + \vec{T}_{m0} a_m e^{-i\omega_m t}] \quad (35)$$

Substituindo a_m (e a_m^*) pela Eq. 32 (e seu complexo conjugado), e fazendo $\vec{E}_0 \parallel \vec{z}$,

$$|\vec{p}| = \frac{e^2 |\vec{E}_0|}{\hbar} \sum_m |\vec{T}_{m0}|^2 \left[\frac{e^{-i\omega t} + e^{i\omega_m t}}{\omega_m + \omega} + \frac{e^{i\omega t} - e^{-\omega_m t}}{\omega_m - \omega} + \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega_m t}}{\omega_m + \omega} + \frac{e^{-i\omega t} - e^{-i\omega_m t}}{\omega_m - \omega} \right] \quad (36)$$

Se nós pensarmos em tempos de média temporal, nós podemos desprezar os termos rapidamente oscilantes e fora de fase com o campo externo ($e^{\pm i\omega_m t}$):

$$|\vec{p}| = \frac{e^2 |\vec{E}_0|}{\hbar} \sum_m |\vec{T}_{m0}|^2 \left[\frac{1}{\omega_m + \omega} + \frac{1}{\omega_m - \omega} \right] (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (37)$$

Comparando com a Eq. 5, $\vec{p} = \chi \vec{E}$,

$$\chi = \sum_m \frac{2e^2 |\vec{k}_{m0}|^2}{\hbar} \frac{\omega_{m0}}{\omega_{m0}^2 - \omega^2} \quad (38)$$

A polarização é real. Isto se deve a forma da nossa solução onde consideramos os estados excitados como sendo estados estacionários.

Devemos observar também que assumimos um campo elétrico de grande comprimento de onda (i.e., $\lambda \gg a_0$), desprezando assim a dependência espacial de \vec{E} e tomando-o como sendo o valor no núcleo. Esta mesma aproximação é responsável pela ausência de dependência em " \vec{q} " na polarização. Na verdade, estamos trabalhando no limite $q \rightarrow 0$.

Vamos agora ir além da aproximação de níveis excitados estacionários e permitir a absorção. Esta está necessariamente presente. Para observarmos isto basta lembrar as relações de Kramers-Kronig:

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + 4\pi\chi = 1 + 4\pi \sum_m \frac{2e^2 |\vec{k}_{m0}|^2}{\hbar} \frac{\omega_{m0}}{\omega_{m0}^2 - \omega^2} \quad (39)$$

e

$$i\epsilon_2(\omega) = 4\pi \sum_m \frac{e^2}{\hbar} \frac{\omega_{m0} |\vec{k}_{m0}|^2}{\omega} i\pi\delta(\omega^2 - \omega_{m0}^2) \quad (40)$$

Nós podemos introduzir a absorção modificando os estados estacionários. Isto pode ser feito empiricamente, sem resolver o problema quântico, introduzindo um tempo de decaimento do estado estacionário, considerando-o então como um estado quase-estacionário:

$$E_n \rightarrow E_n + \frac{1}{2} i \hbar \Gamma_n \quad (41)$$

Para simplificar as expressões vamos desprezar o alargamento do nível fundamental, E_0 . Essencialmente, estamos dizendo que o nível m -ésimo tem uma probabilidade de ser ocupado que é igual a $e^{-\Gamma_m t}$ (respectivamente, o estado fundamental, "0", decai com a taxa $e^{-\Gamma_0 t}$). O tempo de vida do estado, $\frac{1}{\Gamma_n}$, inclui efeitos de espalhamento devidos a fônons, impurezas, etc...

Se desenvolvermos as Eqs. utilizando a Eq. 41, obtemos

$$\begin{aligned} |\vec{p}\rangle &= \frac{e^{2i\vec{E}_0 t}}{\hbar} \sum_m |\vec{p}_{m0}|^2 \left[\left(\frac{1}{\omega_{m0} + \omega + \frac{1}{2} i \Gamma_m} + \frac{1}{\omega_{m0} - \omega - \frac{1}{2} i \Gamma_m} \right) e^{i\omega t} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{\omega_{m0} - \omega + \frac{1}{2} i \Gamma_{m0}} + \frac{1}{\omega_{m0} + \omega - \frac{1}{2} i \Gamma_m} \right) e^{-i\omega t} \right] = \\ &= e^{2i\vec{E}_0 t} \sum_m |\vec{p}_{m0}|^2 \left[\frac{2\omega_{m0} e^{i\omega t}}{\omega_{m0}^2 - \omega^2 + \frac{1}{4} \Gamma_m^2 - i \Gamma_m \omega} + \frac{2\omega_{m0} e^{-i\omega t}}{\omega_{m0}^2 - \omega^2 + \frac{1}{4} \Gamma_m^2 + i \Gamma_m \omega} \right] \quad (42) \end{aligned}$$

Desprezamos $\frac{1}{4} \Gamma_m^2$ em relação a ω_{m0}^2 . Temos então,

$$|\vec{p}| = \frac{e^2 |\vec{E}_0|}{k} \sum_m |\vec{k}_{m0}|^2 \left\{ \frac{\omega_{m0} (\omega_{m0}^2 - \omega^2)}{(\omega_{m0}^2 - \omega^2)^2 + \Gamma_m^2 \omega^2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) + \frac{i \omega_{m0} \Gamma_m \omega}{\omega_{m0}^2 - \omega^2 + \Gamma_m^2 \omega^2} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \right\} \quad (43)$$

O primeiro termo está em fase com o campo e nos dá a parte real de ϵ_T . O segundo termo está 90° fora de fase com o campo e é responsável pelo termo de absorção de energia, conduzindo à parte imaginária de ϵ_T .

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{8\pi n e^2}{k^2} \sum_m |\vec{k}_{m0}|^2 \frac{k \omega_{m0} (\omega_{m0}^2 - \omega^2)}{(\omega_{m0}^2 - \omega^2)^2 + \Gamma_m^2 \omega^2} \quad (44.a)$$

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{8\pi n e^2}{k^2} \sum_m |\vec{k}_{m0}|^2 \frac{k \omega_{m0} \Gamma_m \omega}{(\omega_{m0}^2 - \omega^2)^2 + \Gamma_m^2 \omega^2} \quad (44.b)$$

onde fazemos a "média" sobre n átomos, independentes, por volume. Vamos agora definir a força de oscilador do cristal,

$$f_{m0} = \frac{2m k \omega_{m0} |\vec{k}_{m0}|^2}{k^2} \quad (45)$$

e então,

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi n e^2}{k^2} f_{m0} \left[\frac{\omega_{m0}^2 - \omega^2}{(\omega_{m0}^2 - \omega^2)^2 + \Gamma_m^2 \omega^2} + i \frac{\Gamma_m \omega}{\omega_{m0}^2 - \omega^2 + \Gamma_m^2 \omega^2} \right]$$

A Eq. 46 é formalmente idêntica ao resultado do modelo de Lorentz (Eq. 10.a). A diferença está na definição da força de oscilador, onde no modelo clássico tínhamos $f_j = \frac{\eta_j}{n}$ e no modelo quântico f_{j0} é definida pela Eq. 45.

Implicitamente, esperamos que f_{m0} obedece a regra de soma

$$\sum_m f_{m0} = 1 \tag{47}$$

Vamos agora mostrar que esta relação é válida e é mais geral, valendo também para as transições a partir de estados excitados:

$$\sum_m f_{mn} = 1 \tag{48}$$

Vamos começar pela definição da Eq. 45, escolhendo a direção x para a polarização:

$$\begin{aligned} \sum_m f_{mn} &= \sum_m \frac{2m}{\hbar^2} (E_m - E_n) x_{mn} x_{nm} = \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \sum_m \frac{1}{2} [x_{nm} (E_n - E_m) x_{mn} + x_{nm} (E_m - E_n) x_{mn}] \end{aligned} \tag{49}$$

Mas, se $V = V(\vec{r})$, então

$$(E_m - E_n) x_{mn} = [H, x]_{mn} \tag{50.a}$$

$$(E_n - E_m) x_{nm} = - [H, x]_{nm}$$

e a Eq. 49 fica

$$\sum_m f_{mn} = \frac{2m}{\hbar^2} \sum_m \frac{1}{2} [x_{nm} [H, x]_{mn} - [H, x]_{nm} x_{mn}] \quad (51)$$

e utilizando a propriedade de "fechamento", para uma base completa,

$$\sum_m \langle n|A|m\rangle \langle m|B|n\rangle = \langle n|AB|n\rangle \quad (52)$$

temos

$$\begin{aligned} \sum_m f_{mn} &= -\frac{m}{\hbar^2} \{ [H, x]x - x[H, x] \}_{nn} = \\ &= -\frac{m}{\hbar^2} [[H, x], x]_{nn} \end{aligned} \quad (53)$$

Se escrevermos o Hamiltoniano explicitamente,

$$\begin{aligned} [[H, x], x] &= \left[\left[\frac{p^2}{2m}, x \right], x \right] = [[V, x], x] = \\ &= \left[\left[\frac{p^2}{2m}, x \right], x \right] \end{aligned} \quad (54)$$

Mas,

$$[p, x] = -i\hbar \quad (55.a)$$

$$\Rightarrow [p^2, x] = -2i\hbar p \quad (55.b)$$

Temos então,

(16)

$$\sum_m f_{mn} = 1 \quad (56)$$

para átomos de um elétron. Se tivermos Z elétrons por átomo participando das transições e se estes são independentes uns dos outros,

$$\sum_m f_{mn} = Z \quad (57)$$

Utilizando os resultados anteriores, podemos reescrever a força de oscilador em termos de elementos de matriz do momento em vez de elementos de matriz do dipolo:

$$\begin{aligned} f_{mn} &= \frac{2m}{\hbar^2} x_{nm} (E_m - E_n) x_{mn} = \frac{2m}{\hbar^3 \omega_{mn}} (E_m - E_n) x_{nm} (E_m - E_n) x_{mn} = \\ &= \frac{2m}{\hbar^3 \omega_{mn}} \left(\frac{1}{2m}\right)^2 p_{mn} (-p_{nm}) (-2i\hbar)^2 = \frac{2}{m \hbar \omega_{mn}} |p_{mn}|^2 \quad (58) \end{aligned}$$

onde

$$p_{mn} = \int \phi_m^* (-i\hbar \vec{\nabla}_x) \phi_n d\vec{r} \quad (59)$$

(17)

Podemos comparar a força de oscilador quântico com a clássica. Para isto calculamos a potência de absorção, P_{qm} ,

$$\begin{aligned}
 P_{qm} &= (\text{transições p/segundo}) \times (\text{energia absorvida por transição}) = \\
 &= \frac{d}{dt} (a_m^* a_n) (\hbar \omega_{mn}) = \\
 &= \frac{\pi e^2 |\vec{E}|^2 |x_{mn}|^2 \hbar \omega_{mn}}{2 \hbar^2} \quad (60)
 \end{aligned}$$

O resultado clássico é

$$P_{cl.} = \frac{\pi e^2 |\vec{E}|^2}{4m} \quad (61)$$

e então

$$\frac{P_{qm}}{P_{cl.}} = \frac{2m \hbar \omega_{mn} |x_{mn}|^2}{\hbar^2} = f_{mn} \quad (62)$$

Ou seja, "uma transição quântica do estado n " para o estado m " comporta-se como um oscilador clássico com força f_{mn} ".

Ou, equivalentemente, como havíamos visto antes, a força de oscilador clássico é a fração de elétrons ligados por um oscilador clássico com constante de mola $\omega_{mn}^2 m$.

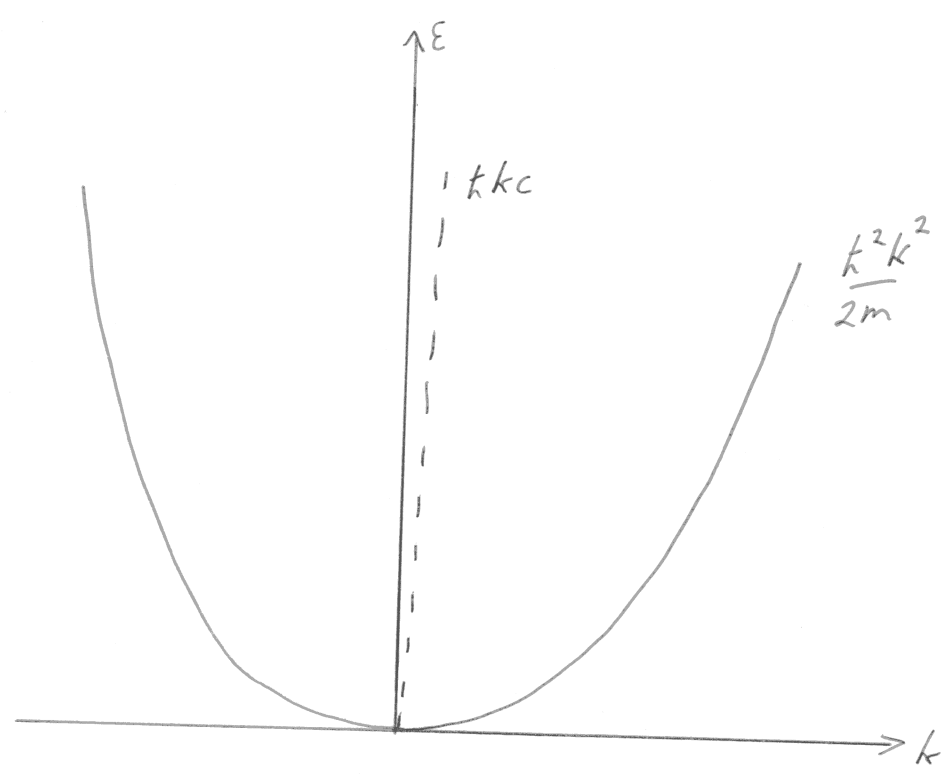
A regra de soma, tal como expressa pela Eq. 57, considera apenas átomos livres. Se levarmos em consideração o potencial periódico, pode-se mostrar que

$$\sum_m f_{mn} = 1 - \frac{m}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \epsilon_n}{\partial k^2} = 1 - \frac{m}{m^*} \tag{63}$$

A primeira consequência, imediata, desta relação pode-se observar se fizermos $m^* \rightarrow m$. Isto é,

$$\sum_{mn} f_{mn} \rightarrow 0 \tag{64}$$

Ou seja, não há absorção de fótons para elétrons livres. Isto é esperado uma vez que neste caso os requisitos de conservação de momento e energia não podem ser satisfeitos simultaneamente.



O outro resultado, que já conhecemos, envolve a soma $\int_0^{\infty} \omega \epsilon_2 \omega d\omega$.

A origem desta regra de soma é a taxa de absorção de energia por volume retirando-a do campo elétrico:

$$\frac{dE}{dt} = \text{Re}(\vec{E} \cdot \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}) = \text{Re}[\vec{E} \cdot (\epsilon_1 + i\epsilon_2) \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}] =$$

$$= \omega \epsilon_2 |E|^2 \tag{65}$$

para um campo com dependência temporal $e^{-i\omega t}$.

Utilizando o resultado clássico,

$$\epsilon_2 = \frac{4\pi n e^2}{m} \frac{\Gamma \omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \tag{66}$$

temos

$$\int_0^{\infty} \omega \epsilon_2(\omega) d\omega = \frac{4\pi n e^2 \Gamma}{m} \int_0^{\infty} \frac{\omega^2 d\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \Gamma^2 \omega^2} =$$

$$= \omega_p^2 \Gamma \int_0^{\infty} \frac{\omega^2 d\omega}{(\omega_0 - \omega)^2 (\omega_0 + \omega)^2 + \Gamma^2 \omega^2} \approx$$

$$\approx \frac{\omega_p^2 \Gamma \omega_0^2}{4\omega_0^2} \int_0^{\omega_0} \frac{d\omega}{(\omega_0 - \omega)^2 + \Gamma^2 \omega^2} =$$

$$= \frac{\omega_p^2 \Gamma}{4} \frac{2}{\Gamma} \tan^{-1}\left(\frac{2\omega - 2\omega_0}{\Gamma}\right) \Big|_0^{\omega_0} = \frac{1}{2} \pi \omega_p^2 \tag{67}$$

Em geral, é necessário integrar sobre uma região de frequências bastante larga. Na prática, é muito difícil "saturar" a integral. Escreveremos então,

$$\int_0^{\omega_c} \omega E_2(\omega) d\omega = \frac{1}{2} \pi \left(\frac{4\pi N a c^2}{m} \right) n_{ef}(\omega_c) \tag{68}$$

onde $N a$ é a densidade de átomos e n_{ef} é o número de elétrons por átomo que participam das propriedades óticas.